# 原子序数为 $120 \leq Z \leq 170$ 的超重元素基态：对电子关联、Breit相互作用和量子电动力学效应的系统研究

I. M. Savelyev,[1] M. Y. Kaygorodov,[1] Y. S. Kozhedub,[1] A. V. Malyshev,[1] I. I. Tupitsyn,[1] 和 V. M. Shabaev[1,2]
圣彼得堡国立大学物理系，俄罗斯圣彼得堡 *Universitetskaya nab. 7/9*号，邮编*199034*[2]库尔恰托夫研究所国家研究中心 *Konstantinov* 彼得堡核物理研究所，俄罗斯列宁格勒州加特契纳，邮编*188300*(日期：2023年8月23日)

arXiv:2301.01740v1 [physics.atom-ph] 4 Jan 2023

对于原子序数为 $120 \leq Z \leq 170$ 的超重元素，基态组态的概念正受到重新审视。为此，采用 Dirac-Fock 方法和组态相互作用方法，对低能级的电子结构进行相对论计算。计算中考虑了 Breit相互作用的磁性部分和迟滞部分，以及量子电动力学效应。本文分析了相对论效应、量子电动力学效应和电子-电子关联效应对基态确定的影响。

## I. 引言

门捷列夫元素周期表是一种经经验支持的体系，它通过将元素的物理和化学性质与原子轨道依次占据的规律联系起来，对元素进行分类。随着原子序数 $Z$ 增大，相对论效应显著增强。与较轻的同族元素相比，这些效应会显著改变元素的各种性质。相对论效应的一个经典例子是金的黄色 [1–3]。在元素周期表第七周期的超重元素（SHE）区域，相对论效应与电子-电子关联效应的相互作用导致了偏离元素周期律的趋势 [4–8]。其中一些偏离已得到实验验证，例如铹（Lr，$Z = 103$）与较轻的同族元素镥（Lu，$Z = 71$）具有不同的基态组态 [9], ；另一些则仅有理论预测，例如氪（Og，$Z = 118$）具有正电子亲和能 [10–14]。第八周期超重元素（ $Z > 118$）是否符合元素周期表并遵循元素周期律，仍是一个引人关注的开放问题。例如，这一周期将引入此前从未出现过的 5g 壳层，其相应的电子结构特征无疑必须体现在元素周期表可能的扩展中。此外，迄今尚未系统研究量子电动力学（QED）效应对超重元素基态的影响。

文献 [15], （另请参阅近期的综述 [16]）综述了该问题的现状，并基于狄拉克–福克（DF）计算（亦称相对论哈特里–福克计算），将元素周期表扩展至 $Z = 172$ 。这一上限取决于这样一个事实：当 Z 值更高时，最低（1s）狄拉克能级会“沉入”负能连续谱，前提是采用合理的核电荷分布模型 [17–28]。

描述超重元素性质的关键在于确定其基态组态。20世纪70年代，人们首次尝试将超重元素的研究推进到第七周期之外，并推测其化学和物理性质 [29–34]。多年来，这一问题一直采用各种单组态方法进行研究 [35, 36]。人们很快发现，在许多情况下，各种组态的总能量彼此相差甚微，因此有必要进行更复杂的组态相互作用计算。考虑关联效应可能会改变基态组态。

一些第八周期的超重元素采用多组态方法进行了研究 [37–46]。唯一一篇对所有第八周期元素的研究都超越单组态近似的论文是文献 [47]。该文采用多组态狄拉克–福克方法，考虑超重元素中能量相近组态之间的相互作用，其中超重元素具有 $Z \leq 164$。因此，在约50%的情况下，文献 [47] 得到的基态组态与此前狄拉克–福克–斯莱特计算所得结果不同 [34], ；此前的计算未考虑电子–电子关联效应。文献 [47], 仅报告了基态组态，未提供任何能级结构信息。该研究也没有讨论所得结果对关联处理精度的稳定性。

