物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

B^{2+}和B^{+}离子的静态偶极极化率和超极化率的理论研究

陈池婷 吴磊 王霞 王婷 刘延君 蒋军 董晨钟

Theoretical study of static dipole polarizabilities and hyperpolarizability of B^{2+} and B^{+} ions

Chen Chi-Ting Wu Lei Wang Xia Wang Ting Liu Yan-Jun Jiang Jun Dong Chen-Zhong

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 72, 143101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221990
在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.72.20221990
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

B^{2+}和 B^{+}离子的静态偶极极化率和超极化率的理论研究*

陈池婷[1)] 吴磊[1)] 王霞[1)] 王婷[1)] 刘延君[2)] 蒋军[1)†] 董晨钟[1)]

1) (西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) (兰州理工大学理学院, 兰州 730050)

(2022 年 10 月 17 日收到; 2023 年 4 月 27 日收到修改稿)

利用相对论组态相互作用模型势方法计算了 B^{2+}和 B^{+}离子的波函数、能级和振子强度, 进一步得到 B^{2+}离子 $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $3s_{1/2}$ 态的电偶极极化率和基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率, 以及 B^{+}离子 $2s^2\ {}^1S_0$ 与 $2s2p\ {}^3P_0$ 态的电偶极极化率. B^{2+}离子 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 的偶极极化率为负值, 基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率的贡献主要来自于与极化率相关的 $\alpha^1\beta_0$ 项. 对于 B^{+}离子, 钟跃迁 $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s^2\ {}^1S_0$ 在室温下的黑体辐射频移是 0.01605 Hz, 该黑体辐射频移比碱土金属原子的钟跃迁黑体辐射频移小 1—2 个数量级.

关键词: 电偶极极化率, 超极化率, B^{2+}离子, B^{+}离子

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap **DOI:** 10.7498/aps.72.20221990

1 引 言

近年来, 随着激光冷却和囚禁技术的快速发展, 光学原子钟的精度和稳定性得到极大的提高[1−7]. 高精度的原子光钟可用于精确测量基本物理常数[8], 测试局部洛伦兹不变性[9,10], 探索精细结构常数 α 随时间的变化[11,12], 探测暗物质和暗能量[13,14], 探测引力波[15] 以及检测超越粒子物理标准模型的新作用力[14,15].

在外电场中, 原子的能级会发生斯塔克 (Stark) 效应, 静态 Stark 效应导致的能级移动可以写为[16]

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha^1 F_Z^2 - \frac{1}{24}\gamma_0 F_Z^4 - \cdots, \qquad (1)$$

其中 α^1 为静态电偶极极化率, F_Z 是静电场沿 Z 轴的分量, γ_0 为静态电偶极超极化率. 电偶极极化率和超极化率都是描述外电场中原子的电子云偏离正常分布程度的物理量. 极化率是电荷分布对外电场的最低阶响应, 极化率在原子钟[8,17] 的研制方面有着十分重要的应用. 例如, 利用原子的极化率可以估算原子钟钟跃迁的黑体辐射 (BBR) 频移, BBR 频移和 Stark 效应是影响原子钟精度的主要来源[1,3,18−20]. 极化率可用来构建超冷原子之间的长程相互作用势[21−23] 等. 原子的超极化率可以评估高阶 Stark 频移, 例如, 超极化率对 Sr 和 Yb 原子钟可以产生 0.1—1.0 mHz 的 Stark 频移[24−26], 对 Al^{+}离子量子逻辑钟的影响可以达到 10^{-19} 量级[1]. 超极化率已经成为影响新一代原子钟精度的重要因素. 然而实验上精确测量原子极化率和超极化率非常困难. 因此需要理论方面提供精确的原子极化率以及超极化率.

B^{2+}离子是三电子体系, 基态为 $1s^22s\ {}^2S_{1/2}$, B^{2+}离子是精密测量物理非常重要的研究体系[27,28]. B^{+}离子的基态为 $2s^2\ {}^1S_0$, 第一激发态 $2s2p\ {}^3P_0$ 是一个长寿命的亚稳态, $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s2p\ {}^3P_0$ 是开发高精

* 国家重点研发计划 (批准号: 2022YFA1602500)、国家自然科学基金 (批准号: 12174316)、西北师范大学青年教师科研能力提升计划 (批准号: NWNU-LKQN2020-10) 和甘肃省创新基础研究群体项目基金 (批准号: 20JR5RA541) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: phyjiang@yeah.net

度光钟的潜在候选体系之一[29]. 因此, 关于 B^{2+}离子和 B^{+}离子的原子结构参数 (例如能级、振子强度、电偶极极化率以及超极化率) 的精确计算对于精密测量物理具有十分重要的意义.

本文采用相对论组态相互作用模型势方法 (记为 RCICP), 计算了 B^{2+}和 B^{+}离子的能级和振子强度, 进一步利用求和规则得到了 B^{2+}离子 $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $3s_{1/2}$ 态的电偶极极化率、基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率, 以及 B^{+}离子 $2s^2\ {}^1S_0$ 和 $2s2p\ {}^3P_0$ 态的电偶极极化率, 得到钟跃迁 $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s^2\ {}^1S_0$ 的黑体辐射频移, 本工作结果与已有的理论结果进行详细的比较.

2 理论方法

RCICP 方法的核心思想是将原子体系简化为原子实部分和价电子部分. 对于 B^{2+}离子, 原子实是 $1s^2$, 价电子是 2s. 对于 B^{+}离子, 价电子是 $2s^2$. 原子实的轨道波函数通过求解 Dirac-Fock 方程获得. 然后, 用半经验极化势方法计算了价电子波函数. 两个价电子的有效哈密顿量可以写成[27]

$$H=\sum_{i=1}^{2}\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+(\beta-1)c^2+V_{\text{core}}(\boldsymbol{r}_i)\right]+\frac{1}{r_{12}}+V_{p2}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2), \tag{2}$$

其中求和部分$\sum_{i=1}^{2}$表示单电子哈密顿量, c 表示光速, $\boldsymbol{p}$ 为动量算符, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是 4×4 的 Dirac 矩阵, $\boldsymbol{r}$ 是价电子的位置矢量. $V_{\text{core}}(\boldsymbol{r})$由下式给出:

$$V_{\text{core}}(\boldsymbol{r})=-\frac{Z}{\boldsymbol{r}}+V_{\text{dir}}(\boldsymbol{r})+V_{\text{exc}}(\boldsymbol{r})+V_{\text{p1}}(\boldsymbol{r}), \tag{3}$$

