

# Расчёт констант сверхтонкой структуры в атоме лития и однозарядном ионе бериллия

Я. И. Давлетшин<sup>1</sup>, С. Д. Холмес<sup>1</sup>, Ю. А. Демидов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
iurii.demidov@gmail.com

**Аннотация.** В работе рассмотрены прецизионные методы расчёта спектра и констант сверхтонкой структуры для атома лития и гелиоподобного иона бериллия. Проанализирован вклад электронных корреляций и поправок на конечный размер ядра в значения констант сверхтонкой структуры этих систем. Полученные результаты позволяют исследовать изменения в распределении намагниченности в ядрах изотопов лития.

**Ключевые слова:** атомные спектры, сверхтонкая структура уровней

## I. ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие электронов с ядром приводит к сверхтонкому расщеплению  $\Delta E$  в спектрах атомов и ионов, которое выражается формулой:

$$\Delta E = A[F(F + 1) - I(I + 1)j(j + 1)]/2.$$

Здесь  $A$  – магнитная дипольная константа сверхтонкой структуры,  $F$  – полный момент атома,  $I$  – спин ядра,  $j$  – полный момент электрона. Константы сверхтонкой структуры могут быть измерены экспериментально с высокой точностью. Их величина сильно зависит от свойств ядра: его спина и магнитного момента  $\mu$ . Эти свойства сильно меняются для различных изотопов, кроме того с увеличением числа нейтронов постепенно растёт радиус ядра. Поэтому в выражении для константы сверхтонкой структуры важно разделить атомные и ядерные параметры. В общем виде это выражение может быть записано в следующей форме [1]:

$$A = gA_0(1 - \delta)(1 - \epsilon).$$

Здесь  $g = \mu/I$  – ядерный  $g$ -фактор,  $A_0$  – магнитная дипольная константа сверхтонкой структуры для точечного ядра,  $\delta$  – поправка на конечное распределение заряда ядра (Брейта–Розенталь),  $\epsilon$  – поправка на распределение ядерной намагниченности (Бора–Вайскопфа). Параметр  $A_0$  один и тот же для всех изотопов. Для водорода и водородоподобных ионов выражения для  $A_0$ ,  $\delta$  и  $\epsilon$  известны в аналитическом виде [1]. Поправки  $\delta$  и  $\epsilon$  можно записать в виде [2, 3]:

$$\delta = b_N(R/\lambda_c)^{2\gamma-1}, \quad \epsilon = d_{\text{nuc}}b_M(R/\lambda_c)^{2\gamma-1},$$

где  $R$  – радиус ядра,  $\lambda_c$  – приведённая комптоновская длина волны электрона,  $\gamma$  – релятивистское квантовое число,  $b_N$  и  $b_M$  – безразмерные параметры. Для рассмотренных в работе систем с малым зарядом ядра квантовое число  $\gamma$  близко к 1. При описании поправки Бора–Вайскопфа необходимо учесть распределение ядерной намагниченности, которое зависит от валентной конфигурации нуклонов. Используя атомно-ядерную факторизацию, мы вводим в поправку  $\epsilon$  ядерный множитель  $d_{\text{nuc}}$  для учёта ядерных эффектов. При переходе от одного изотопа к другому множитель  $d_{\text{nuc}}$  может сильно меняться. Равномерному распределению ядерной намагниченности соответствует  $d_{\text{nuc}} = 1$ ;  $d_{\text{nuc}} = 0$  соответствует точечному магнитному диполу в центре ядра. В некоторых более сложных случаях ядерный множитель может быть вычислен в рамках одночастичной ядерной модели. Радиус ядра обычно плавно меняется и лишь на несколько процентов, таким образом, поправка  $\delta$  практически одинакова для всех изотопов выбранного атома.

В отличие от водорода и водородоподобных ионов, где необходимые вычисления могут быть проведены аналитически, описание многоэлектронных систем даже таких, как литий, требует проведения достаточно сложных численных расчётов. Наиболее точные расчёты и анализ экспериментальных данных для констант сверхтонкой структуры атома лития и иона бериллия приведены в работе [4]. Мы используем экспериментальные и теоретические данные, приведённые в этой работе для минимизации количества ссылок.

## II. МЕТОД РАСЧЁТА

Атом лития и ионы его изоэлектронной серии удобны для проверки методов расчёта атомных спектров, поскольку для этих систем доступно большое количество теоретических данных и имеются надёжные экспериментальные значения частот переходов и констант сверхтонкой структуры. Мы рассматриваем эти системы как один валентный электрон над остовом, который содержит 2 остовных электрона. В таких атомных системах возможен достаточно точный учёт остовных, остовно-валентных корреляций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 21-42-04411

В качестве начального приближения для расчёта энергетического спектра и свойств атомных систем использовался метод Хартри–Фока–Дирака. Электронные корреляции учитывались с помощью комбинированных методов расчёта. В рамках этих методов полное многоэлектронное пространство конфигураций разделено на два подпространства: валентное и остовное. Остовные и остовно-валентные корреляции учитывались в рамках лианеризованного метода связанных кластеров.