讨论超重元素基态时，还有一些其他问题需要澄清。对于如此复杂、具有大量价壳层的系统，尤其是其中包含 $5g$ 这一壳层的系统，单组态描述是否仍然有效？换言之，似乎可以合理地认为，基态

能级通常无法在不考虑电子关联效应的情况下确定，但原则上能否用单一组态以足够高的精度描述该状态？此前未计入的量子电动力学效应能否改变超重元素的基态？本文旨在基于狄拉克–福克相对论方法和以狄拉克–福克–斯图姆轨道 [48–50] 为基组的组态相互作用方法，研究这些问题。在我们的计算中，为了考察量子电动力学效应对电子结构和基态组态可能产生的影响，我们将这两种方法均与模型量子电动力学算符方法结合使用 [51, 52]；该方法最近已在文献 [53] 中扩展至 $120 \le Z \le 170$ 区域。

本文安排如下。第二节概述所用方法及其主要实现特点。第三节介绍计算过程的数值细节和具体方面。第四节讨论所得结果，并将其与先前的计算进行比较。第五节以简要总结结束全文。

全文均使用原子单位。

## II. 理论方法与途径

在本研究中，为探究超重元素基态，我们采用狄拉克-福克（DF）方法和组态相互作用（CI）方法。我们从不同角度研究这一问题，分别采用单组态和多组态方法。

我们考虑由占据数 $\{q_a\}_{a=1}^{N_s}$ 定义的相对论组态 $K$，其中指标 $a$枚举相对论壳层。对于相对论壳层列表（$n_1 l_1 j_1)^{\,q_1} \ldots (n_{N_s} l_{N_s} j_{N_s})^{\,q_{N_s}}$（$n$ 为主量子数，$l$ 和 $j$ 分别为轨道角动量和总角动量），我们首先在相对论组态平均（RAV）近似下确定 DF 能量；在文献中，这种近似也称为 $jj$-平均近似 [54]。相应的 DF 总能量可形式化地写为

$$E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K) = \frac{1}{N_d} \sum_{\alpha \in K} \langle \alpha | \hat{H}^{\mathrm{DC}} | \alpha \rangle \,, \tag{1}$$

其中，$\alpha \equiv \mathsf{det}_\alpha\{\varphi_i^{\mathrm{DF}}\}$ 是由属于组态 $K$ 的单电子狄拉克-福克轨道 $\varphi_i^{\mathrm{DF}}$ 构造的斯莱特行列式，$N_d$ 是这些行列式的数量，而 $\hat{H}^{\mathrm{DC}} \equiv \hat{H}^{\mathrm{D}} + \hat{V}^{\mathrm{C}}$ 是多电子狄拉克-库仑哈密顿量。在 DF-RAV 近似中，泛函 (1) 中可解析求解的求和等价于对组态 $_\alpha\{\varphi_i^{\mathrm{DF}}\}$ 的相对论项 $\alpha \equiv$ 求和，并计及其多重度 [55, 56]。通过在正交归一条件所施加的显然约束下对式 (1) 求变分，可以导出 DF 方程。随后，通过求解相应的 DF 方程，得到 DF 轨道 $\varphi_i^{\mathrm{DF}}$和能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K)$。我们指出，只有库仑相互作用算符 $V_{\mathrm{C}}$ 被自洽地纳入 DF 方程。

组态 $K$ 的平均能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K)$ 的 Breit相互作用修正采用微扰法计算如下

$$\Delta E^{\mathrm{B}}_{\mathrm{RAV}}(K) = \frac{1}{N_d} \sum_{\alpha \in K} \langle \alpha | \hat{V}^{\mathrm{B}} | \alpha \rangle \,, \tag{2}$$