其中 Z是原子序数. $V_{\text{dir}}(\boldsymbol{r})$和$V_{\text{exc}}(\boldsymbol{r})$分别表示价电子与原子实电子之间的直接相互作用和交换相互作用. 单价电子极化势$V_{\text{p1}}(\boldsymbol{r})$可以写为

$$V_{\text{p1}}(\boldsymbol{r})=-\sum_{k=1}^{2}\frac{\alpha_{\text{core}}^{(k)}}{2r^{2k+2}}\sum_{l,j}g_{\kappa,l,j}^{2}(r)\,|l,j\rangle\langle l,j|, \tag{4}$$

双价电子极化势可以写为

$$V_{\text{p2}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=-\sum_{k=1}^{2}\frac{\alpha_{\text{core}}^{(k)}}{r_1^{2k+2}r_2^{2k+2}}\sum_{l,j}g_{\kappa,l,j}(r_1)\times g_{\kappa,l,j}(r_2)(r_1\cdot r_2), \tag{5}$$

其中l和j分别是轨道角动量量子数和总角动量量子数. $\alpha_{\text{core}}^{(k)}$是原子实的 k 阶静态极化率 (对于 B^{3+}离子 $\alpha_{\text{core}}^{(1)}=0.01953$ a.u., $\alpha_{\text{core}}^{(2)}=0.003404$ a.u.[30]), $g_{\kappa,l,j}^{2}(r)=1-\exp\left[-r^{2(k+2)}/\rho_{l,j}^{2(k+2)}\right]$, $\rho_{l,j}$表示截断参数. 通过调节 $\rho_{l,j}$的值来保证极化势在原点处为有限值, 表 1 列出了 B^{2+}离子的截断参数$\rho_{l,j}$. 价电子轨道的波函数由 S-spinor 基和 L-spinor 基的线性组合表示, L-spinor 基是 Lagrange 型轨道的相对论推广[31,32].

表 1 B^{2+}离子的截断参数$\rho_{l,j}$(单位: a.u.)
Table 1. Cut-off parameters $\rho_{l,j}$ of B^{2+} ions (in a.u.).

State	j	$\rho_{l,j}$
2s	1/2	0.72951
2p	1/2	0.67398
	3/2	0.67164
3d	3/2	0.91441
	5/2	0.91355

3 结果与讨论

3.1 B^{2+}离子

3.1.1 能 级

表 2 列出了利用 RCICP 方法计算的 B^{2+}离子基态和部分低激发态相对于原子实的能级和 NIST 推荐的实验值[33]. 在 RCICP 方法中, 通过调节表 1 中的截断参数$\rho_{l,j}$, 使 2s, $2p_j$ 和 $3d_j$ 能级都非常接近于 NIST 值. 从表 2 也可以看出, $ns(n\geqslant 3)$, $np_j(n\geqslant 3)$, $nd_j(n\geqslant 4)$和$nf_j(n\geqslant 4)$等更高激发态能级值与实验值也都符合得非常好, 仅在小数点后第 5 位有差别. 例如, $4p_{1/2}$和$4p_{3/2}$的结果分别为 –0.2874707 a.u.和–0.2874514 a.u., 这与实验结果 –0.2875098 a.u.和–0.2874920 a.u.符合得很好.

3.1.2 振子强度

从态i到态m电偶极跃迁的吸收振子强度可以表示为[34–37]

$$f_{i\rightarrow m}=\frac{2|\langle n_m l_m j_m\|D\|n_i l_i j_i\rangle|^2\Delta E_{m\rightarrow i}}{3(2j_i+1)}, \tag{6}$$

式中n,l,j分别为主量子数、轨道角动量量子数和总角动量量子数, $\Delta E_{m\rightarrow i}=E_m-E_i$表示跃迁能. D是电偶极跃迁算符, 可以表示为[38–40]

$$D=r-\left[1-\exp\left(-r^6/\rho^6\right)\right]^{1/2}\frac{\alpha_{\text{core}}^{1}r}{r^3}. \tag{7}$$

其中, 截断参数 ρ为 0.77210 a.u., $\rho=\frac{1}{6}(2\rho_{s_{1/2}}+\rho_{p_{1/2}}+\rho_{p_{3/2}}+\rho_{d_{3/2}}+\rho_{d_{5/2}})$.

表 2 B^{2+}离子的基态和部分低激发态相对于原子实的能级, 实验值 (Expt.) [33] 是来自于 NIST 的数据 (单位: a.u.), “Diff.”表示用 RCICP 方法计算的结果与 NIST 结果之差的百分比

Table 2. Energy levels of the ground state and some low-lying states of B^{2+} ions relative to atomic core. Experimental values (Expt.) [33] are from the NIST data (in a.u.). “Diff.” denotes the difference in percentage from calculated by RCICP method and NIST results.

State	j	RCICP	Expt.[33]	Diff./%
2s	1/2	–1.3939235	–1.3939235	0
2p	1/2	–1.1735867	–1.1735867	0
	3/2	–1.1734313	–1.1734313	0
3s	1/2	–0.5728008	–0.5728632	0.01
3p	1/2	–0.5146980	–0.5147730	0.01
	3/2	–0.5146520	–0.5147274	0.01
3d	3/2	–0.5005686	–0.5005686	0
	5/2	–0.5005553	–0.5005553	0
4s	1/2	–0.3108609	–0.3108905	0.01
4p	1/2	–0.2874707	–0.2875098	0.01
	3/2	–0.2874514	–0.2874920	0.01
4d	3/2	–0.2815308	–0.2815324	0
	5/2	–0.2815252	–0.2815268	0
4f	5/2	–0.2812848	–0.2812705	0.01
	7/2	–0.2812820	–0.2812676	0.01
5s	1/2	–0.1948639	–0.1948793	0.01
5p	1/2	–0.1831864	–0.1832067	0.01
	3/2	–0.1831765	–0.1831970	0.01
5d	3/2	–0.1801535	–0.1801552	0
	5/2	–0.1801507	–0.1801523	0
5f	5/2	–0.1800204	–0.1800138	0
	7/2	–0.1800190	–0.1800124	0

