DOI：10.20271/j.cnki.1673-9833.2026.2013

里德堡态氧原子能级和量子亏损的理论计算

马　堃

（黄山学院 信息工程学院，安徽 黄山 245041）

摘　要：精确的里德堡态原子能级数据对理解原子结构性质、解释光谱数据等有着重要的应用价值。基于最弱受约束电子势模型，给出了氧原子 $[Be]2p^3(^4S^o)ns\ ^5S_2^o$、$[Be]2p^3(^4S^o)ns\ ^3S_1^o$ 和 $[Be]2p^3(^4S^o)nd\ ^3D_1^o$（$n$=3~50）3 个奇宇称里德堡系列的能级和量子亏损。具体地，根据 Martin 公式确定每个里德堡系列的光谱系数，由此计算里德堡能级的量子亏损和能量值，进一步探究了量子亏损与主量子数 n 的关系。结果表明：计算结果与已有的实验数据吻合度较高，相差均不大于 10 cm^{-1}；主量子数越大，s 轨道电子渗透程度越小，而 d 轨道电子渗透程度越大；WBEPM 方法可以高精度地计算高 n 里德堡原子体系的能级，且不受电子数的限制。

关键词：氧原子；里德堡系列；能级；WBEPM；量子亏损

中图分类号：O562.1　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1673-9833(2026)02-0103-06

引文格式：马　堃 . 里德堡态氧原子能级和量子亏损的理论计算 [J]. 湖南工业大学学报，2026，40(2)：103-108.

Theoretical Calculation of Energy Levels and Quantum Defects in Rydberg State Oxygen Atoms

MA Kun

（School of Information Engineering，Huangshan University，Huangshan Anhui 245041，China）

Abstract：Due to the fact that accurate Rydberg state atomic energy level data have an important application value for understanding atomic structural properties and interpreting spectral data, based on the weakest constrained electron potential model, the energy levels and quantum defects have been calculated of three odd parity Rydberg series for the $1s^22s^22p^3(^4S^o)ns\ ^5S_2^o$ (n=3~50), $1s^22s^22p^3(^4S^o)ns\ ^3S_1^o$ (n=3~50) and $1s^22s^22p^3(^4S^o)nd\ ^3D_1^o$ (n=3~50). Specifically, the spectral coefficients of each Rydberg series are determined according to Martin' s formula, with the quantum deficit and energy values of the Rydberg energy levels calculated accordingly, followed by a further inquiry into the relationship between quantum deficit and the principal quantum number n. The calculated results exhibit a high degree of consistency with the existing experimental data, with deviations no greater than 10 cm^{-1}. As the principal quantum number (n) increases, the penetration degree of s-orbital electrons decreases, while that of d-orbital electrons increases. The WBEPM method helps to accurately calculate the energy levels of high-n Rydberg atomic systems without being limited by the number of electrons.

Keywords：Oxygen atom；Rydberg series；energy level；WBEPM；quantum defect

0　引言

原子中的一个价电子被激发到很高的量子态时，即形成所谓的里德堡态原子。里德堡态原子价电子具有较大的主量子数 n，这一特点赋予了其独特的性质。如里德堡原子的寿命较长，为研究量子波函数稳态

收稿日期：2024-10-11

基金项目：国家自然科学基金资助项目（11804112）；安徽省高校自然科学研究基金资助重点项目（2024AH051759）；安徽省教育教学研究基金资助重点项目（2023jyxm0701）；黄山学院教学创新团队基金资助项目（2022JXTD01）

作者简介：马　堃，男，黄山学院教授，博士，主要研究方向为原子与分子物理，E-mail：makun@ustc.edu.cn

性质以及电子波包经典轨道动力学行为提供了方便；里德堡原子的跃迁频率 (无线电和微波) 与星际介质中低能电子和离子辐射复合频率匹配，可以作为天体物理环境和状态诊断的原子工具 [1−3]。近年来，里德堡态原子在量子信息处理、量子计算和量子模拟 [4] 等方面扮演了重要角色，这极大地激发了人们对里德堡态原子的研究兴趣。由于里德堡态原子的价电子与剩余离子中的电子和原子核相互作用，导致原子实极化和价电子贯穿等效应，因此里德堡态原子也展现了与氢原子的不同之处。人们引入了量子亏损的概念描述这一效应，并发展了多通道量子亏损理论（the multichannel quantum defect theory，MQDT）[5]、相对论量子亏损轨道方法（the relativistic quantum defect orbital，RQDO）[6]、量子亏损理论 [7] 等用于研究里德堡原子能级的理论方法。量子亏损理论在研究单个价电子的里德堡态原子时取得很大成功。当价电子数增多时，需要引入大量的参数，理论过程相当复杂。在量子亏损理论的基础上进一步发展的最弱受约束电子势模型（the weakest bound electron potential model，WBEPM），能很好地处理多价电子里德堡态原子能级和量子亏损 [8−9]。此外，WBEPM 还被用来研究极化率和色散系数等 [10]。

