DOI:10.14182/J.cnki.1001-2443.2017.06.008

氦原子里德堡态(1snp)的平方塞曼效应

朱志海, 黄时中

(安徽师范大学 物理与电子信息学院,安徽 芜湖 241000)

摘 要:以氦原子在强磁场中的塞曼效应哈密顿和氦原子能级的精细结构理论为基础,借助角动量耦合理论以及不可约张量理论,在$|LSJM_J\rangle$耦合表象中解析地导出了强磁场中氦原子平方塞曼效应哈密顿本征方程之解,具体地给出了氦原子里德堡态(1snp)的平方塞曼分裂能级表达式.

关键词:氦原子;强磁场;平方塞曼效应

中图分类号:O562.1 **文献标志码:**A **文章编号:**1001-2443(2017)06-0558-05

引 言

随着近代科学技术的快速发展,强磁场作为一种极端条件在发现新现象和认识新现象等方面越来越显露出其重要作用.强磁场[1-5]中原子的能级结构是一个重要的基础问题,关于氢原子和氦原子在磁场中的能级结构已有不少研究.例如,2009 年,Thirumalai 等通过求解 H-F 微分方程[5],在柱坐标系中计算了不同强度的磁场中氢原子的几个低能级的理论值.2010 年,张昌莘等应用简并态微扰方法[6]研究了在中等磁场中氢原子的能级结构特征.2011 年,褚进民等借助角动量耦合理论[7]导出了中等磁场中氢原子 $n=5$ 的能级结构表达式.2011 年, 曾思良等采用非微扰理论方法[8]研究了强磁场中氢原子的能级结构.然而,关于氦原子以及多电子原子塞曼效应的研究,主要还是限于弱场情形的线性塞曼效应.相关的工作包括:1970 年,Lewis 等给出了弱场情形下塞曼哈密顿[9]的完整形式,不仅包含了通常的自旋和轨道角动量与外磁场的相互作用,还考虑到了原子核的运动、辐射修正、相对论修正.1973 年,Schiff 等给出了较准确的^{3}p 态精细结构裂距[10].1978 年,Kramer 等利用交叉光谱学技术测定了氦原子 3^3p 态的精细结构裂距[11].2000 年,黄时中等在考虑各种相对论修正、核运动修正和辐射修正的基础上,采用微扰与变分相结合的方法,给出了氦原子 2^3p 态线性塞曼效应的解析解[12].2005 年,Hansen 等测定了钙原子高激发态的朗德 g 因子[13].2006 年,孙云等利用塞曼哈密顿的球张量形式[14],采用微扰论与里兹变分方法相结合的方式,导出了氦原子 1snp 组态线性塞曼哈密顿矩阵元的一般形式,给出了氦原子 1s3p 组态线性塞曼效应之解,并绘出了氦原子 1s3p 组态的线性塞曼分裂能级图.本文将以氦原子在强磁场中的塞曼效应哈密顿和氦原子能级的精细结构理论为基础,借助角动量耦合理论以及不可约张量理论,在$|LSJM_J\rangle$耦合表象中解析地导出强磁场中氦原子平方塞曼效应哈密顿本征方程之解,首次给出氦原子里德堡态(1snp)的平方塞曼分裂能级的具体表达式,为进一步研究在强磁场中氦原子之间的相互作用色散系数[15]等问题奠定必要的理论基础.

1 氦原子平方塞曼效应哈密顿本征方程的近似解

在磁感强度为 $\vec{B}=B\vec{e}_z$ 的均匀外磁场中,单个电子的平方塞曼哈密顿为[16]

$$h_z=-(g_l\hat{l}_z+gs\hat{s}_z)\cdot\vec{B}+\frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 \tag{1}$$

其中 $g_l=-\frac{e}{2mc}$,$g_s=-\frac{e}{mc}$;$\hat{l}_z$ 和 $\hat{s}_z$ 分别表示电子的轨道角动量和自旋角动量算符沿 Z 轴的分量;$\vec{A}$表示

收稿日期:2016-12-08

基金项目:国家自然科学基金项目(11174005);安徽省自然科学基金项目(11040606M15).

作者简介:朱志海(1991-),男,安徽宿松人,硕士研究生.通讯作者:黄时中(1957-),男,安徽宿松人,博士,教授,硕士生导师.

引用格式:朱志海,黄时中.氦原子里德堡态(1snp)的平方塞曼效应[J].安徽师范大学学报:自然科学版,2017,40(6):558-562.