表 3 列出了利用 RCICP 方法计算的 B^{2+}离子基态和部分激发态之间的振子强度并与相应 NIST 的值[41]、相对论多体微扰 (RMBPT) 方法[42] 以及 Hylleraas 方法 (HR)[43] 的计算结果进行了比较. 从表 3 可以看出, 对于 $2s_{1/2}\rightarrow 3p_{1/2}$, $2p_{1/2}\rightarrow 3d_{3/2}$, $2p_{3/2}\rightarrow 3s_{1/2}$, $2p_{3/2}\rightarrow 3d_{3/2,\,5/2}$, $3s_{1/2}\rightarrow 3p_{1/2,\,3/2}$ 的跃迁, RCICP 计算的结果与 NIST 值[41] 以及 RMBPT 方法[42] 的结果符合得非常好, 差别小于 0.1%. 对于 $2s_{1/2}\rightarrow 2p_{1/2,\,3/2}$, $2s_{1/2}\rightarrow 3p_{3/2}$, $2p_{1/2}\rightarrow 3s_{1/2}$, $2p_{1/2}\rightarrow 4s_{1/2}$, $2p_{1/2}\rightarrow 4d_{3/2}$, $2p_{3/2}\rightarrow 4s_{1/2}$, $2p_{3/2}\rightarrow 4d_{3/2,\,5/2}$, $3s_{1/2}\rightarrow 4p_{1/2,\,3/2}$ 的跃迁, 本工作计算的振子强度与 NIST 值[41]、RMBPT 方法[42] 以及 HR 方法[43] 的计算结果差别在 0.6% 以内.

表 3 B^{2+}离子基态和部分低激发态之间跃迁的振子强度, “Diff.”表示用 RCICP 方法计算的结果与 NIST 结果[41] 之差的百分比

Table 3. Oscillator strengths of transitions between the ground state and some low-lying states of B^{2+} ions. “Diff.” represents the difference in percentage form calculated by RCICP method and NIST results.

Transitions	RCICP	RMBPT[42]	HR[43]	NIST[41]	Diff./%
$2s_{1/2}\rightarrow 2p_{1/2}$	0.121251	0.121101	0.121076	0.12099	0.22
$2s_{1/2}\rightarrow 2p_{3/2}$	0.242723	0.242501	0.242399	0.24215	0.24
$2s_{1/2}\rightarrow 3p_{1/2}$	0.051084			0.05108	0.01
$2s_{1/2}\rightarrow 3p_{3/2}$	0.102061			0.10240	0.33
$2p_{1/2}\rightarrow 3s_{1/2}$	0.046308	0.046288		0.04636	0.11
$2p_{1/2}\rightarrow 3d_{3/2}$	0.637937			0.63800	0.01
$2p_{1/2}\rightarrow 4s_{1/2}$	0.008193			0.008233	0.49
$2p_{1/2}\rightarrow 4d_{3/2}$	0.122573			0.12280	0.19
$2p_{3/2}\rightarrow 3s_{1/2}$	0.046346	0.046338		0.04636	0.03
$2p_{3/2}\rightarrow 3d_{3/2}$	0.063806			0.06381	0.01
$2p_{3/2}\rightarrow 3d_{5/2}$	0.574284			0.57430	0
$2p_{3/2}\rightarrow 4s_{1/2}$	0.008198			0.008236	0.46
$2p_{3/2}\rightarrow 4d_{3/2}$	0.012256			0.01228	0.20
$2p_{3/2}\rightarrow 4d_{5/2}$	0.110323			0.11050	0.16
$3s_{1/2}\rightarrow 3p_{1/2}$	0.203293			0.20310	0.10
$3s_{1/2}\rightarrow 3p_{3/2}$	0.406942			0.4068	0.04
$3s_{1/2}\rightarrow 4p_{1/2}$	0.048745			0.04850	0.51
$3s_{1/2}\rightarrow 4p_{3/2}$	0.097357			0.09700	0.37

3.1.3 极化率

原子态 i 的静态电偶极极化率可以表示为

$$\alpha^1=\alpha^{\rm S}+\frac{3M_i^2-j_i\,(j_i+1)}{j_i\,(2j_i-1)}\alpha^{\rm T}, \tag{8}$$

其中角动量 $j_i=1/2$ 的原子态的电偶极极化率与磁投影 M_i 无关, 而对于 $j_i>1/2$ 的原子态, 它取决于 M_i, 即有标量极化率 ($\alpha^{\rm S}$) 和张量极化率 ($\alpha^{\rm T}$). 标量极化率和张量极化率通常定义为所有可能中间态的总和, 而且包括连续态, 如下式所示:

$$\alpha^{\rm S}=\sum_{m\neq i}\frac{f_{i\rightarrow m}}{\Delta E_{m\rightarrow i}^2}, \tag{9}$$

$$\alpha^{\rm T}=6\sqrt{\frac{5j_i\,(2j_i-1)\,(2j_i+1)}{6\,(j_i+1)\,(2j_i+3)}}\times\sum_m(-1)^{j_m+j_i}\left\{\begin{array}{ccc}1&1&2\\ j_i&j_i&j_m\end{array}\right\}\frac{f_{i\rightarrow m}}{\Delta E_{m\rightarrow i}^2}. \tag{10}$$

表 4 B^{2+}离子基态与部分低激发态的静态电偶极标量极化率与张量极化率以及主要跃迁的贡献 (单位: a.u.)

Table 4. Static electric-dipole scalar and tensor polarizability of the ground state and some low-lying state of B^{2+} ions and breakdowns of the contributions of individual transitions (in a.u.).

$2s_{1/2}$			$2p_{1/2}$		$2p_{3/2}$			$3s_{1/2}$	
Contr.	α^S	FCPC [44]	Contr.	α^S	Contr.	α^S	α^T	Contr.	α^S
$2p_{1/2}$	2.4975	2.4953[44]	$2s_{1/2}$	–2.4975	$2s_{1/2}$	–2.4963	2.4963	$3p_{1/2}$	60.218
$2p_{3/2}$	4.9926	4.9872[44]	$3d_{3/2}$	1.4084	$3d_{5/2}$	1.2684	–0.2537	$3p_{3/2}$	120.35
Remains	0.3433	0.3453[44]	Remains	0.4959	Remains	0.6371	–0.0743	Remains	2.3125
Core[30]	0.0195	0.0195[44]	Core	0.0195	Core	0.0195		Core	0.0195
Total	7.8529	7.8473[44]	Total	–0.5737	Total	–0.5713	2.1683	Total	182.90
CICP[45]	7.8460			–0.56938					182.94
SCC[46]	7.85								
FCG[47]	7.8591								

