arXiv:2301.03154v1 [physics.atom-ph] 9 Jan 2023

镝、钬、锎和锿的超精细结构计算

Saleh O. Allehabi、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum*School of Physics, University of New South Wales, Sydney 2052, Australia*（日期：2023年1月10日）

我们采用近期开发的一种适用于价电子数较多的开壳层的组态相互作用（CI）方法，研究了两种重原子：锎（Cf，Z= 98）和锿（Es，Z= 99）。受测量这些原子超精细结构（HFS）的实验工作的启发，我们计算了磁偶极超精细结构常数A 和电四极超精细结构常数 B ，以便根据核磁矩 μ 和电四极矩 Q来解读测量结果。为验证计算结果，我们还对较轻的同系元素镝（Dy，Z= 66）和钬（Ho，Z= 67）进行了类似计算；它们的电子结构分别与锎和锿相似。我们修订了锿若干同位素的核矩，从而改进了 ^{253}Es [μ（^{253}Es） $= 4.20(13)\mu_N$]的磁矩值。

一、引言

对重锕系元素原子性质的研究日益受到关注 [1–8]。人们正在测量跃迁频率和超精细结构（HFS）。测量超精细结构旨在获取重原子核核矩的数据。这将增进我们对超重原子核核结构的认识，并有助于寻找假设中的稳定岛。有鉴于此，我们重点从理论上研究重锕系元素锎（Cf，Z= 98）和锿（Es，Z= 99）的超精细结构。将计算结果与测量值结合起来，可以提取所研究同位素的核磁矩 μ 和电四极矩 Q 。

最近，人们测量了锎奇数同位素（^{249}Cf、^{251}Cf、^{253}Cf）若干态的超精细结构常数，并利用我们的计算结果 [8]提取了核矩 μ 和 Q 。本文详细介绍这些计算，以及针对锿开展的类似计算。对于锿，目前尚无理论结果，但已有多篇实验论文发表。文献 [1–3]采用不同的经验技术，研究了锿的三种具有非零核自旋的同位素 ^{253,254,255}Es 的超精细结构。

锎和锿等重锕系元素是具有开5f 亚层的原子。锎的开壳层电子数为十二个，锿为十三个（包括 7s 电子）。这给计算带来了挑战。我们采用针对这类系统开发的组态相互作用与微扰理论（CIPT） [9] 方法。为了检验该方法的适用性以及结果的预期精度，我们对镝系元素镝（Dy，Z=66）和钬（Ho，Z= 67）进行了类似的计算；它们的电子结构分别与锎和锿相似。镝和钬都经过了广泛的实验和理论研究（例如参见 [10–18]）。在此，我们将结果与实验数据进行比较：镝的数据见参考文献 [10, 16]，钬的数据见参考文献 [16–18]，以检验所用方法的精度。

II. 计算方法

A. 能级计算

如引言中所述，镝原子和锎原子有十二个价电子，钬原子和锿原子有十三个价电子。众所周知，随着价电子数增加，组态相互作用矩阵的规模会急剧增大，使得这类系统的标准组态相互作用计算实际上难以进行。本文采用专为这类系统开发的 CIPT 方法 [9] 。该方法通过忽略高能态之间的非对角矩阵元，并减小这些态对低能态之间矩阵元的类微扰理论修正的贡献，从而缩小组态相互作用矩阵的规模。最终组态相互作用矩阵的规模等于低能态的数量。

组态相互作用哈密顿量可写为

$$\hat{H}^{\rm CI} = \sum_{i=1}^{N_v} \hat{H}_i^{\rm HF} + \sum_{i<j}^{N_v} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}, \qquad (1)$$

其中， i 和 j 表示价电子， N_v 是价电子总数， e 是电子电荷， r 是距离。$\hat{}$ $H_i^{\rm HF}$是单电子 Hartree-Fock（HF）哈密顿量，其形式为

$$\hat{H}_i^{\rm HF} = c\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + (\beta - 1)mc^2 + V_{\rm nuc}(r_i) + V^{N-1}(r_i). \quad (2)$$