其中，行列式 $\alpha$ 由 $\varphi_i^{\mathrm{DF}}$构造，$\hat{V}^{\mathrm{B}}$ 为Breit相互作用算符。QED修正采用文献 [51–53]中提出的模型QED算符方法处理。我们还提及一些用于近似考虑多电子系统中量子电动力学效应的替代方法，参见例如文献 [40, 44, 57–62]。关于模型QED算符方法的最新应用和发展，包括分子中量子电动力学效应的计算，参见文献 [63–67]。与Breit相互作用贡献类似，RAV近似下的QED修正通过模型QED算符$\hat{V}^{\mathrm{Q}}$的相对论组态平均期望值计算，

$$\Delta E^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{RAV}}(K) = \frac{1}{N_d} \sum_{\alpha \in K} \langle \alpha | \hat{V}^{\mathrm{Q}} | \alpha \rangle \,. \tag{3}$$

最后，对于组态 $K$，我们考虑包含 Breit修正和量子电动力学效应的平均能量，

$$E^{\mathrm{DCBQ}}_{\mathrm{RAV}}(K) = E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K) + \Delta E^{\mathrm{B}}_{\mathrm{RAV}}(K) + \Delta E^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{RAV}}(K) \,. \tag{4}$$

下文将此方案称为 DCBQ-RAV 方案。

为确定组态 $K$ 的能级结构，可以针对给定的 $J$ 值，利用所构造的能量泛函，尝试求得 $jj$ 耦合项的单组态DF波函数及其对应能量。然而，对于具有复杂能级结构的开壳层系统，仅凭对称性考量，往往无法恰当地选出多电子波函数的线性组合。事实证明，大多数超重元素都有多个开壳层，因此，这种直接方案可能会导致错误的能级结构。在本研究中，组态 $K$ 的能级结构通过组态相互作用方法求得，该方法针对狄拉克–库仑–布雷特（DCB）哈密顿量，并辅以模型QED算符。DCBQ

哈密顿量写作

$$\hat{H}^{\mathrm{DCBQ}} = \Lambda^{+}\left[\hat{H}^{\mathrm{D}} + \hat{V}^{\mathrm{C}} + \hat{V}^{\mathrm{B}} + \hat{V}^{\mathrm{Q}}\right]\Lambda^{+}, \quad (5)$$

其中， $\Lambda^{+}$ 是由 DF-RAV 方程的正能解构成的单电子投影算符的乘积。哈密顿量 (5) 在由单一相对论组态 (SRC) $K$ 产生的所有行列式 $\alpha$ 所张成的空间中诱导出的本征值问题，描述了能级的分裂，

$$\hat{H}^{\mathrm{DCBQ}}\Psi_{\mathrm{SRC}}(K, JM) = E^{\mathrm{DCBQ}}_{\mathrm{SRC}}\Psi_{\mathrm{SRC}}(K, JM), \quad (6)$$

其中， $M$ 表示对 $J$的投影。

然而，对于能量接近的组态，它们之间的强相互作用和混合可能导致能级结构发生变化。为考虑相关效应，我们研究一个更大的 CI 问题，

$$\hat{H}^{\mathrm{DCBQ}}\Psi_{\mathrm{CI}}(JM) = E^{\mathrm{DCBQ}}_{\mathrm{CI}}(J)\Psi_{\mathrm{CI}}(JM), \quad (7)$$

该问题所处的空间由斯莱特行列式张成，这些行列式不仅由组态 $K$ 产生，也由给定列表中的相对论组态产生（详见下一节）。在本文的计算中，采用以狄拉克–福克–斯图姆轨道为基组的 CI 方法（CI-DFS） [48–50]。在 CI 层次上，根据方程 (5)–(7)，通过将相应项纳入狄拉克–库仑哈密顿量，考虑 Breit 和 QED 修正。

最后需要强调的是，本研究的主要目标并非为超重元素的能级结构获得最精确的理论预测，因为对于组态复杂的情形，这本身可能是一项极其复杂的独立任务。相反，我们旨在通过一系列适当的相对论计算，可靠地确定基态能级及其所属的组态。

讨论完这些方法后，下面介绍它们在本研究中的具体应用细节。

### III. 计算细节

本研究中，超重元素能级的所有计算均采用费米模型描述核电荷分布。原子核的均方根半径（单位为 fm）表示为

$$R = \sqrt{\frac{3}{5}}R_{\mathrm{sphere}}, \qquad R_{\mathrm{sphere}} = 1.2A^{1/3}, \quad (8)$$