表 4 列出了采用 RCICP 方法计算的 B^{2+}离子基态 $2s_{1/2}$, 以及部分低激发态 $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ 和 $3s_{1/2}$ 的静态电偶极极化率和占主导跃迁的贡献, 并与其他理论方法计算结果进行比较. 表中的 "Remains" 表示高激发态以及连续态的贡献, "Core" 表示原子实 ($1s^2$) 电子的贡献, "Total" 表示总的极化率. 对于基态 $2s_{1/2}$ 的静态电偶极极化率, $2s_{1/2}\rightarrow 2p_{1/2,\,3/2}$ 跃迁占主导, RCICP 计算的结果与 full-core plus correlation (FCPC)[44], 非相对论组态相互作用加核势 (CICP)[45], 关联组态 (SCC)[46] 以及完全关联高斯 (FCG)[47] 方法计算的结果符合得非常好, 差别在 0.1% 以内. 对于 $2p_{1/2}$ 态, 贡献主要来自于 $2p_{1/2}\rightarrow 2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}\rightarrow 3d_{3/2}$ 的跃迁, 但是由于 $2p_{1/2}\rightarrow 2s_{1/2}$ 吸收能为负值, 这一项对 $2p_{1/2}$ 的贡献为负, 因此 $2p_{1/2}$ 的电偶极极化率为负值, RCICP 计算的结果为–0.5737 a.u. 对于 $2p_{3/2}$ 态的标量极化率, 主要贡献来自于 $2p_{3/2}\rightarrow 2s_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}\rightarrow 3d_{5/2}$ 的跃迁, RCICP 计算的结果为 –0.5713 a.u., 和 $2p_{1/2}$ 态类似, 由于 $2p_{3/2}\rightarrow 2s_{1/2}$ 跃迁对 $2p_{3/2}$ 态极化率的贡献为负, 所以 $2p_{3/2}$ 态极化率小于零. RCICP 计算的结果与 CICP 方法[45] 计算的结果符合得非常好, 其差别在 0.8% 以内, 这里需要指出的是 CICP[45] 是非相对论结果, 其值仅仅是 2p 态的, 并不是精细能级的极化率. 对于 $2p_{3/2}$ 态的张量极化率, 其主要贡献来自于 $2p_{3/2}\rightarrow 2s_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}\rightarrow 3d_{5/2}$ 的跃迁, 分别为 2.4963 a.u.与 –0.2537 a.u., RCICP 计算的结果为 2.1683 a.u., 目前还没有可比较的相关数据. 对于 $3s_{1/2}$ 态, 主要贡献来自于 $3s_{1/2}\rightarrow 3p_{1/2,\,3/2}$ 的跃迁, 本文计算结果为 182.90 a.u., 与 CICP[45] 方法计算的结果 182.94 a.u. 符合得非常好, 差别在 0.02% 以内.

3.1.4 超极化率

根据四阶微扰理论, 对于 B^{2+}离子基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率可以简化为[48]

$$\gamma_0\left(2s_{1/2}\right)=12\left[T\left(s_{1/2},p_{j'},s_{1/2},p_{j''}\right)+T\left(s_{1/2},p_{j'},d_j,p_{j''}\right)-\alpha^1\beta_0\right], \quad (11)$$

其中 α^1 是基态的静态电偶极极化率, β_0 是电偶极极化率的一阶非绝热修正[35]. $T(s_{1/2},p_{j'},s_{1/2},p_{j''})$ 和 $T(s_{1/2},p_{j'},d_j,p_{j''})$ 可以表示为

$$T\left(s_{1/2},p_{j'},s_{1/2},p_{j''}\right)=\sum_{n_1n_2n_3}\frac{\left\langle 2s_{1/2}\left\|D\right\|n_1p_{j'}\right\rangle\left\langle n_1p_{j'}\left\|D\right\|n_2s_{1/2}\right\rangle\left\langle n_2s_{1/2}\left\|D\right\|n_3p_{j''}\right\rangle\left\langle n_3p_{j''}\left\|D\right\|2s_{1/2}\right\rangle}{\left(E_1-E_{2s_{1/2}}\right)\left(E_2-E_{2s_{1/2}}\right)\left(E_3-E_{2s_{1/2}}\right)}, \quad (12)$$

$$T\left(s_{1/2},p_{j'},d_j,p_{j''}\right)=\sum_{n_1n_2n_3}\frac{\left\langle 2s_{1/2}\left\|\boldsymbol{D}\right\|n_1p_{j'}\right\rangle\left\langle n_1p_{j'}\left\|\boldsymbol{D}\right\|n_2d_j\right\rangle\left\langle n_2d_j\left\|\boldsymbol{D}\right\|n_3p_{j''}\right\rangle\left\langle n_3p_{j''}\left\|\boldsymbol{D}\right\|2s_{1/2}\right\rangle}{\left(E_1-E_{2s_{1/2}}\right)\left(E_2-E_{2s_{1/2}}\right)\left(E_3-E_{2s_{1/2}}\right)}. \quad (13)$$

表 5 列出了 B^{2+}的基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率和中间态的贡献, 并与 Roy 和 Bhattacharya[49] 使用耦合 Hatree-Fock (CHF) 及 Drake 和 Cohen[50] 使用未耦合 Hatree-Fock (UCHF) 近似方法得到的经

验公式计算的结果进行了比较. 根据 (11) 式, B^{2+} 离子基态超极化率的计算由 3 部分组成, 分别为 $T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s},\mathrm{p}_{j''})$, $T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_{j},\mathrm{p}_{j''})$ 和 $\alpha^1\beta_0$. 为了评估该计算结果的误差, 将对超极化率有重要贡献的 $2\mathrm{s}\rightarrow2\mathrm{p}_j$, $2\mathrm{p}_j\rightarrow3\mathrm{d}_j$ 跃迁矩阵元替换为 NIST 推荐的跃迁矩阵元, 将 3s, $3\mathrm{p}_j$, 4s, $4\mathrm{p}_j$, $4\mathrm{d}_j$, 5s, $5\mathrm{p}_j$ 和 $5\mathrm{d}_j$ 的能级值也替换成 NIST 推荐值, 并重新计算了超极化率 (标记为 $\gamma_0^C(2\mathrm{s})$), 研究发现 $\gamma_0(2\mathrm{s})$ 与 $\gamma_0^{\mathrm{C}}(2\mathrm{s})$ 的结果仅仅相差 6.645 a.u., 这个差别仅占目前计算的超极化率的 0.6%. 因此, 采用 RCICP 计算的超极化率的精度在 1% 以内. 在所有贡献中, 与极化率相关的 $\alpha^1\beta_0$ 项贡献最大, 结果为 134.364(586) a.u.. RCICP 方法计算的 B^{2+} 基态的超极化率结果为–1063.346(6.645) a.u., 与 CHF[49] 以及 UCHF[50] 近似方法计算的结果符合得比较好.