电子所在位置的矢势.氦原子中有两个电子,因此其平方塞曼哈密顿为

$$H_z = -(g_l\hat{L}_z + g_s\hat{S}_z)\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2}(\vec{A}_1^2 + \vec{A}_2^2) \tag{2}$$

其中 $\hat{L}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}$ 和 $\hat{S}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$ 分别是氦原子的总轨道角动量和总自旋角动量沿 Z 轴的分量;$\vec{A}_1$ 和 $\vec{A}_2$ 分别是电子 1 和电子 2 所在的位置的失势.

对于均匀磁场 $\vec{B}$,可以将矢势 $\vec{A}$ 表示为

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r} = \frac{1}{2}B\vec{e}_z\times(x\vec{e}_x + y\vec{e}_y) = \frac{1}{2}B\vec{e}_z\times(\vec{r})_\perp$$

于是有

$$\vec{A}^2 = \vec{A}\cdot\vec{A} = \frac{1}{4}B^2(r^2\sin^2\theta) \tag{3}$$

将其代入(2)式并采用原子单位(其中能量单位为 e^2/a)得到

$$H_z = \frac{1}{2}\gamma(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) + \frac{1}{8}\gamma^2(r_1^2\sin^2\theta_1 + r_2^2\sin^2\theta_2) \tag{4}$$

此处

$$\gamma = \frac{B}{B_0}, B_0 = \frac{mce}{a\hbar}, [2\alpha^2\frac{mce}{a\hbar} = 6.2585(T)]$$

分析氦原子在外加强磁场中的塞曼效应,主要任务是寻求氦原子总哈密顿

$$H = H_0 + H_z, H_0 = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \tag{5}$$

的本征解,上式中 H_0 表示自由氦原子的精细结构哈密顿[16].H_0 的本征解可以表示为[16]

$$\begin{cases} \hat{H}_0 \mid LSJM_J\rangle = E^{(0)}(LSJ) \mid LSJM_J\rangle \\ \vec{L}^2 \mid LSJM_J\rangle = L(L+1) \mid LSJM_J\rangle \\ \vec{S}^2 \mid LSJM_J\rangle = S(S+1) \mid LSJM_J\rangle \\ \vec{J}^2 \mid LSJM_J\rangle = J(J+1) \mid LSJM_J\rangle \\ \hat{J}^2 \mid LSJM_J\rangle = M_J \mid LSJM_J\rangle \end{cases} \tag{6}$$

其中

$$\mid LSJM_J\rangle = \sum_{M_LM_S} \mid LSM_LM_S\rangle\langle LSM_LM_S \mid LSJM_J\rangle \tag{7}$$

此处$\langle LSM_LM_S \mid LSJM_J\rangle$表示 $C.G.$ 系数;$\mid LSM_LS_S\rangle$表示氦原子的拉卡波函数,其具体的解析表达式见文献[18].

在一级近似下,H_z 对精细结构能级 $E^{(0)}(LSJ)$ 的修正值为

$$E_z(LSJ) = E_z^{(1)}(LSJM_J) + E_z^{(2)}(LSJM_J) \tag{8}$$

其中

$$E_z^{(1)}(LSJM_J) = \frac{\gamma}{2}\langle LSJM_J\rangle \mid (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \mid LSJM_J\rangle \tag{9a}$$

$$E_z^{(2)}(LSJM_J) = \frac{\gamma^2}{8}\langle LSJM_J \mid (r_1^2\sin^2\theta_1 + r_2^2\sin^2\theta_2) \mid LSJM_J\rangle \tag{9b}$$

利用一阶张量的投影定理可以简捷地计算出式(9a)中的对角元,得到

$$E_z^{(1)}(LSJM_J) = \frac{\gamma}{2}g_{LSJ}M_J \tag{10}$$

其中

$$g_{LSJ} = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{11}$$

将式(9b)中的 $\sin^2\theta_1$ 和 $\sin^2\theta_2$ 改写成不可约张量后,利用(7)式以及不可约张量理论中的 $W-E$ 定理

$$\langle jm \mid T_q^{(k)} \mid j'm'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\langle j'm'kq \mid jm\rangle\langle j \parallel T^{(k)} \parallel j'\rangle \tag{12}$$