Электронная волновая функция системы в рамках метода связанных кластеров может быть записана в виде:

$$\Psi = e^T \Psi_0.$$

Кластерный оператор  $T$  представляет собой сумму  $n$ -кратных возбуждений:  $T = T_1 + T_2 + \dots + T_n$ . Оператор  $e^T$  действует на референсную многоэлектронную волновую функцию  $\Psi_0$ , которая может быть записана в виде детерминанта Слейтера для основного состояния системы. Раскладывая оператор  $e^T$  в ряд Тейлора и ограничивая это разложение только первыми слагаемыми:  $T = T_1 + T_2$ , получим выражение для волновой функции  $\Psi$ :

$$\Psi = (1 + T_1 + T_2) \Psi_0.$$

Этот метод известен как лианеризованный метод связанных кластеров или парные уравнения [5]. Вклад трёхкратных возбуждений в данной работе учён частично по теории возмущений.

На первом этапе вычислений были найдены решения лианеризованных уравнений связанных кластеров для остовных и остовно-валентных кластерных амплитуд в приближении одно- и двукратных возбуждений, затем формировались одноэлектронные и двухэлектронные кластерные амплитуды для валентного подпространства, на третьем шаге эти амплитуды используются для формирования эффективного валентного гамильтониана [6]. Затем, использовался метод Хартри–Фока–Дирака. Исползованный метод даёт достаточно точные волновые функции для последующего вычислений атомных свойств, таких как константы сверхтонкой структуры.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для расчёта констант сверхтонкой структуры важно воспроизвести спектр атома или иона достаточно аккуратно. Энергии электронных переходов из основного состояния  $1s^2 2s$  известны экспериментально с высокой точностью. Результаты сравнения энергий электронных переходов в низколежащие уровни Li и  $Be^+$  приведены в табл. I.

Средняя погрешность метода Хартри–Фока–Дирака для представленных энергий переходов атома лития составляет  $200 \text{ см}^{-1}$ . Учёт остовных возбуждений методом лианеризованных связанных кластеров уменьшает эту погрешность до  $5 \text{ см}^{-1}$  в рамках метода LCC SD (здесь учтены одно- и двукратные возбуждения

из остова) и  $1 \text{ см}^{-1}$  в методе LCC SDpT. Для  $Be^+$  средние погрешности к энергиям переходов составляют  $160 \text{ см}^{-1}$  в рамках метода Хартри–Фока–Дирака. Погрешности методов LCC SD и LCC SDpT не превышают  $10 \text{ см}^{-1}$ . Хотя остовы атома лития и иона бериллия состоят из двух электронов, метод LCC SD не является точным для этих систем, потому что разложение кластерного оператора содержит нелинейные слагаемые, которые частично учтены в рамках метода LCC SDpT.

ТАБЛИЦА I. СРАВНЕНИЕ РАССЧИТАННЫХ ЭНЕРГИЙ ПЕРЕХОДОВ ИЗ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ДЛЯ Li И  $Be^+$  С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ [7]. ЭНЕРГИИ ПЕРЕХОДОВ (В  $\text{см}^{-1}$ ) ПОЛУЧЕНЫ МЕТОДОМ ХАРТРИ–ФОКА–ДИРАКА (DHF), ЗАТЕМ УЧЕНО ВЛИЯНИЕ ОСТОВНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В РАМКАХ МЕТОДА ЛИАНЕРИЗОВАННЫХ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ (LCC SD И LCC SDpT). МЕТОД LCC SD УЧИТЫВАЕТ ОДНОКРАТНЫЕ И ДВУКРАТНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ИЗ ОСТОВА, В МЕТОДЕ LCC SDpT ЧАСТИЧНО УЧТЕНЫ ТАКЖЕ НЕЛИНЕЙНЫЕ ЧЛЕНЫ РАЗЛОЖЕНИЯ КЛАСТЕРНОГО ОПЕРАТОРА.

Состояние	Метод			
	DHF	LCC SD	LCC SDpT	эксперимент
Li				
$1s^2 2s$	0	0	0	0
$1s^2 2p_{1/2}$	14854	14908	14906	14904
$1s^2 2p_{3/2}$	14854	14908	14906	14904
$1s^2 3s$	26889	27210	27206	27206
$1s^2 3p_{3/2}$	30627	30930	30927	30925
$1s^2 3p_{1/2}$	30626	30930	30926	30925
$Be^+$				
$1s^2 2s$	0	0	0	0
$1s^2 2p_{1/2}$	32205	31937	31931	31929
$1s^2 2p_{3/2}$	32211	31944	31944	31935
$1s^2 3s$	87711	88239	88235	88232
$1s^2 3p_{1/2}$	96073	96504	96501	96495
$1s^2 3p_{3/2}$	96075	96506	96503	96497

В тоже время даже точности метода LCC SDpT недостаточно для воспроизведения расщепления уровней  $1s^2 3p_{3/2}$  и  $1s^2 3p_{1/2}$  в атоме лития.