表 5 B^{2+} 离子基态的超极化率及其中间态对超极化率的贡献 (单位: a.u.)

Table 5. Hyperpolarizability of the ground state of B^{2+} ion and the contributions to the hyperpolarizability (in a.u.).

Contributions	γ_0 (2s)	γ_0^{C} (2s)
$\frac{1}{18}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2},\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2})$	1.251(1)	1.250
$-\frac{1}{18}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2},\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2})$	2.501(1)	2.500
$-\frac{1}{18}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2},\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2})$	2.501(1)	2.500
$\frac{1}{18}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2},\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2})$	5.001(1)	5.000
$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s},\mathrm{p}_{j''})$	11.255(5)	11.250
$\frac{1}{18}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2},\mathrm{d}_{3/2},\mathrm{p}_{1/2})$	9.588(8)	9.580
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{1/2},\mathrm{d}_{3/2},\mathrm{p}_{3/2})$	1.917(2)	1.915
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2},\mathrm{d}_{3/2},\mathrm{p}_{1/2})$	1.917(2)	1.915
$\frac{1}{180}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2},\mathrm{d}_{3/2},\mathrm{p}_{3/2})$	0.383(1)	0.382
$\frac{1}{30}T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{3/2},\mathrm{d}_{5/2},\mathrm{p}_{3/2})$	20.692(16)	20.676
$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_{j},\mathrm{p}_{j''})$	34.497(28)	34.469
$\alpha^1\beta_0$	134.364(586)	133.778
RCICP	–1063.346(6.645)	–1056.701
UCHF[50]	–1160	
CHF[49]	–1120	

3.2 B^+离子

3.2.1 能 级

利用计算得到的 B^{2+} 的单电子轨道, 耦合得到 B^+ 的组态波函数, 进一步全对角化了 B^+ 离子两电子组态空间的哈密顿矩阵, 得到了 B^+ 离子原子态的波函数. 表 6 列出了基态以及部分低激发态相对于原子实 $1\mathrm{s}^2\,{}^1\mathrm{S}_0$ 的能级, 并与 NIST 推荐的实验值[51] 进行比较. 从表 6 可以发现, RCICP 方法计算的结果与 NIST 推荐的实验值符合得非常好, 差异不超过 0.05%.

表 6 B^+ 基态和部分低激发态相对于原子实的能级值, 实验值 (Expt.)[51] 是来自于 NIST 的数据 (单位: a.u.), "Diff."表示用 RCICP 方法计算的结果与 NIST 结果之差的百分比

Table 6. Energy levels of the ground state and some low-lying states of B^+ ions relative to atomic core. Experimental values (Expt.) are from the NIST data (in a.u.). "Diff." denotes the difference in percentage from calculated by RCICP method and NIST results.

State	RCICP	Expt.[51]	Diff./%
$2\mathrm{s}^2\,{}^1\mathrm{S}_0$	–2.318347	–2.318347	0
$2\mathrm{s}2\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_0$	–2.148235	–2.148233	0
$2\mathrm{s}2\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_1$	–2.148205	–2.148205	0
$2\mathrm{s}2\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_2$	–2.148178	–2.148132	0
$2\mathrm{s}2\mathrm{p}\ {}^1\mathrm{P}_1$	–1.9832	–1.983927	0.03
$2\mathrm{p}^2\,{}^3\mathrm{P}_0$	–1.867621	–1.867673	0
$2\mathrm{p}^2\,{}^3\mathrm{P}_1$	–1.867634	–1.867634	0
$2\mathrm{p}^2\,{}^3\mathrm{P}_2$	–1.867565	–1.867573	0
$2\mathrm{p}^2\,{}^1\mathrm{D}_2$	–1.852917	–1.851947	0.05
$2\mathrm{p}^2\,{}^1\mathrm{S}_0$	–1.736452	–1.736679	0.01
$2\mathrm{s}3\mathrm{s}\ {}^3\mathrm{S}_1$	–1.727042	–1.727053	0
$2\mathrm{s}3\mathrm{s}\ {}^1\mathrm{S}_0$	–1.690800	–1.691293	0.03
$2\mathrm{s}3\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_0$	–1.662206	–1.662280	0
$2\mathrm{s}3\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_1$	–1.662167	–1.662277	0.01
$2\mathrm{s}3\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_2$	–1.662006	–1.662261	0.02
$2\mathrm{s}3\mathrm{p}\ {}^1\mathrm{P}_1$	–1.661601	–1.661765	0.01
$2\mathrm{s}3\mathrm{d}\ {}^3\mathrm{D}_1$	–1.631934	–1.631936	0
$2\mathrm{s}3\mathrm{d}\ {}^3\mathrm{D}_2$	–1.631720	–1.631936	0.01
$2\mathrm{s}3\mathrm{d}\ {}^1\mathrm{D}_2$	–1.613116	–1.613545	0.03
$2\mathrm{s}4\mathrm{s}\ {}^3\mathrm{S}_1$	–1.560411	–1.560423	0
$2\mathrm{s}4\mathrm{s}\ {}^1\mathrm{S}_0$	–1.552914	–1.553177	0.02
$2\mathrm{s}4\mathrm{p}\ {}^1\mathrm{P}_1$	–1.540973	–1.541075	0.01
$2\mathrm{s}4\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_1$	–1.5366	–1.5367	0.01
$2\mathrm{s}4\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_2$	–1.536439	–1.536726	0.02
$2\mathrm{s}4\mathrm{p}\ {}^3\mathrm{P}_0$	–1.536693	–1.536726	0
$2\mathrm{s}4\mathrm{d}\ {}^3\mathrm{D}_2$	–1.524938	–1.525210	0.02
$2\mathrm{s}4\mathrm{d}\ {}^3\mathrm{D}_1$	–1.525198	–1.525210	0