其中，核子数 $A$ 采用参考文献 [20],中的近似公式

$$A = 0.00733Z^2 + 1.30Z + 63.6. \quad (9)$$

由公式（9）得到的 $A$ 取最接近的整数。核尺寸的这种选取与参考文献 [53]中的选取一致。

超重元素的基态组态先验地 未知。如上一节所述，我们采用三种方案来确定基态组态。第一种方案基于 DF-RAV 方法。通过考察各种组态 $K$，我们将平均能量最低的组态 $K^{*}$ 确定为基态组态，其平均能量为 $E^{\mathrm{DCBQ\ RAV}}(K^{*})$。对于每个 $Z$，我们通过将 $N_e = Z - N_{\mathrm{core}}$ 个价电子分配到价相对论壳层中，构建所有可能作为基态候选的组态列表。芯壳层电子数 $N_{\mathrm{core}}$ 以及价壳层列表列于表 I。根据初步计算，我们将最有可能在基态中占据的壳层视为价壳层。

表 I. 用于生成相对论组态并求解 DF-RAV 方程的相对论壳层列表。“芯壳层”列中缺少下标 $j$ ，表示与非相对论轨道对应的所有相对论轨道均已完全占据。探测组态按照以下规则生成：芯壳层完全占据， $Z - N_{\mathrm{core}}$ 个价电子分布在价壳层中。符号 [Rn] 和 [Og] 分别表示氡原子和氪原子的闭壳层组态。

| $Z$ | 芯壳层 | $N_{\mathrm{core}}$ | 价壳层 |
|---|---|---|---|
| 120 – 121 | [Rn]$5f\,6d\,7s\,7p_{1/2}$ | 114 | $7p_{3/2}\,8s\,8p_{1/2}\,7d_{3/2}$ |
| 122 – 123 | [Og] | 118 | $8s\,8p_{1/2}\,7d_{3/2}\,6f_{5/2}$ |
| 124 – 133 | [氪]$8s$ | 120 | $8p_{1/2}\,6f_{5/2}\,7d_{3/2}\,5g_{7/2}$ |
| 134 – 144 | [氪]$8s\,5g_{7/2}$ | 128 | $8p_{1/2}\,6f_{5/2}\,7d_{3/2}\,5g_{9/2}$ |
| 145 – 146 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g_{7/2}$ | 130 | $6f_{5/2}\,7d_{3/2}\,5g_{9/2}\,9s$ |
| 147 – 155 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g$ | 140 | $6f_{5/2}\,7d_{3/2}\,6f_{7/2}\,9s$ |
| 156 – 160 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g\,6f_{5/2}$ | 146 | $6f_{7/2}\,7d_{3/2}\,9s\,7d_{5/2}$ |
| 161 – 165 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g\,6f$ | 154 | $7d_{3/2}\,7d_{5/2}\,9s\,8p_{3/2}$ |
| 166 – 168 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g\,6f\,7d_{3/2}$ | 158 | $7d_{5/2}\,9s\,8p_{3/2}\,9p_{1/2}$ |
| 169 – 170 | [氪]$8s\,8p_{1/2}\,5g\,6f\,7d$ | 164 | $9s\,8p_{3/2}\,9p_{1/2}\,7f_{5/2}$ |

例如，在表 II 中，对于 $Z$ =125 和 $Z = 140$ 的超重元素，列出了七个具有最低相对论组态平均能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K)$ 的组态 $K$ 。对于每个相对于闭壳层组态 $K$ 给出的组态，其总 DF-RAV 能量以及依次加入 Breit 和 QED 修正后得到的能量，分别列于表 II 的第四、第五和第六列中。组态按照能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}(K)$ 的升序排列，即第一项对应于能量最低的组态。加入修正后组态顺序的相对变化，以符号 $\bigtriangledown$ （向下）和 $\bigtriangleup$ （向上）表示。缺少