以及有关约化矩阵元的下述计算公式

$$\langle j_1 j_2 j \parallel T^{(k)}(1) \parallel j'_1 j'_2 j' \rangle = (-1)^{j_1+j_2+j'+k}\delta(j_2, j'_2)\sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \times \begin{Bmatrix} j & k & j' \\ j'_1 & j_2 & j_1 \end{Bmatrix} \langle j_1 \parallel T^{(k)}(1) \parallel j'_1 \rangle \tag{13a}$$

$$\langle j_1 j_2 j \parallel U^{(k)}(2) \parallel j'_1 j'_2 j' \rangle = (-1)^{j_1+j_2+j'+k}\delta(j_1, j'_1)\sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \times \begin{Bmatrix} j & k & j' \\ j'_2 & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \langle j_2 \parallel T^{(k)}(2) \parallel j'_2 \rangle \tag{13b}$$

$$\langle l \parallel \vec{C}^{(L)} \parallel l' \rangle = (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & L & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{13c}$$

可以进一步计算出式(9b)中的对角元,得到

$$\begin{aligned} E_z^{(2)}(LSJM_J) = {} & \frac{\gamma^2}{24Z^2}\{n_1^2[5n_1^2 - 3l_1(l_1+1)+1] + n_2^2[5n_2^2 - 3l_2(l_2+1)+1]\} \\ & - \frac{\sqrt{4}\gamma^2}{24}(-1)^L(2L+1)(2J+1)G(n_1l_1, n_2l_2, LS) \\ & \times \sum_{M_L M_S} \frac{3M_L^2 - L(L+1)}{\sqrt{(2L+3)(2L+1)(2L-1)(L+1)L}} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & -M_J \end{pmatrix}^2 \end{aligned} \tag{14}$$

其中

$$\begin{aligned} G(n_1l_1, n_2l_2, LS) = {} & (-1)^{l_2}\langle R_{n_1l_1}(r) \mid r^2 \mid R_{n_1l_1}(r)\rangle(2l_1+1)\begin{pmatrix} l_1 & 2 & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} L & 2 & L \\ l_1 & l_2 & l_1 \end{Bmatrix} \\ & + \langle R_{n_1l_1}(r) \mid r^2 \mid R_{n_2l_2}(r)\rangle\langle R_{n_1l_1}(r) \mid R_{n_2l_2}(r)\rangle(-1)^{L+S}\delta(l_1, l_2)(2l_1+1) \\ & \times \begin{pmatrix} l_1 & 2 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\left[(-1)^{l_2}\begin{Bmatrix} L & 2 & L \\ l_1 & l_1 & l_2 \end{Bmatrix} + (-1)^{l_1}\begin{Bmatrix} L & 2 & L \\ l_2 & l_2 & l_1 \end{Bmatrix}\right] \\ & + (-1)^{l_1}\langle R_{n_2l_2}(r) \mid r^2 \mid R_{n_2l_2}(r)\rangle(2l_2+1)\begin{pmatrix} l_2 & 2 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} L & 2 & L \\ l_2 & l_1 & l_2 \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{15}$$

上式中的径向函数的具体形式是

$$R_{nl}(r) = \exp\left(\frac{-\eta_{nl}r}{n}\right)\sum_{k=0}^{n-l-1} B_{nl}(k, \eta_{nl})r^{l+k} \tag{16a}$$

$$B_{nl}(k, \eta_{nl}) = (-1)^k\left(\frac{2\eta_{nl}}{n}\right)^{k+1+l}\frac{\sqrt{(n-l-1)!(n+l)!(\eta_{nl})}}{(n-l-1-k)!(2l+k+1)!k!n} \tag{16b}$$

此处 n_{nl} 是采用变分方法计算非相对论性哈密顿 H_{NR} 的本征值 $E_{NR}(LS)$ 的过程中所得到的变分参数.

2 氦原子里德堡态(1*snp*)的平方塞曼效应

作为上述理论的应用,我们来具体分析氦原子里德堡态(1*snp*)的平方塞曼效应.氦原子(1*snp*)组态的精细结构如图1所示.