氧作为宇宙中除了氢和氦之外质量分数最高的元素，广泛存在于星际介质、地球大气及天体物理和实验室等离子体光谱中，其能级和跃迁数据对于了解恒星、星系及整个宇宙的结构非常重要 [11]。不仅如此，氧原子的跃迁谱线对于揭示地球或其他行星或系外行星上生命体的存在具有重要参考价值 [12]。氧原子具有较为复杂的原子结构，其基态有 4 个同科电子处于开壳状态，因此给理论计算带来了较大难度。

基于上述分析，本研究拟采用 WBEPM 模型，对氧原子的 $[Be]2p^3(^4S^o)ns\ ^5S_2^o$、$[Be]2p^3(^4S^o)ns\ ^3S_1^o$，以及 $[Be]2p^3(^4S^o)nd\ ^3D_1^o$（$n$=3~50）3 个奇宇称里德堡系列的能级和量子亏损开展具体计算研究，[Be] 表示 $1s^22s^2$ 满壳层电子组态。采用 NIST 原子光谱数据库中 4 个最低能级的数据，对光系数进行拟合，将计算得到的能级与量子亏损的计算值与实验值进行对比，评估 WBEPM 方法的精度与可靠性。以期给出现有文献中尚未给出的氧原子高里德堡能级数据，提升天体物理与等离子体诊断精度，为光谱实验工作者提供一定的原子数据参考 [13]。

1 理论方法

在 WBEPM 理论框架下，将孤立原子划分为原子实（原子核和内层电子）和外层电子（单个或者多个价电子），如图 1 所示。外层电子也是原子中最活跃的那部分电子，称为最弱受约束电子（the weakest bound electron，WBE），这些电子最容易激发或电离。原子实中的电子被称为非最弱受约束电子（the non-weakest-bound electron，NWBE），最弱受约束电子在原子实的平均势场中运动。

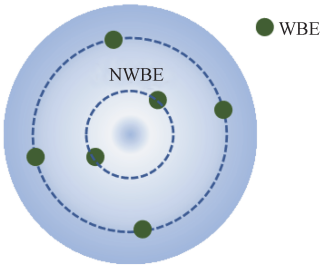


图 1 WBEPM 原子结构示意图

Fig. 1 Atomic structure diagram of WBEPM

为包含 WBE 电子的渗透、极化效应，WBE 所受的势能函数 $V(r)$ 可表示为 [14]

$$V(r)=-\frac{Z^*}{r}+\frac{k(k+1)+2k\ell}{2r^2}\ , \tag{1}$$

式中：Z^* 为有效核电荷数；k 为可调参数；r 为 WBE 与核之间的距离；ℓ 为 WBE 的角动量量子数。

式（1）所示势能函数的第一项为电子和核之间的 Coulomb 势，第二项为原子实极化效应带来的电偶极势。WBE 电子与原子实组成的体系类似氢原子模型，WBE 所满足的 Schrödinger 方程可以写为

$$\left[-\nabla^2/2+V(r)\right]\psi=\varepsilon\psi\ , \tag{2}$$

式（2）中：等式左边的第一项为 WBE 电子动能；第二项为 WBE 电子与原子实之间的势能；ε 为 WBE 的能量；ψ 为原子态波函数。

原子单位制下，式（2）的径向形式为

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2R(r)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}R(r)}{\mathrm{d}r}+\left[\varepsilon+\frac{Z^*}{r}-\frac{\ell^*(\ell^*+1)}{2r^2}\right]R(r)=0\text{。} \tag{3}$$

式中 $\ell^*=\ell+k$。

求解式（3）所示径向 Schrödinger 方程，可以得到如下 WBE 径向波函数：

$$R(r)=A\exp\left(-\frac{Z^*r}{n^*}\right)r^{\ell^*}L_{n-\ell-1}^{2\ell^*+1}\left(\frac{2Z^*r}{n^*}\right)\text{。} \tag{4}$$