这里， c 是光速， $\boldsymbol{\alpha}_i$ 和 β 是狄拉克矩阵，$\hat{}$$\mathbf{p_i}$ 是电子动量， m 是电子质量， $V_{\rm nuc}(i)$是通过对核电荷密度的费米分布积分得到的核势，而 $V^{N-1}(i)$是针对从所考虑原子的基态组态中移去一个 $7s$ （或 $6s$）电子后所得组态计算得到的自洽Hartree-Fock势。这对应于 V^{N-1} 近似 [19, 20] ，该近似便于生成单电子基组。单电子基组态在冻结的 V^{N-1} 势中计算，因此对应于一个电子从基态激发出的原子

态。外部电子波函数表示为单行列式基态函数展开的系数

$$\Psi(r_1,\ldots,r_M) = \sum_{i=1}^{N_1} X_i\Phi_i(r_1,\ldots,r_M) + \sum_{j=1}^{N_2} Y_j\Phi_j(r_1,\ldots,r_M). \quad (3)$$

其中，M 为价电子数，N_1 为低能基态数，N_2 为高能基态数。

于是，组态相互作用矩阵方程可写成分块形式

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = E_a\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}. \quad (4)$$

其中，分块 A 对应低能态，分块 D对应高能态，而分块 B 和 C对应交叉项。注意，由于总组态相互作用矩阵是对称的，因此有 $C = B'$，即 $c_{ij} = b_{ji}$。向量 X 和 Y 包含价电子波函数在单行列式多电子基函数上的展开系数（见式 3）。

由第二个方程（ Y）求得4，可得

$$Y = (E_aI - D)^{-1}CX. \quad (5)$$

将 Y 代入第一个方程（4），可得

$$\left[A + B(E_aI - D)^{-1}C\right]X = E_aX, \quad (6)$$

其中， I 为单位矩阵。接着，根据参考文献 [9] ，我们忽略分块 D 中的非对角矩阵元。这使得（$E_aI - D$）$^{-1}$ 矩阵具有非常简单的结构，（ $E_aI - D\ {}^{-1}_{ik} = \delta_{ik}/\ E_a - E_k$ E_k ） $\langle k|H^{\mathrm{CI}}|k\rangle$ 6 （），其中 。有效组态相互作用矩阵（ ）的矩阵元形式为

$$\langle i|\hat{H}^{\mathrm{eff}}|j\rangle = \langle i|\hat{H}^{\mathrm{CI}}|j\rangle + \sum_k \frac{\langle i|\hat{H}^{\mathrm{CI}}|k\rangle\langle k|\hat{H}^{\mathrm{CI}}|j\rangle}{E_a - E_k}. \quad (7)$$

我们看到，低能态之间的标准组态相互作用矩阵元会受到一个修正项的修正，该修正项与能量的二阶微扰理论修正非常相似。这也说明了这种方法名称的由来。为了计算这一二阶修正，我们需要知道态 E_a 的能量，而该能量必须通过求解方程得到，也就是说，事先并不知道。因此需要进行迭代。我们从任意一个合理的能量估计值开始。例如，可以采用忽略二阶修正时求解方程得到的能量。请注意，二阶修正中与能量无关的分子只需在第一次迭代时计算一次，保存到磁盘上，并在后续每次迭代中重复使用。这意味着只有第一次迭代需要耗费一些时间，而其他迭代都非常快。通常，完全收敛所需的迭代次数不到十次。最终，我们得到态 E_a 的能量以及展开系数X 和 Y。

B. 基态

为求解组态相互作用方程，我们需要由单电子态构造多电子基态。对于单电子基态，我们采用 B样条方法 [21, 22]。这些态定义为 B 样条的线性组合，它们是 HF 哈密顿量（2）的本征态。在半径为 $R_{\max} = 40a_B$ 的盒子内计算 40 个九阶 B 样条（其中 a_B 表示玻尔半径），轨道角动量为 $0 \le l \le 4$。每个分波中使用原子实以上的 14 个态。研究发现，通过选择 $l_{\max}$、$R_{\max}$ 和 B 样条的数量，可以使基组对低激发态充分饱和。通过对若干参考组态进行所有可能的单电子和双电子激发，得到多电子态。将一个、两个或三个与原子低激发态相对应的组态作为参考组态。每次考虑一个具有相同宇称的组态。对于每个组态，考虑单电子态总角动量 j 投影的所有可能取值，并构造总多电子角动量 J 及其投影 M 取固定值的多电子态。通常，我们取 $M = J$。