这些符号中的一种对应于组 组态在排序列表中的位置未发生变化。

表 II. 使用 DF 方法计算的超重元素在 $Z = 125$ 和 $Z = 140$ 下、对应组态 $K$ 的相对论组态平均能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}$，加入 Breit相互作用修正后为 $+\Delta E^{\mathrm{B}}_{\mathrm{RAV}}$，进一步计入 QED修正后为 $+\Delta E^{\mathrm{Q}}{}_{\mathrm{RAV}}$（原子单位）。组态以闭壳层组态为参照，并按能量 $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}$升序排列。最后两列中的符号 $\bigtriangledown$（向下）和 $\bigtriangleup$（向上）表示组态的排列顺序相对于前一列发生的变化。若没有这些符号，则表示组态的位置未发生变化。特别是，量子电动力学效应不会影响排列顺序。

| $Z$ | 闭壳层 | $K$ | $E^{\mathrm{DF}}_{\mathrm{RAV}}$ | $+\Delta E^{\mathrm{B}}_{\mathrm{RAV}}$ | $+\Delta E^{\mathrm{Q}}{}_{\mathrm{RAV}}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 125 | [氪]$8s^2_{1/2}$ | $8p^1_{1/2}6f^4_{5/2}$ | −64 846.3116 | −64 718.7639 $\bigtriangledown$3 | −64 627.5323 |
| | | $8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}5g^1_{7/2}$ | −64 846.3061 | −64 718.7781 $\bigtriangleup$1 | −64 627.5496 |
| | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$ | −64 846.3033 | −64 718.7718 $\bigtriangleup$1 | −64 627.5421 |
| | | $8p^2_{1/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$ | −64 846.3007 | −64 718.7680 $\bigtriangleup$1 | −64 627.5377 |
| | | $7d^1_{3/2}6f^4_{5/2}$ | −64 846.2769 | −64 718.7300 $\bigtriangledown$1 | −64 627.4988 |
| | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}$ | −64 846.2697 | −64 718.7182 $\bigtriangledown$1 | −64 627.4854 |
| | | $7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^1_{7/2}$ | −64 846.2680 | −64 718.7408 $\bigtriangleup$2 | −64 627.5127 |
| 140 | [氦]$8s^2_{1/2}8p^2_{1/2}5g^8_{7/2}$ | $7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^6_{9/2}$ | −93 548.8504 | −93 320.7516 $\bigtriangledown$1 | −93 179.0799 |
| | | $7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{9/2}$ | −93 548.8479 | −93 320.7539 $\bigtriangleup$1 | −93 179.0837 |
| | | $7d^1_{3/2}6f^4_{5/2}5g^5_{9/2}$ | −93 548.7928 | −93 320.6719 $\bigtriangledown$1 | −93 178.9986 |
| | | $7d^3_{3/2}6f^1_{5/2}5g^6_{9/2}$ | −93 548.7738 | −93 320.6697 $\bigtriangledown$1 | −93 178.9965 |
| | | $6f^4_{5/2}5g^6_{9/2}$ | −93 548.7689 | −93 320.6791 $\bigtriangleup$2 | −93 179.0103 |
| | | $6f^5_{5/2}5g^5_{9/2}$ | −93 548.7559 | −93 320.6398 | −93 178.9679 |
| | | $7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{9/2}$ | −93 548.7488 | −93 320.6229 | −93 178.9480 |

从表 II 所列举的例子可以看出，在 RAV 近似下，Breit相互作用修正可以改变基态组态。对于 $Z = 125$，表 II 表明，仅考虑库仑相互作用时，基态组态为 $8p^1_{1/2}6f^4_{5/2}$。然而，加入根据式 (2) 计算的 Breit相互作用修正后，组态 $8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}5g^1_{7/2}$ 变成了能量最低的组态。其余六种组态的排序也都发生了变化。对于 $Z = 140$ 的超重元素，也会出现类似的组态排序变化。不过，在后一种情况下，某些组态