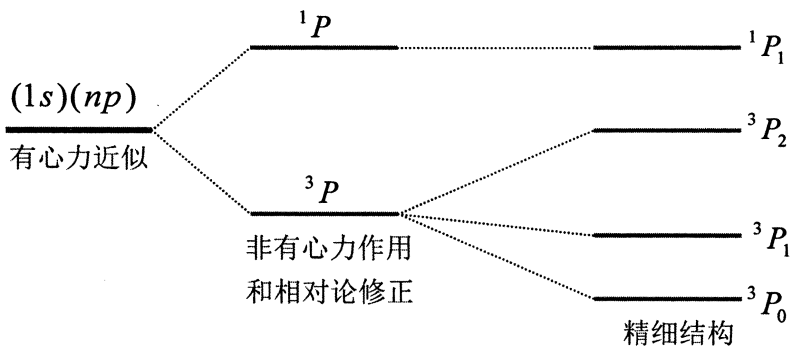

图1 氦原子(1*snp*)组态的精细结构能级示意图

对于氦原子(1*snp*)的组态,利用式(11)可以得到精细结构能级$^1P_1$、$^3P_2$、$^3P_1$的 g_{LSJ} 值为

$$g(^1P_1) = 1,\ g(^3P_2) = \frac{3}{2},\ g(^3P_1) = \frac{3}{2}$$

再利用(10) 式可以进一步得到线性塞曼效应部分($\gamma = B/B_0$ 的一次项) 的具体表达式，即

$$E_Z^{(1)}(1snp^1P_{1M_J}) = \frac{\gamma}{2}M_J \quad (M_J = 1,0,-1) \tag{17a}$$

$$E_Z^{(1)}(1snp^3P_{2M_J}) = \frac{3\gamma}{4}M_J \quad (M_J = 2,1,0,-1,-2) \tag{17b}$$

$$E_Z^{(1)}(1snp^3P_{1M_J}) = \frac{3\gamma}{4}M_J \quad (M_J = 1,0,-1) \tag{17c}$$

$$E_Z^{(1)}(1snp^3P_{00}) = 0 \tag{17d}$$

在氦原子($1snp$) 组态中，$n_1 = 1$、$l_1 = 0$、$n_2 = n$、$l_2 = 1$，由此可以将(14) 式(γ 的二次项 —— 平方塞曼效应) 具体地写成

$$E_Z^{(2)}(1snpLSJM_J) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] - \frac{\sqrt{4}\gamma^2}{24}(-1)^L(2L+1)(2J+1)G(1s,np,LS) \times \sum_{M_LM_S}\frac{3M_L^2 - L(L+1)}{\sqrt{(2L+3)(2L+1)(2L-1)(L+1)L}}\begin{pmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & -M_J \end{pmatrix}^2 \tag{18}$$

下面逐一分析精细结构能级$^1P_1$、$^3P_2$、$^3P_1$、$^3P_0$ 的平方塞曼效应. 先分析精细结构能级$^1P_1$ 的平方塞曼效应.

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{1M_J}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{3\sqrt{2}\gamma^2}{8\sqrt{15}}G(1s,np,^1P)\left[p\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2 - 2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2\right] \tag{19}$$

利用式(15) 和(16) 计算出上式中的径向因子 $G(1s,np,^1P)$，得到

$$G(1snp,^1P) = \left[\frac{5n^2(n^2-1)}{Z^2\sqrt{30}}\right] \tag{20}$$

将式(20) 代入式(19) 得到

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{1M_J}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{8Z^2} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2 - 2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & -M_J \end{pmatrix}^2 \tag{21}$$

依据 $M_J = 1,0,-1$ 计算出式(21) 中的 $3j$ 符号之值，可以得到

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{11}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{24Z^2} \tag{22a}$$

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{10}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{24Z^2} \times (-2) \tag{22b}$$

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{1,-1}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{24Z^2} \tag{22c}$$

综合以上三式，我们得到精细结构能级$^1P_1$ 的平方塞曼效应项的如下表达式

$$E_Z^{(2)}(1snp^1P_{1M_J}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{24Z^2}(3M_J^2 - 2)(M_J = 1,0,-1) \tag{23}$$

类似地分析精细结构能级$^3P_2$、$^3P_1$、$^3P_0$ 的平方塞曼效应，可以进一步得到

$$E_Z^{(2)}(1snp^3P_{2M_J}) = \frac{\gamma^2[6 + 5n^2(n^2-1)]}{24Z^2} + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{48Z^2}(M_J^2 - 2)(M_J = 2,1,0,-1,-2) \tag{24}$$

$$E_Z^{(2)}(1snp^3P_{1M_J}) = \frac{\gamma^2}{24Z^2}[6 + 5n^2(n^2-1)] + \frac{\gamma^2n^2(n^2-1)}{48Z^2}(2 - 3M_J^2)(M_J = 1,0,-1) \tag{25}$$

$$E_Z(1snp^3P_{00}) = \frac{\gamma^2[6 + 5n^2(n^2-1)]}{24Z^2}] \tag{26}$$

考察上述结果，不难看出氦原子里德堡态($1snp$) 的平方塞曼效应具有如下典型特征：

(1) $M_J = 0$ 的能级存在移动效应.且能级 $^1P_{10}$ 和 $^3P_{20}$ 向下移动;能级 $^3P_{10}$ 和 $^3P_{00}$ 向上移动.