C. 超精细结构的计算

本节主要沿用我们此前关于铪和铲的研究 [23]。为计算超精细结构，我们采用时变 Hartree-Fock（ TDHF）方法，该方法等价于著名的随机相位近似（ RPA）。RPA 方程如下：

$$\left(\hat{H}^{\mathrm{RHF}} - \epsilon_c\right)\delta\psi_c = -\left(\hat{f} + \delta V^f_{\mathrm{core}}\right)\psi_c \quad (8)$$

ˆ其中 f 是外场算符（核磁偶极场或电四极场）。(8) 中的指标 c 表示原子实中的态，ψ_c 是原子实中态 c 的单电子波函数，$\delta\psi_c$ 是外场引起的该波函数修正，而$\delta V^f_{\mathrm{core}}$ 是所有原子实态变化所引起的自洽 RHF 势修正。方程 (8) 针对原子实中的所有态自洽求解。由此构造出价电子与外场相互作用的有效算符 ˆ$f + \delta V^f$原子实。多电子态 a 的能级移动为

$$\delta\epsilon_a = \langle a|\sum_{i=1}^{M}\left(\hat{f} + \delta V^f_{\mathrm{core}}\right)_i|a\rangle. \quad (9)$$

这里 M 是价电子的数量 .
当价电子的波函数

由方程（6）求得时，方程（9）可简化为

$$\delta\epsilon_a = \sum_{ij} x_i x_j \langle\Phi_i|\hat{H}^{\rm hfs}|\Phi_j\rangle, \qquad (10)$$

其中 $\hat{H}^{\rm hfs} = \sum_{i=1}^{M} (\hat{f} + \delta V^{f}_{\text{原子实}})_{i}$。为了提高结果的准确性，可以使用完整展开（3）。此时，引入一个新的向量 Z较为方便，它同时包含 X和 Y， $Z \equiv \{X, Y\}$。请注意，（6）的解满足归一化条件 $\sum_i x_i^2 = 1$。总波函数（3）的归一化条件则不同，

$\sum_i x_i^2 + \sum_j y_j^2 \equiv \sum_i z_i^2 = 1$。因此，当由（ X 6）求得 Y，并由（5）求得 Y时，两个向量都应重新归一化。于是，超精细结构矩阵元可由与（10）类似但项数多得多的表达式给出

$$\delta\epsilon_a = \sum_{ij} z_i z_j \langle\Phi_i|\hat{H}^{\rm hfs}|\Phi_j\rangle. \qquad (11)$$

能级移动（9）用于通过教科书中的公式计算超精细结构常数 A和 B

$$A_a = \frac{g_I \delta\epsilon_a^{(A)}}{\sqrt{J_a(J_a+1)(2J_a+1)}}, \qquad (12)$$

and

$$B_a = -2Q\delta\epsilon_a^{(B)} \sqrt{\frac{J_a(2J_a-1)}{(2J_a+3)(2J_a+1)(J_a+1)}}. \qquad (13)$$

这里， $\delta\epsilon_a^{(A)}$是由原子电子与核磁矩相互作用引起的能级移动（9）μ， $g_I = \mu/I$是核自旋， I 是由原子电子与核电四极矩相互作用引起的能级移动（ $\delta\epsilon_a^{(B)}$（9） Q（Q 在（13）中以巴恩为单位测量）。

III. 镝和钬的能级及超精细结构

为了检验该方法的准确性，我们首先计算了镝和钬的一些低激发态的能级。结果列于表 I中。如表所示，我们的结果与参考文献 [16] 汇编的相应原子系统实验结果一致。理论计算与测量值之间的差异在数百 cm^{-1}以内。文中还给出了计算得到的朗德 g 因子和实验值。将计算得到的朗德 g 因子与非相对论表达式进行比较，有助于识别态标记。