式中：A 为归一化常数，具体形式为

$$A=\left(\frac{2Z^*r}{n^*}\right)^{\ell^*+3/2}\left[\frac{2n^*}{(n-\ell-1)!}\Gamma(n^*+\ell^*+1)\right]^{-1/2}\ , \tag{5}$$

其中 Γ 为 Gamma 函数；n^* 为有效量子数，并且 $n^*=n+k$，其中 n 为主量子数。

WBE 的能量为 $\varepsilon = -R\left(Z^*/n^*\right)^2$。　　（6）

式中 R 为里德堡常数。

令 $\frac{Z^*}{n^*} = \frac{Z_{\text{net}}}{n-\delta_n}$，其中 Z_{net} 为原子实的静电荷数，对于中性原子 Z_{net}=1，δ_n 为量子亏损，则可以将能级公式转化为如下光谱项表示：

$$T=\varepsilon+T_{\lim it}=T_{\lim it}-R\left(Z_{\text{net}}/(n-\delta_n)\right)^2。\quad（7）$$

式中：T 为原子谱项；$T_{\lim it}$ 为相应光谱系列的电离限。

在 W. C. Martin[15] 关于量子亏损理论的基础上，Zheng N. W. 等 [14] 进行了微扰修正，δ_n 可被表示为

$$\delta_n = \sum_{i=0}^{3} a_i m_n^{-2i} + \sum_{j=1}^{N} \frac{b_j}{m_n^{-2}-\varepsilon_j}。\quad（8）$$

式中：m_n=n−δ_0，其中 δ_0 为给定光谱序列中最低能级的量子数亏损；N 为外来微扰能级的数目；$\varepsilon_j = \left(T_{\lim it} - T_{j,\text{ perturb}}\right)/\left(RZ_{\text{net}}^2\right)$，其中 $T_{j,\text{ perturb}}$ 为外来微扰能级，它应该具有与被微扰能级相同的宇称与 J 值；a_i 和 b_j 为光谱序列参数，本文采用最小二乘法，借助最低几个实验值拟合得到。

2　计算结果和讨论

本研究中，基于 WBEPM 理论模型，开发了相应的计算程序代码，并且以氧原子为研究对象，具体计算了 [Be]2p^3(^{4}S^o)ns ^{5}S$_2^o$、[Be]2p^3(^{4}S^o)ns ^{3}S$_1^o$ 以及 [Be]2p^3(^{4}S^o)nd ^{3}D$_1^o$（n=3~50）3 个奇宇称里德堡系列的能级和量子亏损值。通过 NIST 原子光谱数据库 [16] 中 4 个最低能级数值，采用最小二乘法拟合得到光谱序列参数，具体计算结果在表 1 中给出。利用这些光谱序列参数进一步可以得到 3 个奇宇称里德堡系列的能级和量子亏损值，表 2~4 给出了具体的计算值。为了比较，表中还列出了文献中已有的数据以及本文计算值与文献值之间的差别。

表 1　氧原子里德堡系列 WBEPM 拟合光谱系数

Table 1　WBEPM spectral fitting coefficients of Rydberg series in oxygen atoms

里德堡系列	a_0	a_1	a_2	a_3
[Be]2p^3(^{4}S^o)ns ^{5}S$_2^o$	1.223 41	0.087 994 0	0.029 706 4	0.005 507 76
[Be]2p^3(^{4}S^o)ns ^{3}S$_1^o$	1.149 82	0.082 200 0	0.033 191 1	0.000 685 422
[Be]2p^3(^{4}S^o)nd ^{3}D$_1^o$	0.022 736 8	0.034 443 1	1.897 52	11.493 1