3.2.2 振子强度

基于以上的能级和波函数, 利用 (6) 式, 得到了 B^+离子基态和部分低激发态之间的电偶极跃迁振子强度, 表 7 列出了本文计算结果, 并与相应的 NIST[41] 推荐值、CICP [45] 方法、B-样条基组态相互作用加核势 (BCICP) 方法[52]、多组态 Hartree-Fock 与 Breit-Pauli (MCHF-BP) 方法[53]、多组态 Hartree-Fock (MCHF) 方法[54] 计算的结果进行比较. 对于 $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s2p\ {}^1P_1$ 共振跃迁, RCICP 的结果与 NIST 推荐值[41] 和其他理论结果[45,52–54] 符合得非常好, 差别在 0.4% 以内. 从表 7 还可以看出, 除 $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s4p\ {}^1P_1$ 和 $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s5p\ {}^1P_1$ 跃迁外, RCICP 方法计算的其余跃迁的振子强度与 NIST 推荐值[41] 之间的差别在 2% 以内, $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s4p\ {}^1P_1$ 和 $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s5p\ {}^1P_1$ 跃迁的振子强度与 NIST 推荐值[41] 的差别分别约为 4% 和 7%. 造成这种差异的原因可能有 3 个, 其中一个是, 单电子轨道是利用有限个基矢的线性组合得到的, 基态的收敛性非常好, 单电子高激发态的收敛性要比基态差. 另外一个原因是, 在本文方法中根据原子态的对称性 (宇称和总角动量 J) 将计算分为不同的组, 计算 2s2p, 2s3p, 2s4p, 2s5p 态所使用的组态空间相同, $2s4p\ {}^1P_1$ 和 $2s5p\ {}^1P_1$ 的能级相对于 $2s2p\ {}^1P_1$ 态收敛性变差, 相应的 $2s4p\ {}^1P_1$ 和 $2s5p\ {}^1P_1$ 态到基态的跃迁振子强度与 NIST 推荐值之间的相对差异变大. 最后一个原因是, $2s4p\ {}^1P_1$和 $2s5p\ {}^1P_1$ 态到基态的跃迁振子强度的值非常小. 例如, 对于 $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s5p\ {}^1P_1$ 跃迁的振子强度, 本文计算的结果是 0.0224, 而 NIST 推荐值为 0.0241. RCICP 的结果与其他理论方法[45,52–54] 计算的结果也符合得比较好, 除 $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2p^2\ {}^3P_1$的跃迁外, 其余跃迁振子强度的差别在 2% 以内, $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2p^2\ {}^3P_1$ 跃迁的振子强度与 BCICP 结果[52] 的差别小于 7%.

3.2.3 极化率

表 8 所示为 B^+离子与钟跃迁相关的 $2s^2\ {}^1S_0$ 和 $2s2p\ {}^3P_0$ 态的静态电偶极极化率, 并与组态相互作用 (CI) 方法[55]、组态相互作用和多体微扰理论 (CI+MBPT) 方法[55]、组态相互作用加全阶 (CI+all-orders) 方法[55]、有限场耦合簇 (CCD+ST) 方法[56]、CICP 方法[45]、微扰相对论耦合簇 (PRCC) 方法[29]、三重激发微扰的耦合簇 ($CCSD_pT$) 方法[57] 以及瑞利-里兹变分 (RRV) 方法[58] 计算的结果进行比较. 从表 8 可以看出, 对于 $2s^2\ {}^1S_0$ 态的极化率, $2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s2p\ {}^1P_1$ 的跃迁占主导, 贡献约为 93%, RCICP 的结果与 CI+all-orders 方法[55]、CI[55]、CI+MBPT[55]、CCD+ST[56]、RRV[58] 以及 CICP[45] 方法的结果差别不超过 0.6%, 与 PRCC[29] 结果差异在 2% 左右, 与 $CCSD_pT$[57] 结果的差异在 7% 之间. 对于 $2s2p\ {}^3P_0$ 态的极化率, $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2p^2\ {}^3P_1$ 的跃迁和 $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_1$ 的跃迁占主导, 贡献分别约为 56% 和 24%. 目前 RCICP 结果与 CI[55], CI+MBPT[55], CI+all-order[55] 以及 CICP 方法[45] 计算的结果差异不超过 0.3%.

与温度 T 有关的 BBR 频移可以写为

$$\Delta\nu = -\frac{1}{2}(831.9\ \mathrm{V/m})^2\left(\frac{T(\mathrm{K})}{300}\right)^4 \Delta\alpha^1(1+\eta), \quad (14)$$

式中, $\Delta\alpha^1$是跃迁初末态的静态电偶极极化率之差, 系数η是一个可以忽略的微小的动态修正[20]. T 是环境温度 (K), 当 T 为室温 300 K 时, 钟跃迁 $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s^2\ {}^1S_0$ 的 BBR 频移为 0.01605 Hz, 与 CI+MBPT[55] 方法计算的结果 0.0159(16) Hz 符

表 7 B^+离子基态和部分低激发态之间电偶极跃迁的振子强度 (单位: a.u.)

Table 7. Oscillator strengths of electric-dipole transitions between the ground state and some low-lying states of B^+ ions (in a.u.).

Transition	RCICP	CICP[45]	BCICP[52]	MCHF-BP[53]	MCHF[54]	NIST.[41]
$2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s2p\ {}^1P_1$	1.00092	0.99907	1.002	1.001	0.9976(22)	0.9990
$2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s3p\ {}^1P_1$	0.10829	0.10959	0.108	0.1087	0.1093(3)	0.1090
$2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s4p\ {}^1P_1$	0.05331		0.0530			0.0514
$2s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 2s5p\ {}^1P_1$	0.02244		0.0230			0.0241
$2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2p^2\ {}^3P_1$	0.34113	0.34298	0.365	0.3430	0.3427(2)	0.3400
$2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s3s\ {}^3S_1$	0.06437	0.06377		0.06397		0.0640
$2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_1$	0.47657	0.47627	0.473	0.4759		0.4750
$2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s4s\ {}^3S_1$	0.01170					0.0115
$2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s4d\ {}^3D_1$	0.12480		0.125			0.1260

表 8 B^+离子 $2s^2\ ^1S_0$ 和 $2s2p\ ^3P_0$ 的电偶极极化率

Table 8. Electric-dipole polarizability of $2s^2\ ^1S_0$ and $2s2p\ ^3P_0$ states of B^+ ions.