$$g_{NR} = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \qquad (14)$$

总轨道角动量 L和总自旋 S 无法从式（14）的相对论计算中得出。因此，我们

表 I. 镝和钬原子若干低态的激发能（E，cm^{-1}）和 g 因子。

组态	Term	J	本工作 E	本工作 g	NIST [16] E	NIST [16] g
			Dy			
$4f^{10}6s^2$	^{5}I	8	0.000	1.242	0.000	1.2416
$4f^{10}6s^2$		7	3933	1.175	4134.2	1.1735
$4f^{10}6s^2$		6	7179	1.073	7050.6	1.0716
$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	8	7818	1.347	7565.610	1.35246
$4f^9 5d6s^2$		7	9474	1.353	8519.210	1.336
$4f^{10}6s^2$	^{5}I	5	9589	0.909	9211.6	0.911
$4f^9 5d6s^2$	^{7}I^o	9	10048	1.316	9990.974	1.32
$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	6	11052	1.417	10088.802	1.36
$4f^{10}6s^2$	^{5}I	4	11299	0.613	10925.3	0.618
			Ho			
$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	15/2	0.00	1.196	0.00	1.1951
$4f^{11}6s^2$		13/2	5205	1.107	5419.7	–
$4f^{10}5d6s^2$	$(8,\frac{3}{2})$	17/2	8344	1.262	8378.91	–
$4f^{10}5d6s^2$		15/2	8385	1.280	8427.11	–
$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	11/2	8501	0.979	8605.2	1.012
$4f^{10}5d6s^2$	$(8,\frac{3}{2})$	13/2	8989	1.336	9147.08	–
$4f^{10}5d6s^2$		19/2	8952	1.231	9741.50	–
$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	9/2	10550	0.780	10695.8	0.866

根据公式（14所得数值与计算出的 g因子非常接近这一条件，选取它们的值。这样，我们就能将该态与非相对论记法 $^{2S+1}L_J$联系起来。这里， J 表示总角动量（$\mathbf{J = L + S}$）。在有实验数据可用时，当前计算所得的镝和钬 g因子也与实验值吻合良好。要正确识别这些态，必须考虑这一点。钬的态$4f^{11}6s^2\ ^4\text{I}^{\text{o}}_{9/2}$ 是一个明显的例外，其理论值与实验值有显著差异。根据 NIST 数据库中的钬光谱 [16]可以看出，存在多个宇称和总角动量 J 相同的态，它们之间仅相隔很小的能量间隔，且由不同的电子组态主导。由于这种强烈的混合， g因子的计算变得不稳定。

还计算了镝和钬基态及一些低激发态的超精细结构。镝原子有两种稳定同位素， ^{161}Dy和 ^{163}Dy；钬原子有一种稳定同位素， ^{165}Ho。计算结果及相应的核参数列于表II中。可以看出，对于镝和钬的大多数态，理论与实验所得的磁偶极常数 A 和电四极常数B 吻合良好。镝和钬的 A 常数的理论值与实验值相差不超过3%；镝的 B 常数相差不超过4%，而钬的 B 常数相差$\sim$ 20%。此前对铒的超精细结构常数也发现了理论与实验之间类似的吻合情况 [7]。钬的两个态是例外，分别为 $4f^{10}5d6s^2(8,{}_{3\,2})_{13/2}$态，以及

–

表 II. 镝和钬低激发态的超精细结构常数 A 和 B（单位：兆赫）。^{161,163}镝和 ^{165}钬同位素的核自旋 I、核磁矩 μ（μ_N）以及核电四极矩 Q（b）取自参考文献 [24]、 $g_I = \mu/I$。最后一列给出了 A 和 B实验数据的参考文献。

