



CALCULATIONS OF ATOMIC HYPERFINE STRUCTURE BY A GENERALIZED BETHE-GOLDSTONE METHOD

R. Nesbet

► To cite this version:

R. Nesbet. CALCULATIONS OF ATOMIC HYPERFINE STRUCTURE BY A GENERALIZED BETHE-GOLDSTONE METHOD. Journal de Physique Colloques, 1970, 31 (C4), pp.C4-105-C4-105. 10.1051/jphyscol:1970417 . jpa-00213872

HAL Id: jpa-00213872

<https://hal.science/jpa-00213872>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CALCULATIONS OF ATOMIC HYPERFINE STRUCTURE BY A GENERALIZED BETHE-GOLDSTONE METHOD

by R. K. NESBET

IBM Research Laboratory, San Jose, California 95114

Résumé. — Une généralisation de la théorie de Brueckner, basée sur la hiérarchie des équations variationnelles de Bethe-Goldstone à n particules, a été utilisée pour calculer les interactions hyperfines dans différents atomes. La méthode utilisée a été modifiée de telle sorte que des configurations électroniques complètes apparaissent à chaque niveau de la hiérarchie. Ainsi les fonctions propres de L^2 et S^2 pourraient être utilisées tout au long du calcul bien que, pour des raisons pratiques, de telles fonctions ne soient pas construites explicitement. Pour l'état 2^2P de Li et l'état fondamental $2P$ de B, les paramètres d'interaction magnétique hyperfine calculés sont en excellent accord avec l'expérience (à environ 1 %). Ce travail confirme la nécessité d'introduire trois paramètres indépendants pour les interactions magnétiques hyperfines. La précision du gradient du champ électrique calculé, pour le bore, est estimé à partir de l'erreur relative sur les constantes de structure hyperfine magnétique calculées. Ceci implique que l'erreur relative du gradient du champ calculé soit plus faible que l'erreur expérimentale sur les constantes de couplage quadrupolaire pour B^{10} et B^{11} . Ces résultats sont utilisés pour évaluer les moments quadrupolaires des deux isotopes du bore. On peut s'attendre à ce que ces valeurs soient considérablement plus précises que celles que l'on trouve couramment.

Abstract. — A generalization of Brueckner's theory, based on a hierarchy of n -particle variational Bethe-Goldstone equations, has been used to compute hyperfine interactions in several atoms. The method used has been modified so that complete electronic configurations occur at each level of the hierarchy. Thus L^2 , S^2 eigenfunctions could be used throughout the calculations, although for practical reasons such functions are not constructed explicitly. For the 2^2P state of Li and the $2P$ ground state of B, the computed magnetic hyperfine interaction parameters are in excellent agreement with experiment (within roughly one per cent [1]). This work verifies the need for three independent parameters in magnetic hyperfine interactions. The accuracy of the computed electric field gradient in boron is estimated from the relative error in the computed magnetic hyperfine constants. This implies that the relative error in the computed field gradient is less than the experimental error in the quadrupole coupling constants for B^{10} and B^{11} . These results are used to estimate the quadrupole moments of the two boron isotopes. The resulting moments are expected to be considerably more accurate than currently accepted values.

[1] NESBET (R. K.), *Phys. Rev. A*, (1970), in the press.