$2s^2\ ^1S_0$		$2s2p\ ^3P_0$	
Contributions polarizability/a.u.		Contributions polarizability/a.u.	
$2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^1P_1$	8.9149	$2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2p2p\ ^3P_1$	4.3326
$2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s3p\ ^1P_1$	0.2511	$2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s3d\ ^3D_1$	1.7878
Remains	0.4365	Remains	1.6195
Core	0.0195	Core	0.0195
RCICP	9.6220	RCICP	7.7594
CI[55]	9.5750	CI[55]	7.7790
CI+MBPT[55]	9.6130	CI+MBPT[55]	7.7690
CI+all-orders[55]	9.6240	CI+all-order[55]	7.7720
CCD+ST [56]	9.5660		
CICP[45]	9.6441	CICP[45]	7.7798
PRCC[29]	9.4130		
$CCSD_pT$[57]	10.395(22)		
RRV[58]	9.6210		

合得非常好, 该 BBR 值比 Ca^+, Sr^+离子钟跃迁 $^2D_{5/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$ 的 BBR 频移 (Ca^+: 0.38(1) Hz[59], Sr^+: 0.250(9) Hz[60]) 小 1 个数量级, 比 Ca, Sr, Yb 原子钟的跃迁 $^3P_0 \rightarrow {}^1S_0$ 的 BBR 频移 (Ca: 1.171 Hz, Sr: 2.354 Hz, Yb: 1.25 Hz) 小 2 个数量级[20]. 这一特性对 B^+离子钟的研究具有重要意义.

4 结 论

利用相对论组态相互作用模型势方法计算了 B^{2+} 和 B^+离子的波函数、能级和振子强度, 进一步得到了 B^{2+}离子 $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $3s_{1/2}$ 态的电偶极极化率和基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率, 以及 B^+离子 $2s^2\ ^1S_0$ 和 $2s2p\ ^3P_0$ 态的电偶极极化率, 并与其他理论结果进行比较, 本文结果与已有结果符合得非常好. 对于 B^{2+}离子 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 态的极化率为负值, 是因为 $2p_{1/2,\ 3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ 跃迁的吸收能为负值, 这项对 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 态的极化率的贡献都为负. 对于 $2p_{3/2}$ 态的张量极化率, 其主要贡献来自于 $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ 的跃迁, 分别为 2.4963 a.u. 和–0.2537 a.u., RCICP 计算的结果为 2.1683 a.u.. 基态 $2s_{1/2}$ 的超极化率的贡献主要来自于与极化率相关的 $\alpha^1\beta_0$ 项. 对于 B^+离子基态 $2s^2\ ^1S_0$ 的偶极极化率是 9.6220 a.u., $2s2p\ ^3P_0$ 态的偶极极化率是 7.7594 a.u., 计算的钟跃迁 $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ 的黑体辐射频移是 0.01605 Hz, 这个黑体辐射频移比碱土金属原子的钟跃迁黑体辐射频移小 1—2 个数量级.

参考文献

[1] Brewer S M, Chen J S, Hankin A M, Clements E R, Chou C W, Wineland D J, Hume D B, Leibrandt D R 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 033201

[2] Yamanaka K, Ohmae N, Ushijima I, Takamoto M, Katori H 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 230801

[3] Chou C W, Hume D B, Koelemeij J C J, Wineland D J, Rosenband T 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 070802

[4] Dubé P, Madej A A, Zhou Z, Bernard J E 2013 *Phys. Rev. A* **87** 023806

[5] Hinkley N, Sherman J A, Phillips N B, Schioppo M, Lemke N D, Beloy K, Pizzocaro M, Oates C W, Ludlow A D 2013 *Science* **341** 6151

[6] Bothwell T, Kennedy C J, Aeppli A, Kedar D, Robinson J M, Oelker E, Staron A, Ye J 2022 *Nature* **602** 7897

[7] McGrew W F, Zhang X, Fasano R J, Schäffer S A, Beloy K, Nicolodi D, Brown R C, Hinkley N, Milani G, Schioppo M, Yoon T H, Ludlow A D 2018 *Nature* **564** 7734

[8] Bregolin F, Milani G, Pizzocaro M, Rauf B, Thoumany P, Levi F, Calonico D 2017 *J. Phys. Conf. Ser.* **841** 012015

[9] Pihan-Le Bars H, Guerlin C, Lasseri R D, Ebran J P, Bailey Q G, Bize S, Khan E, Wolf P 2017 *Phys. Rev. D* **95** 075026

[10] Shaniv R, Ozeri R, Safronova M S, Porsev S G, Dzuba V A, Flambaum V V, Häffner H 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 103202

[11] Godun R M, Nisbet-Jones P B R, Jones J M, King S A, Johnson L A M, Margolis H S, Szymaniec K, Lea S N, Bongs K, Gill P 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 210801

[12] Safronova M S, Porsev S G, Sanner C, Ye J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 173001

[13] Arvanitaki A, Huang J, Tilburg K V 2015 *Phys. Rev. D* **91** 015015

[14] Roberts B M, Blewitt G, Dailey C, Murphy M, Pospelov M, Rollings A, Sherman J, Williams W, Derevianko A 2017 *Nat. Commun.* **8** 1195

[15] Kolkowitz S, Pikovski I, Langellier N, Lukin M D, Walsworth R L, Ye J 2016 *Phys. Rev. D* **94** 124043

[16] Kassimi N E, Thakkar A J 1994 *Phys. Rev. A* **50** 2948

[17] Flury J 2016 *J. Phys. Conf. Ser.* **723** 012051

[18] Rosenband T, Hume D B, Schmidt P O, Chou C W, Brusch A, Lorini L, Oskay W H, Drullinger R E, Fortier T M, Stalnaker J E, Diddams S A, Swann W C, Newbury N R,