同位素				本工作		实验结果。		
核参数	组态	Term	J	A	B	A	B	Ref.
^{161}镝								
μ= -0.480, I= 5/2, Q= 2.51	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	8	-113	1127	-116.231	1091.577	[10]
	$4f^{10}6s^2$		7	-125	1057	-126.787	1009.742	[10]
	$4f^{10}6s^2$		6	-140	991	-139.635	960.889	[10]
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	8	-88	2256	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$		7	-104	2397	-	-	-
	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	5	-166	928	-161.971	894.027	[10]
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}I^o	9	-80	2663	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	6	-122	2901	-	-	-
	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	4	-216	997	-205.340	961.156	[10]
^{163}镝								
μ= 0.673, I= 5/2, Q= 2.65	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	8	158	1190	162.754	1152.869	[10]
	$4f^{10}6s^2$		7	176	1116	177.535	1066.430	[10]
	$4f^{10}6s^2$		6	196	1046	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	8	123	2381	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$		7	146	2531	-	-	-
	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	5	233	979	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}I^o	9	112	2812	-	-	-
	$4f^9 5d6s^2$	^{7}H^o	6	170	3063	-	-	-
	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	4	303	1053	-	-	-
^{165}钬								
μ= 4.17, I= 7/2, Q= 3.58	$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	15/2	787	-1943	800.583	-1668.089	[17]
	$4f^{11}6s^2$		13/2	939	-1668	937.209	-1438.065	[17]
	$4f^{10}5d6s^2$	$(8, \frac{3}{2})$	17/2	666	1085	776.4(4.5)	608(300)	[18]
	$4f^{10}5d6s^2$		15/2	763	1127	783.0(4.5)	801(300)	[18]
	$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	11/2	1061	-1315	1035.140	-1052.556	[17]
	$4f^{10}5d6s^2$	$(8, \frac{3}{2})$	13/2	879	1829	916.6(0.5)	2668(7)	[18]
	$4f^{10}5d6s^2$		19/2	617	1650	745.1(1.4)	1747(78)	[18]
	$4f^{11}6s^2$	^{4}I^o	9/2	1279	-1174	1137.700	-494.482	[17]

$4f^{11}6s^2\ ^4\mathrm{I}^o_{9/2}$ 态。这里，电四极超精细结构常数 B 的理论值与实验值相差显著。具体而言， $4f^{11}6s^2\ ^4\mathrm{I}^o_{9/2}$态的偏差为138%。该态的 g因子精度也较差，这表明强组态混合也会影响超精细结构。值得一提的是，早先一项采用多组态狄拉克-福克方法进行的研究也发现，该态的精度较低，与实验结果相差117% [13]。

需要指出的是，我们此前已对具有相似电子结构的铒原子系统进行了研究，以检验采用 CIPT 方法的准确性 [7]。我们已经计算了具有非零自旋的稳定同位素 ^{167}Er 的上述所有原子性质、能量、 g- 因子和超精细结构常数 A 以及 B。测量值与我们的结果吻合良好（见参考文献 [7] 表 1 和表 6）。最后，我们预计锕和镤的结果也将是准确的。

IV. 电离势

计算电离势（IP）是检验基态理论方法的有效方式。电离势是中性原子与离子的基态能量之差。在本研究的计算中，我们采用的 CIPT 方法具有低激发态计算精度较高的特点，而随着能量升高，精度会逐渐降低。基态的计算精度预计最高。另一方面，获得基态的超精细结构就足以提取核参数 μ 和 Q。因此，我们计算了本研究所涉及所有原子的第一电离势（IP_1）。我们采用相同的 V^{N-1} 势和相同的单电子基组，计算中性原子及其对应离子的基态能量。这确保了与芯电子相关的能量能够精确抵消。结果列于表III ，并与现有实验数据进行了比较。如表中所示，镝、钬、锕和镤的结果精度分别为 2.7%、1.6%、0.3% 和 0.8%。

表 III. 第一电离势 IP_1 （单位：cm^{-1}）的实验值和理论值。

Atom	态		IP_1		
	初态	末态	本文结果	实验值	Ref.
Dy	$4f^{10}6s^2\ \ ^5I_8$	$4f^{10}6s\ (8, 1/2)^o_{17/2}$	46658	47901.76(5)	[25]
Ho	$4f^{11}6s^2\ \ ^4I^o_{15/2}$	$4f^{11}6s\ (\frac{15}{2}, \frac{1}{2})^o_8$	47819	48567(5)	[26]
Cf	$5f^{10}7s^2\ \ ^5I_8$	$5f^{10}7s\ \ ^4I^o_{17/2}$	50821	50663(2)	[27]
Es	$5f^{11}7s^2\ \ ^4I^o_{15/2}$	$5f^{11}7s\ \ ^5I^o_8$	51763	51358(2)	[27]
				$51364.58(14)_{stat}(50)_{sys}$	[28]