表 2　氧原子 [Be]2p^3(^{4}S^o)ns ^{5}S$_2^o$ 光谱系列的能级（电离限 [16]：109 837.02 cm^{-1}）

Table 2　Energy levels of the [Be]2p3(^{4}S^o)ns ^{5}S$_2^o$ spectral series in oxygen atoms (ionization limit[16]：109 837.02 cm^{-1})

n	$NIST$[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	$Diff.$/cm^{-1}	δ_{cal}	n	$NIST$[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	$Diff.$/cm^{-1}	δ_{cal}
3	73 768.200	73 768.200	0.000	1.255 740 1	27		109 671.859		1.223 545 9
4	95 476.728	95 476.728	0.000	1.235 634 1	28		109 683.965		1.223 536 2
5	102 116.698	102 116.698	0.000	1.229 842 8	29		109 694.787		1.223 527 5
6	105 019.307	105 019.307	0.000	1.227 381 7	30		109 704.501		1.223 519 7
7	106 545.354	106 545.345	0.009	1.226 107 3	31		109 713.252		1.223 512 6
8	107 446.036	107 446.006	0.030	1.225 362 1	32		109 721.165		1.223 506 2
9	108 021.400	108 021.751	0.351	1.224 888 6	33		109 728.342		1.223 500 5
10	108 412.000	108 412.012	0.012	1.224 569 0	34		109 734.872		1.223 495 2
11		108 688.701		1.224 343 1	35		109 740.831		1.223 490 4
12		108 891.973		1.224 177 6	36		109 746.283		1.223 486 0
13		109 045.681		1.224 052 6	37		109 751.285		1.223 482 0
14		109 164.722		1.223 956 0	38		109 755.884		1.223 478 3
15		109 258.790		1.223 879 8	39		109 760.123		1.223 474 9
16		109 334.411		1.223 818 5	40		109 764.038		1.223 471 7
17		109 396.112		1.223 768 6	41		109 767.661		1.223 468 8
18		109 447.111		1.223 727 3	42		109 771.022		1.223 466 1
19		109 489.747		1.223 692 9	43		109 774.143		1.223 463 6
20		109 525.753		1.223 663 8	44		109 777.049		1.223 461 3
21		109 556.437		1.223 639 0	45		109 779.757		1.223 459 1
22		109 582.797		1.223 617 8	46		109 782.287		1.223 457 1
23		109 605.610		1.223 599 3	47		109 784.652		1.223 455 2
24		109 625.484		1.223 583 3	48		109 786.867		1.223 453 4
25		109 642.904		1.223 569 3	49		109 788.944		1.223 451 7
26		109 658.258		1.223 556 9	50		109 790.895		1.223 450 1

表 3 氧原子 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ 光谱系列的能级 (电离限 [16]：109 837.02 cm^{-1})

Table 3 Energy levels of the [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ spectral series in oxygen atoms (ionization limit[16]: 109 837.02 cm^{-1})

n	*NIST*[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	*Diff.*/cm^{-1}	δ_{cal}	*n*	*NIST*[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	*Diff.*/cm^{-1}	δ_{cal}
3	76 794.978	76 794.978	0.000	1.177 599 9	27	109 673.500	109 672.798	0.702	1.149 944 9
4	96 225.049	96 225.049	0.000	1.160 664 9	28	109 686.200	109 684.803	1.397	1.149 935 8
5	102 411.995	102 411.995	0.000	1.155 603 2	29	109 695.900	109 695.538	0.362	1.149 927 8
6	105 165.232	105 165.232	0.000	1.153 417 6	30	109 705.400	109 705.176	0.224	1.149 920 5
7	106 627.934	106 627.941	0.007	1.152 275 2	31	109 713.700	109 713.862	0.162	1.149 914 0
8	107 497.224	107 497.232	0.008	1.151 602 9	32		109 721.717		1.149 908 1
9	108 056.000	108 055.688	0.312	1.151 173 7	33		109 728.844		1.149 902 7
10	108 436.300	108 435.645	0.655	1.150 883 1	34		109 735.329		1.149 897 8
11	108 705.500	108 705.814	0.314	1.150 677 1	35		109 741.249		1.149 893 4
12	108 906.100	108 904.760	1.340	1.150 525 7	36		109 746.666		1.149 889 3
13	109 056.000	109 055.486	0.514	1.150 411 3	37		109 751.637		1.149 885 6
14	109 171.700	109 172.405	0.705	1.150 322 7	38		109 756.208		1.149 882 2
15	109 265.900	109 264.922	0.978	1.150 252 7	39		109 760.422		1.149 879 0
16	109 341.000	109 339.383	1.617	1.150 196 3	40		109 764.314		1.149 876 1
17	109 402.400	109 400.198	2.202	1.150 150 4	41		109 767.917		1.149 873 4
18	109 454.700	109 450.510	4.190	1.150 112 4	42		109 771.259		1.149 870 8
19	109 499.000	109 492.605	6.395	1.150 080 6	43		109 774.364		1.149 868 5
20	109 533.300	109 528.180	5.120	1.150 053 8	44		109 777.255		1.149 866 3
21	109 562.300	109 558.514	3.786	1.150 030 9	45		109 779.949		1.149 864 3
22	109 589.000	109 584.589	4.411	1.150 011 3	46		109 782.466		1.149 862 4
23	109 610.500	109 607.166	3.334	1.149 994 3	47		109 784.820		1.149 860 7
24	109 630.000	109 626.845	3.155	1.149 979 4	48		109 787.024		1.149 859 0
25	109 647.700	109 644.100	3.600	1.149 966 5	49		109 789.092		1.149 857 5
26	109 661.400	109 659.315	2.085	1.149 955 0	50		109 791.034		1.149 856 0