Itano W M, Wineland D J, Bergquist J C 2008 *Science* **319** 5871
[19] Huntemann N, Sanner C, Lipphardt B, Tamm C, Peik E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 063001
[20] Porsev S G, Derevianko A 2006 *Phys. Rev. A* **74** 020502
[21] Leggett A J 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 307
[22] Derevianko A, Porsev S G, Kotochigova S, Tiesinga E, Julienne P S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 063002
[23] Jones K M, Tiesinga E, Lett P D, Julienne P S 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 483
[24] Westergaard P G, Lodewyck J, Lorini L, Lecallier A, Burt E A, Zawada M, Millo J, Lemonde P 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 210801
[25] Barber Z W, Stalnaker J E, Lemke N D, Poli N, Oates C W, Fortier T M, Diddams S A, Hollberg L, Hoyt C W, Taichenachev A V, Yudin V I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 103002
[26] Brusch A, Le Targat R, Baillard X, Fouché M, Lemonde P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 103003
[27] Mitroy J, Safronova M S, Clark C W 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 202001
[28] Safronova M S, Safronova U I, Clark C W 2012 *Phys. Rev. A* **86** 042505
[29] Kumar R, Chattopadhyay S, Mani B K, Angom D 2020 *Phys. Rev. A* **101** 012503
[30] Johnson W R, Kolb D, Huang K-N 1983 *At. Data Nucl. Data Tables* **28** 2
[31] Grant I P, Quiney H M 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022508
[32] Bromley M W J, Mitroy J 2001 *Phys. Rev. A* **65** 012505
[33] Kramida A E, Ryabtsev A N, Ekberg J O, Kink I, Mannervik S, Martinson I 2008 *Phys. Scr.* **78** 025301
[34] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F 2009 *Phys. Rev. A* **79** 062712
[35] Tang L Y, Zhang J Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F, Mitroy J 2009 *Phys. Rev. A* **80** 042511
[36] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, Mitroy J 2010 *Phys. Rev. A* **81** 042521
[37] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F 2014 *Phys. Rev. A* **90** 012524
[38] Hameed S, Herzenberg A, James M G 1968 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **1** 822
[39] Hafner P, Schwarz W H E 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **11** 2975
[40] Mitroy J, Griffin D C, Norcross D W, Pindzola M S 1988 *Phys. Rev. A* **38** 3339
[41] Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J NIST ASD Team. https://physics.nist.gov/asd [2019-9-10]
[42] Johnson W R, Liu Z W, Sapirstein J 1996 *At. Data Nucl. Data Tables* **64** 279
[43] Yan Z C, Tambasco M, Drake G W F 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1652
[44] Wang Z W, Chung K T 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 855
[45] Cheng Y, Mitroy J 2012 *Phys. Rev. A* **86** 052505
[46] Pipin J, Woźnicki W 1983 *Chem. Phys. Lett.* **95** 392
[47] Earwood W P, Davis S R 2022 *At. Data Nucl. Data Tables* **144** 101490
[48] Safronova U I, Safronova M S 2013 *Phys. Rev. A* **87** 032502
[49] Roy H P, Bhattacharya A K 1976 *Mol. Phys.* **31** 649
[50] Drake G W F, Cohen M 1968 *J. Chem. Phys.* **48** 1168
[51] Ryabtsev A N, Kink I, Awaya Y, Ekberg J O, Mannervik S, Ölme A, Martinson I 2005 *Phys. Scr.* **71** 489
[52] Chen M K 1999 *Phys. Scr.* **T80** 485
[53] Fischer C F, Tachiev G 2004 *At. Data Nucl. Data Tables* **87** 1
[54] Jönsson P, Fischer C F, Godefroid M R 1999 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** 1233
[55] Safronova M S, Kozlov M G, Clark C W 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 143006
[56] Archibong E F, Thakkar A J 1990 *Chem. Phys. Lett.* **173** 579
[57] Singh Y, Sahoo B K 2014 *Phys. Rev. A* **90** 022511
[58] Chen C, Gou B C 2018 *Commun. Theor. Phys.* **70** 765
[59] Arora B, Safronova M S, Clark C W 2007 *Phys. Rev. A* **76** 064501
[60] Jiang D, Arora B, Safronova M S, Clark C W 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 154020

Theoretical study of static dipole polarizabilities and hyperpolarizability of B^{2+} and B^{+} ions*

Chen Chi-Ting [1)] Wu Lei [1)] Wang Xia [1)] Wang Ting [1)]
Liu Yan-Jun [2)] Jiang Jun [1)†] Dong Chen-Zhong [1)]

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

2) (*College of Science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou* 730050, *China*)

(Received 17 October 2022; revised manuscript received 27 April 2023)

Abstract

The wave functions, energy levels, and oscillator strengths of B^{2+} ions and B^{+} ions are calculated by using a relativistic potential model, which is named the relativistic configuration interaction plus core polarization (RCICP) method.The presently calculated energy levels are in very good agreement with experimental energy levels tabulated in NIST Atomic Spectra Database, with difference no more than 0.05%.The presently calculated oscillator strengths agree very well with NIST and some available theoretical results. The difference is no more than 0.6%. By using these energy levels and oscillator strengths, the electric-dipole static polarizability of the $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, and $3s_{1/2}$ state and static hyperpolarizability of the ground state $2s_{1/2}$ for B^{2+} ion, as well as electric-dipole static polarizability of the $2s^2\ {}^1S_0$ state and $2s2p\ {}^3P_0$ state for B^{+} ion are determined, respectively. The polarizability of the $2p_{1/2}$ state and $2p_{3/2}$ state of B^{2+} ion are negative. The main reason is that the absorption energy of the $2p_{1/2,3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ resonance transition is negative. The contribution to the polarizability of the $2p_{1/2}$ state and $2p_{3/2}$ state are both negative. For the tensor polarizability of the $2p_{3/2}$ state, the main contribution from the $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ transition and $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ transition are 2.4963 a.u. and –0.2537 a.u., respectively, and the present RCICP result is 2.1683 a.u. The largest contribution to the hyperpolarizability of the ground state $2s_{1/2}$ originates from the term of $\alpha^1\beta_0$. The electric-dipole static polarizability of the $2s^2\ {}^1S_0$ state and $2s2p\ {}^3P_0$ state of B^{+} ion are 9.6220 a.u. and 7.7594 a.u., respectively. The presently calculated blackbody radiation (BBR) shift of the $2s2p\ {}^3P_0 \rightarrow 2s^2\ {}^1S_0$ clock transition is 0.01605 Hz. This BBR shift is one or two orders of magnitude smaller than that for alkaline-earth-metal atom.

Keywords: electric-dipole polarizability, hyperpolarizability, B^{2+} ions, B^{+} ions

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap **DOI:** 10.7498/aps.72.20221990

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2022YFA1602500), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12174316), the Young Teachers Scientific Research Ability Promotion Plan of Northwest Normal University, China (Grant No. NWNU-LKQN2020-10), and the Funds for Innovative Fundamental Research Group Project of Gansu Province, China (Grant No. 20JR5RA541).

† Corresponding author. E-mail: phyjiang@yeah.net