表 IV. 镄、钬、锎和锿原子基态的超精细结构常数 A 和 B （单位：兆赫）。

Atom	组态	Term	J	A	B
Dy	$4f^{10}6s^2$	^{5}I	8	$587\times g_I$	449×Q
Ho	$4f^{11}6s^2$	$^4I^o$	15/2	$661\times g_I$	-543×Q
Cf	$5f^{10}7s^2$	^{5}I	8	$608\times g_I$	477×Q
Es	$5f^{11}7s^2$	$^4I^o$	15/2	$681\times g_I$	-818×Q

V. 超精细结构结果

表IV列出了我们计算得到的镄、钬、锎和锿基态超精细结构常数。我们计算了磁偶极超精细结构常数 A 和电四极超精细结构常数 B，它们可用于提取任何具有非零自旋的同位素的核矩。为了更好地了解重锕系元素计算的精度，将超精细结构常数的电子结构因子与较轻原子镄、钬和铒的对应因子进行比较很有帮助。对于超精细结构常数 A 和 B，情况有所不同。重锕系元素与其较轻对应元素的磁偶极常数 A 的电子结构因子几乎相同，变化幅度在 3% 以内。超精细结构常数 B 的电子结构因子也相似，但变化幅度较大：镄与锎这一对约为 20%，钬与锿这一对则达到 50%。这说明可使用重锕系元素的较轻对应元素来估算计算的不确定度。我们假定所有所研究原子的超精细结构常数 A的不确定度为 3%，超精细结构常数B 的不确定度为 16%（即钬基态理论值与实验值之间的差异）。后一假设相当保守。镄基态的超精细结构常数 B 理论值与实验值之间的差异约为 3%，而铒基态的这一差异约为 10% [7]。

对于具有开壳层的原子而言，这种高精度有些令人惊讶。因此，了解占主导地位的贡献是如何形成的颇有启发性。首先，我们注意到，根据数值测试，组态混合对超精细结构常数的贡献相对较小。约90%或更多的贡献来自主导组态：镄和钬为 $4f^n6s^2$，锎和锿为 $5f^n7s^2$（n=10,11）。在这些组态中， s电子构成一个闭壳层，不会对超精细结构产生贡献。因此，所有贡献均来自 f电子。众所周知，对于激发的价电子 f态（例如，铒的$4f$ 态或钔的 $5f$ 态），由超精细结构算符 $\langle 4f|\hat{}f|4f\rangle$引起的能级移动Hartree–Fock值很小，主要贡献来自原子实极化修正$\langle 4f|\delta V^f{}_{原子实}|4f\rangle$ （见式（9））。本研究所考察的原子则情况不同。f 电子态位于原子实内部，其局域位置与具有相同主量子数的其他态大致相同，也就是说，它甚至不是最外层壳层。例如，镄、钬和铒的情况是 $\langle 4f|r|4f\rangle < 1a_B$ ，而铒的情况是 $\langle 4f|r|4f\rangle \sim 20a_B$。由于处于原子实内部， f态会穿透到原子核附近的短距离处，使Hartree–Fock矩阵元 $\langle 4f|f|4f\rangle$具有很大的值。相比之下，原子实极化修正 $\langle 4f|\delta V^f{}_{原子实}|4f\rangle$很小（$\sim$ 1%）。归根结底，零阶矩阵元很大，而原子实极化和组态混合修正很小。这正是结果具有高精度的关键。

表V 展示了锿的三种同位素（$^{253-255}$Es）的超精细结构结果与分析。此表有两个用途。首先，它再次证实了计算的准确性。然而，要将计算结果与实验进行比较，我们需要使用核矩，而核矩的准确度已知相当低（见表）。例如， ^{253}Es 原子核磁矩的不确定度为 17%。另一方面，我们估计超精细结构常数A 的准确度为 3%。这意味着，我们可以通过比较实验数据与计算结果来提取核矩，从而提高核矩的准确度。结果列于表中。我们看到，只有 μ(^{253})Es 的核矩确实得到了改进。对于其他核矩，不确定度相近，但中心值有所偏移。考虑误差条后，新旧数值是一致的。

VI. 结论

我们计算了重锕系元素锕和锿基态的磁偶极和电四极超精细结构常数 A 以及 B。同时，我们还对这些原子的较轻对应元素镄和钬进行了类似计算。为确定结果的准确性，在有实验数据的情况下，我们对超精细结构常数、能级、 A 因子和电离势进行了理论与实验的比较