表 4 氧原子 2p^3(^{4}*S*^{o})*n*d ^{3}D$_1^o$ 光谱系列的能级 (电离限 [16]：109 837.02 cm^{-1})

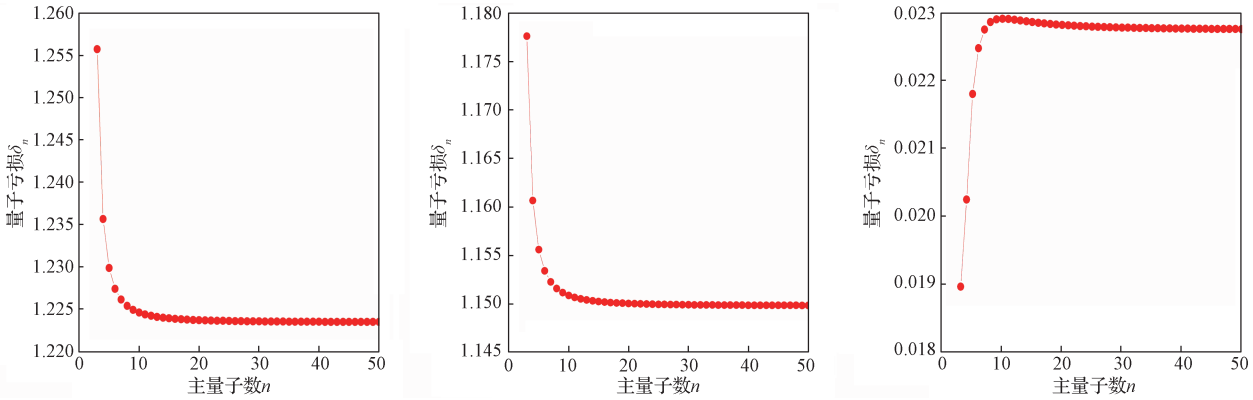
Table 4 Energy levels of the [Be]2p^3(^{4}*S*^{o})*n*d ^{3}D$_1^o$ spectral series in oxygen atoms (ionization limit[16]: 109 837.02 cm^{-1})

n	*NIST*[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	*Diff.*/cm^{-1}	δ_{cal}	*n*	*NIST*[16]/cm^{-1}	T_{cal}/cm^{-1}	*Diff.*/cm^{-1}	δ_{cal}
3	97 488.378	97 488.378	0.000	0.018 961 6	27	109 686.2	109 686.234	0.034	0.022 780 6
4	102 908.489	102 908.489	0.000	0.020 242 7	28	109 695.9	109 696.821	0.921	0.022 777 8
5	105 409.008	105 409.008	0.000	0.021 795 1	29	109 705.4	109 706.330	0.930	0.022 775 2
6	106 765.803	106 765.803	0.000	0.022 467 9	30	109 713.7	109 714.904	1.204	0.022 772 8
7	107 582.777	107 582.859	0.082	0.022 743 9	31		109 722.661		0.022 770 7
8	108 114.000	108 112.536	1.464	0.022 854 4	32		109 729.702		0.022 768 7
9	108 476.700	108 475.319	1.381	0.022 894 1	33		109 736.112		0.022 766 9
10	108 736.100	108 734.603	1.497	0.022 903 0	34		109 741.964		0.022 765 2
11	108 927.200	108 926.312	0.888	0.022 898 5	35		109 747.322		0.022 763 7
12	109 073.300	109 072.040	1.260	0.022 888 6	36		109 752.239		0.022 762 3
13	109 186.300	109 185.395	0.905	0.022 876 8	37		109 756.763		0.022 761 0
14	109 283.000	109 275.302	7.698	0.022 864 9	38		109 760.934		0.022 759 8
15	109 348.900	109 347.809	1.091	0.022 853 6	39		109 764.788		0.022 758 7
16	109 409.500	109 407.132	2.368	0.022 843 3	40		109 768.356		0.022 757 6
17	109 457.600	109 456.284	1.316	0.022 833 9	41		109 771.666		0.022 756 7
18	109 492.900	109 497.464	4.564	0.022 825 6	42		109 774.743		0.022 755 8
19	109 533.200	109 532.307	0.893	0.022 818 1	43		109 777.608		0.022 754 9
20	109 561.500	109 562.050	0.550	0.022 811 4	44		109 780.279		0.022 754 1
21	109 589.300	109 587.641	1.659	0.022 805 4	45		109 782.774		0.022 753 4
22	109 610.500	109 609.819	0.681	0.022 800 1	46		109 785.108		0.022 752 7
23	109 630.000	109 629.165	0.835	0.022 795 3	47		109 787.294		0.022 752 1
24	109 647.700	109 646.141	1.559	0.022 791 1	48		109 789.346		0.022 751 4
25	109 661.400	109 661.120	0.280	0.022 787 2	49		109 791.273		0.022 750 9
26	109 673.500	109 674.402	0.902	0.022 783 7	50		109 793.085		0.022 750 3