В работе достигнута приемлемая точность расчётов энергий переходов, по крайней мере, в рамках методов лианеризованных связанных кластеров. Далее полученные волновые функции были использованы при расчёте констант сверхтонкой структуры.

Стабильный изотоп  ${}^7\text{Li}$  имеет спин ядра  $I = 3/2$ , ядерный  $g$ -фактор  $g = 2.170938(8)$  и радиус ядра  $R = 3.16(5)$  фм (см. ссылки в [4]). Валентная конфигурация нуклонов в  ${}^7\text{Li}$  соответствует протону в состоянии  $p_{3/2}$ , поэтому ядерный множитель  $d_{\text{нук}} = 0.95$  [3] может быть найден в рамках одночастичной ядерной модели. Стабильный изотоп  ${}^9\text{Be}$  имеет спин  $I = 3/2$ , ядерный  $g$ -фактор  $g = -0.784953(3)$ , радиус ядра  $R = 3.25(2)$  фм (см. ссылки в [4]) и ядерный множитель  $d_{\text{нук}} = 1.08$  [3] для валентного нейтрона в состоянии  $p_{3/2}$ .

Константы сверхтонкой структуры  ${}^7\text{Li}$  и  ${}^9\text{Be}^+$  крайне чувствительны к уровню учёта корреляционных эффектов, так константа сверхтонкой структуры в литии

$A(2p_{3/2})$  меняет знак при расчёте методами Хартри–Фока–Дирака и связанными кластерами. Константа  $A(2p_{3/2})$  в ионе бериллия вследствие корреляционных эффектов уменьшается по абсолютной величине в 18 раз. В целом использование методов связанных кластеров позволяет достичь хорошего согласия с экспериментальными данными.

ТАБЛИЦА II. СРАВНЕНИЕ КОНСТАНТ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ В МНЗ ДЛЯ СТАБИЛЬНЫХ ИЗОТОПОВ  ${}^7\text{Li}$  И  ${}^9\text{Be}^+$  ПОЛУЧЕННЫХ В РАМКАХ МЕТОДОВ ХАРТРИ–ФОКА–ДИРАКА (DHF) И ЛИАНЕРИЗОВАННЫХ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ [4]

Состояние	Метод			эксперимент
	DHF	LCC SD	LCC SDpT	
${}^7\text{Li}$				
$1s^2s$	284.35	401.16	401.19	401.752043
$1s^2p_{1/2}$	32.29	45.88	45.87	45.914(25)
$1s^2p_{3/2}$	6.46	-2.99	-2.99	-3.055(14)
${}^9\text{Be}^+$				
$1s^2s$	-497.66	-624.88	-624.94	-625.008837
$1s^2p_{1/2}$	-93.26	-117.82	-117.81	-118.6(36)
$1s^2p_{3/2}$	-18.64	-1.04	-1.04	-1.016(3)*

\* Результат теоретического расчёта из [4].

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследована точность методов Хартри–Фока–Дирака и лианеризованных связанных кластеров для расчёта энергий переходов и констант сверхтонкой структуры. В рамках этих методов атом Li и ион  $\text{Be}^+$  рассматриваются как один электрон над заполненным остовом  $1s^2$ . Использование методов связанных кластеров позволяет воспроизвести исследуемые свойства со спектроскопической точностью.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы выражают признательность Козлову Михаилу Геннадьевичу и Сафроновой Марианне Станиславовне за предоставление программ и оказанную помощь при проведении расчётов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Shabaev V.M. Hyperfine structure of hydrogen-like ions // J. Phys. B, V. 27, P. 5825–5832 (1994).
- [2] Konovalova E.A., Kozlov M.G., Demidov Yu.A., Barzakh A.E. Calculation of thallium hyperfine anomaly // Rad. Applic., V. 2, P. 181–185 (2017).
- [3] Konovalova E.A., Demidov Yu.A., Kozlov M.G., Barzakh A.E. Calculation of francium hyperfine anomaly // Atoms, V.6, P. 39 (2018).
- [4] Yerokhin V.A. Hyperfine structure of Li and  $\text{Be}^+$  // Phys. Rev. A, V. 78, P. 012513 (2008).
- [5] Blundell S.A., Johnson W.R., Liu Z.W., Sapirstein J. Relativistic all-order calculations of energies and matrix elements for Li and  $\text{Be}^+$  // Phys. Rev. A, V. 40, P. 2233 (1989).
- [6] Safronova M.S., Kozlov M.G., Johnson W.R., Jiang D. Development of a configuration-interaction + all-order method for atomic calculations // Phys. Rev. A, V. 80, P. 012516 (2009).
- [7] Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2016, January 31]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2021.