表 V. 镄基态的超精细结构常数 A 和 B（单位：兆赫）。 ^{253}镄同位素的核自旋 I、核磁矩 μ（μ_N）和核电四极矩 Q（b）取自参考文献 [24], , 而 ^{254}镄和 ^{255}镄的核参数取自参考文献 [3]。 $g_I = \mu/I$。最后一列列出了有关 A 和 B的实验数据的参考文献。本研究所得 μ 和 Q 的数值，是通过比较实验和计算所得的超精细结构常数得出的，其中假定 A 的计算不确定度为 3%， B 的计算不确定度为 16%。

同位素			本研究				实验结果。		
核参数	组态	Term	A	B	μ	Q	A	B	Ref.
^{253}镄									
μ= 4.1(7), I= 7/2, Q= 6.7(8)	$5f^{11}7s^2$	$^4\mathrm{I}^o_{15/2}$	798	-5481	4.12(15)	4.8(1.0)	802(18)	-3916(550)	[3]
					4.20(13)	5.3(8)	817.153(7)	-4316.254(76)	[1]
^{254}镄									
μ= 3.42(7), I= 7, Q= 9.6(1.2)	$5f^{11}7s^2$	$^4\mathrm{I}^o_{15/2}$	333	-7853	3.48(10)	7.6(1.3)	339(4)	-6200(300)	[3]
^{255}镄									
μ= 4.14(10), I= 7/2, Q= 5.1(1.7)	$5f^{11}7s^2$	$^4\mathrm{I}^o_{15/2}$	806	-4172	4.23(26)	3.7(1.8)	824(45)	-3001(1400)	[3]

。我们发现，超精细结构常数 A的不确定度为 3%，而超精细结构常数 B的不确定度约为 16%。利用所研究这些重元素计算得到的超精细结构常数，可以从测量数据中提取原子核的磁偶极矩和电四极矩。

致谢

作者感谢 Sebastian Raeder 进行了许多富有启发性的讨论。本研究得到澳大利亚研究理事会资助，资助项目编号为 DP190100974 和 DP200100150。S.O.A. 衷心感谢麦地那伊斯兰大学（沙特阿拉伯王国教育部）为其奖学金提供资助。

[1]] L. S. Goodman、H. Diamond 和 H. E. Stanton，《镄》和《镄》的核与原子磁矩及超精细结构参数，《物理评论A》11，499（1975）。[2] N. Severijns、A. A. Belyaev、A. L. Erzinkyan、P. -D. Ever-sheim、V. T. Filimonov、V. V. Golovko、G. M. Gurevich、P. Herzog、I. S. Kraev、A. A. Lukhanin、V. I. Noga、V. P. Parfenova、T. Phalet、A. V. Rusakov、M. Tandecki、Yu. G. Toporov、C. Tramm、E. Traykov、S. Van Gorp、V. N. Vyachin、F. Wauters、D. Z´akouck´y 和 E. Zotov，铁中镄的超精细磁场及 ^{254}镄的核磁矩，《物理评论C》79，064322（2009）。[3] S. Nothhelfer、Th. E. Albrecht-Sch¨onzart、M. Block、*et al.*，《通过激光光谱学研究镄-253至镄-255的核结构》。《物理评论C》105卷，L021302（2022）。[4] M. Laatiaoui 和 S. Raeder，锕系元素的生产与研究新进展，《Atoms》10，61（2022）。[5] H. Backe、A. Dretzke、S. Fritzsche、R.G. Haire、P. Kunz、W. Lauth、M. Sewtz 和 N. Trautmann，镄元素（Z $= 100$）的激光光谱研究，《超精细相互作用》162，3（2005）。[6] M. Sewtz、H. Backe、A. Dretzke、G. Kube、W. Lauth、P. Schwamb、K. Eberhardt、C. Gr¨uning、P. Th¨orle、N. Trautmann、P. Kunz、J. Lassen、G. Passler、C. Z. Dong、S. Fritzsche 和 R. G. Haire，首次观测锿元素（Z $= 100$）的原子能级，《物理评论快报》90，163002（2003）。[7] S. O. Allehabi、J. Li、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambauma，铒和锿电子结构的理论研究，《定量光谱学》与辐射线传递 253, 107137 (2020). [8] Felix Weber, Tho mas E. Albrecht-Sch¨onzart, S. O. Alle- habi, Sebastian Berndt, Michael Block, Holger Dorrer, Christoph E. D¨ullmann, Vladimir A. Dzuba, Julie G. Ezold, Victor Flambaum, *et al*，通过激光光谱学探测 ^{249,253}锕的核矩和同位素位移，待发表。[9] V. A. Dzuba, J. C. Berengut, C. Harabati, and V. V. Flambaum, 将组态相互作用与微扰理论结合用于具有大量价电子的原子，《物理评论A》95, 012503 (2017). [10] W. J. Childs, 镝$^5I_{8,7}$ 原子态的超精细结构及基态核矩，《物理评论A》2, 1692 (1970). [11] W. Ebenh¨oh, V. J. Ehlers, and J. Ferch, 对Dy^{161} 和Dy^{63}, 的超精细结构测量，《物理学杂志》200, 84 (1967). [12] J. Ferch, W. Dankwort, and H. Gebauer, 使用原子束磁共振法研究DyI的超精细结构，《物理快报A》49, 287 (1974). [13] K. T. Cheng and W. J. Childs, 中性稀土原子超精细结构的第一性原理计算，《物理评论A》31, 2775 (1985). [14] V. A. Dzuba and V. V. Flambaum, Ag I、Dy I、Ho I、Yb II、Yb III、Au I和Hg II跃迁频率的相对论修正及精细结构常数变化的搜索，《物理评论A》77, 012515 (2008). [15] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and M. V. Marchenko, Sr、Dy、Yb II和Yb III中的相对论效应及精细结构常数变化的搜索，《物理评论A》68, 022506 (2003).