分析表 2~4 中氧原子的能级和量子亏损数据可以得知，对于里德堡系列 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$，文献 [16] 中只给出了 $n\leqslant10$ 的能级数据。而其他两个里德堡系列，文献 [16] 中也仅给出了 $n\leqslant31$ 的能级数据。将本研究计算得出的数据与文献 [16] 中给出的数据进行比较，可以得知，[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$ 里德堡系列的计算值与文献 [16] 中给出的值之间的最大偏差值为 0.351 cm^{-1}，然而 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ 和 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*d ^{3}D$_1^o$ 两个里德堡系列的最大偏差值分别为 6.395 cm^{-1} 和 7.698 cm^{-1}。

从表 2~4 中还可以得出，本文计算值与文献给出的结果间的偏差值随着 *n* 的增大没有出现发散的情况，且 3 个里德堡系列结果的最大偏差值分别发生在 *n*=9、*n*=19 和 *n*=14 处。这一结果表明，本文的计算结果具有很高的可靠性。

图 2 给出了 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$、[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ 和 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*d ^{3}D$_1^o$3 个里德堡系列的量子亏损随主量子数的变化关系。



a）[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$　　b）[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$　　c）[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*d ^{3}D$_1^o$

图 2　里德堡系列量子亏损与主量子数的关系曲线

Fig. 2　Relationship curves between Rydberg series quantum defect and principal quantum number

由图 2 所示关系曲线可知，[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$、[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ 两个里德堡系列的量子亏损值比 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*d ^{3}D$_1^o$ 里德堡系列的量子亏损值大，这一结果表明，s 轨道电子渗透到原子实的程度要大于 d 轨道电子的。此外，里德堡系列 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{5}S$_2^o$、[Be]2p^3(^{4}S^o)*n*s ^{3}S$_1^o$ 的量子亏损值随着主量子数的增大而减小，且最后趋于稳定，而 [Be]2p^3(^{4}S^o)*n*d ^{3}D$_1^o$ 里德堡系列的量子亏损值随着主量子数的增大而先增大后减小，最后趋于稳定。这一结果表明，s 轨道电子和 d 轨道电子渗透到原子实的趋势相反，即主量子数越大，s 轨道电子的渗透程度越小，而 d 轨道电子的渗透程度越大。这主要是因为 s 轨道的电子云具有球对称性，随着主量子数的增加，s 电子的轨道越大，因而贯穿到原子实的概率越弱，量子亏损值越小。d 轨道的电子云较为复杂，有多个节点，随着主量子数的增加，轨道变得更加扁平，贯穿到原子实中的概率越大，量子亏损值越大。