(2) 能级裂距不再均匀(非线性效应).且能 $^1P_{1,1}$ 级向上移动,远离能级 $^1P_{10}$;能级 $^1P_{1,-1}$ 向上移动,靠近能级 $^3P_{10}$;能级 $^3P_{2,2}$ 向上移动,远离能级 $^3P_{20}$;能级 $^3P_{2,-2}$ 向上移动,靠近能级 $^3P_{20}$; 能级 $^3P_{1,1}$ 向下移动,靠近能级 $^3P_{10}$;能级 $^3P_{1,-1}$ 向下移动,远离能级 $^3P_{10}$.

参考文献:

[1] KRAVCHENKO Y P, LIBERMAN M A, et al. Exact solution for a hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary strength[J]. Physics Review A, 1996,(54):287-305.

[2] Saikat Ghosh, S H Patil. Wave functions for a hydrogen atom in a magnetic field based on some local properties[J]. J Phys B: At Mol Opt Phys, 2001,(34):3535-3542.

[3] A Rutkowski, a Poszwa. Hydrogen atom in a strong magnetic field[J]. Physical Review A, 2003,(67):1-6.

[4] Calvin Stubbins, Kunal Das and Yohannes Shiferaw. Low-lying energy levels of the hydrogen atom in a strong magnetic field[J]. J Phys B: At Mol Opt Phys, 2004,(37):2201-2209.

[5] Anand Thirumalai, Jeremy S Heyl. Hydrogen and helium atoms in strong magnetic fields[J]. Physics Review A, 2009,(79):012514.

[6] 张昌莘.在均匀强磁场中氢原子能级计算[J].安徽师范大学学报:自然科学版,2010,33(5):438-442.

[7] 褚进民,李淑贞,黄时中.中等强度磁场中氢原子能级的计算[J].安徽师范大学学报:自然科学版,2011,34(3):238-240.

[8] 曾思良,倪飞飞,何建锋,等.强磁场中氢原子的能级结构[J].物理学报,2011,60(4):043201.

[9] LEWIS S A, PICHANICK F M J, HUGHES V W. Experiments on the 2^3P state of helium ‖ measurements of the zeeman effect[J]. Physics Review A, 1970,(2):86.

[10] BCHIFF B, ACCAD Y, PEKERIS C L. Correction to the n^3P_1 levels of the helium lsoelectronic sequence owing to mixing with the n^1P_1 state [J]. Physics Review A, 1973,(8):2272.

[11] KRAMER P B. New measurement of the fine structure in the 3^3P state of ^{4}He[J]. Physics Review A, 1978,(18):212.

[12] 黄时中,赵献章.The Zeeman effect of 2-3P states of helium[J].原子与分子物理学报,2000,17(1):133.

[13] HANSEN D, HEMMERICH A. Doppler-free spectroscopy of metastable calcium in a discharge heat pipe[J]. Physics Review A, 2005,(72): 022502.

[14] 孙云,黄时中.Zeeman effect of the 1snp configuration of helium[J].原子与分子物理学报,2006,23(6):1083-1091.

[15] 邓泽森,黄时中.利用WBEPM模型和稳定变分法计算氦原子的极化率和色散系数[J].原子与分子物理学报,2015,32(5):738-742.

[16] 黄时中.原子结构理论[M].北京:高等教育出版社,2016:224-351.

The Square Zeeman Effect on the Rydberg States of Helium in Configuring (1snp)

ZHU Zhi-hai, HUANG Shi-zhong

(College of Physics and Electronic Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China)

Abstract: Based on the Zeeman Hamilton of helium in strong magnetic field and fine structure theory of helium, an analytical expression for the square Zeeman effect on the Rydberg States of Helium is derived under the $|LSJM_J\rangle$ representation by virtue of angular momentum coupling theory and irreducible tensor theory, concrete expressions for the 1snp configuration is generated.

Key words: helium atom; strong magnetic field; Square Zeeman Effect