[16] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD 团队 (2019). NIST 原子光谱数据库（版本 5.7.1），[在线]。网址：https://physics.nist.gov/asd [2020, September 26]. 美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州。DOI: https://doi.org/10.18434/T4W30F. [17] B. Burghardt, S. B¨uttgenbach, N. Glaeser, R. Harzer,G. Meisel, B. Roski, and F. Tr¨aber, 亚稳态 ^{165}钬的超精细结构测量，《物理学杂志A》307, 193 (1982). [18] D. Stefanska, J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and B. Furmann, 钬原子偶宇称组态系统的精细结构和超精细结构研究，《定量光谱学与辐射传递》209, 180 (2018). [19] H. P. Kelly, 应用于原子的多体微扰理论，《物理评论》136, B896 (1964). [20] V. A. Dzuba, V^{N-M} 原子计算的近似方法，《物理评论A》71, 032512 (2005). [21] W. R. Johnson and J. Sapirstein, 相对论原子系统中二阶多体修正的计算，《物理评论快报》57, 1126 (1986). [22] W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein, 用于狄拉克方程的有限基组，由B样条函数，《物理评论A》37，307（1988）。[23] S. O. Allehabi、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum，铪（Hf，Z = 72）和铲（Rf，Z = 104）原子及其离子的电子结构理论研究：能级与超精细结构常数，《物理评论A》104，052811（2021）。[24] N. J. Stone，《原子数据与核数据表》90，75（2005）。[25] D. Studer、P. Dyrauf、P. Naubereit、R. Heinke 和 K. Wendt，镝的共振电离光谱学，《超精细相互作用》238，02A916（2017）。[26] E. F. Worden、R. W. Solarz、J. A. Paisner 和 J. G. Conway，激光光谱学测得的镧系元素第一电离势，《美国光学学会杂志》68，52（1978）。[27] A. Waldek、N. Erdmann、C. Gr¨uning、G. Huber、P. Kunz、J. V. Kratz、J. Lassen、G. Passler 和 N. Trautmann，用于测定锕系元素（从锕到镄）第一电离势的共振电离质谱测量，《美国物理联合会会议论文集》584，219（2001）。[28] F. Weber、T. E. Albrecht-Sch¨onzart、M. Block、P. Chhetri、C. E. D¨ullmann、J. G. Ezold、V. Gadelshin、A. N. Gaiser、F. Giacoppo、R. Heinke *et al.*，通过激光共振电离研究中性镄的原子结构，《物理评论研究》4，043053（2022）。