3　结论

本研究利用 WBEPM 理论，通过编写相应的程序代码，完成了对氧原子里德堡系列的能级和量子亏损值的计算。

1）本研究的计算结果与已有实验数据间的吻合度较高，相差均不大于 10 cm^{-1}，从而验证了本文计算数据方法的可靠性。

2）本文给出了很多文献中尚未给出的氧原子的能级数据，这为光谱实验工作者提供了必要的数据参考依据。

3）从计算得到的量子亏损数据可以看出，s 轨道电子与 d 轨道电子渗透原子实的趋势随主量子数的增加呈现出相反的变化规律。即主量子数越大，s 轨道电子的渗透程度越小，而 d 轨道的渗透程度越大。

4）WBEPM 方法的物理图像清晰，可以高精度地计算高 *n* 里德堡原子体系的能级，并且不受电子数的限制，在研究高里德堡态原子结构性质时展现出了较大的优越性。

本研究不仅在原子结构理论上深化了对氧原子高激发态的认识，也为光谱实验、天体物理模型以及新兴的量子技术等提供了重要的基础数据与可靠的计算方法。

参考文献：

[1]　GNEDIN Y N，MIHAJLOV A A，IGNJATOVIĆ L M，

et al. Rydberg Atoms in Astrophysics[J]. New Astronomy Reviews，2009，53(7/8/9/10)：259−265.

[2] SRAKAEW S，WECKESSER P，HOLLERITH S，et al. A Subwavelength Atomic Array Switched by a Single Rydberg Atom[J]. Nature Physics，2024，19：714−719.

[3] LIANG X H，YUE Z P，CHAO Y X，et al. Observation of Anomalous Information Scrambling in a Rydberg Atom Array[J]. Physics Review Letters，2025，135：050201.

[4] BROWAEYS A，LAHAYE T. Many-Body Physics with Individually Controlled Rydberg Atoms[J]. Nature Physics，2020，16(2)：132−142.

[5] VAILLANT C L，JONES M A，POTVLIEGE R M. Multichannel Quantum Defect Theory of Strontium Bound Rydberg States[J]. Journal of Physics B：Atomic，Molecular and Optical Physics，2014，47(15)：155001.

[6] CHARRO E，MARTÍN I. Relativistic Quantum Defect Orbital Study of Forbidden Transitions in Co^{16+}[J]. Astronomy & Astrophysics，2001，376(3)：1106−1112.

[7] WANG Z W，HAN Q J，HU M H，et al. Energy and Oscillator Strength of V^{20+} Ion[J]. Frontiers of Physics in China，2006，1(1)：102−107.

[8] FATIMA M，JAMAL A，SIDDIQUI I. Quantum Defect and Rydberg Energy Level Calculations for ^{85}Rb and ^{87}Rb by Weakest Bound Electron Potential Model[J]. Chinese Journal of Physics，2024，89：707−720.

[9] ZHOU C，LIANG L，ZHANG L. Calculations of Rydberg Energy Levels for Ni XVIII Using the Weakest Bound Electron Potential Model Theory[J]. Chinese Optics Letters，2007，5：438.

[10] 黄时中，邓泽森，张 勇 . 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)：728−732.
HUANG Shizhong，DENG Zesen，ZHANG Yong. Calculation of Multipole Polarizability and Dispersion Coefficients for Helium by WBEPM and Variationally Stable Procedure[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics，2015，32(5)：728−732.

[11] CHERNOV V E，CIVIŠ S，MANAKOV N L，et al. Modified Quantum Defect Theory：Application to Analysis of High-Resolution Fourier Transform Spectra of Neutral Oxygen[J]. The European Physical Journal D，2024，78(46)：00837.

[12] BAUTISTA M A，BERGEMANN M，GALLEGO H C，et al. Atomic Radiative Data for Oxygen and Nitrogen for Solar Photospheric Studies[J]. Astronomy & Astrophysics，2022，665：A18.

[13] PAN R X，ZHANG K X，CHEN J F，et al. EUV Photoabsorption Investigations of Ti^{2+}，Ti^{3+} and Ti^{4+} Using Dual Laser Plasma Technique[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer，2025，347：109672.

[14] ZHENG N W，WANG T，MA D X，et al. Weakest Bound Electron Potential Model Theory[J]. International Journal of Quantum Chemistry，2004，98(3)：281−290.

[15] MARTIN W C. Series Formulas for the Spectrum of Atomic Sodium (Na I)[J]. Journal of the Optical Society of America，1980，70(7)：784.

[16] KRAMIDA A，RALCHENKO J Y. Reader and NIST ASD Team (2022)[C/OL]. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10). (2023−04−17). https://physics.nist.gov/asd.

(责任编辑：廖友媛)