仍保持原有位置。不考虑 Breit 相互作用时，$Z = 140$ 的基态组态为 $7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^6_{9/2}$；考虑这一修正后，能量最低的组态则为 $7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{9/2}$。在这两个例子中，QED修正都不会改变基态组态，也不会改变整体的组态排序列表。

找到平均能量最低的组态 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{RAV}}(K)$ 后，我们采用 DCBQ-SRC 方法研究其能级结构。为确定基态能级，我们选取 DCBQ-RAV 能量最低的七个组态，并对属于这些组态的每个能级求解 DCBQ-SRC 问题 (6)。具有最低 DCBQ-SRC能量的组态被视为基态组态

在 DCBQ-SRC 方法中，....., 相应的能级即为基态能级。由于对于大多数超重元素而言，若干个选定的 DCBQ-RAV 能量彼此接近，我们需注意，DCBQ-SRC 考量可能会改变基态组态。

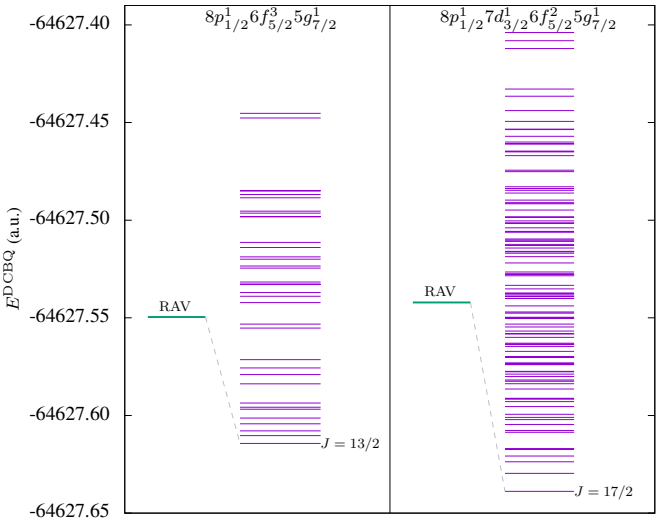


图 1. 计算得到的超重元素中组态 $8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}5g^1_{7/2}$（左）和 $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$（右）的相对论组态平均能量 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{RAV}}$，其中 $Z = 125$，以及对这些平均能量有贡献的所有可能能级。对于最低的 DCBQ-SRC 能级，给出了总角动量量子数 $J$。

图 1 展示了这一点，其中给出了具有 $Z = 125$ 的超重元素的平均能量 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{RAV}}(K)$，分别对应平均能量最低的两个组态：$K = 8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}5g^1_{7/2}$（左）和 $\tilde{K} = 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$（右）。对于每个组态，我们展示了所有对相对论组态平均能量有贡献的能级 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(K, J)$。对于最低的 DCBQ-SRC 能级，还给出了总角动量 $J$。可以看出，组态 $K$ 的平均能量比组态 $\tilde{K}$ 的能量低约 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{RAV}}(\tilde{K}) - E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{RAV}}(K) = 0.0065$ a.u.（另见表 II）。然而，组态 $K$ 的最低能级 $J = 17/2$ 比组态 $\tilde{K}$ 的最低能级 $J = 13/2$ 低约 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(K, 13/2) - E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(\tilde{K}, 17/2) = 0.0245$ a.u. 这种现象并非具有 $Z = 125$ 的超重元素所特有，而是许多其他超重元素中也能观察到的一种普遍趋势的例子。

DCBQ-RAV 和 DCBQ-SRC 方案是单组态方法，因此不会考虑电子关联效应，即不同组态之间的混合。下文讨论电子-电子关联对超重元素最低能级顺序的影响。为此，对于每个 $Z$，我们进行七个参考组态各自独立的 CI-DFS 计算；这些组态是在前一阶段选出的 DCBQ-RAV 能量最低的组态。对于每个组态，我们计算最低的三个能级，并确定它们的总角动量 $J$。能量最低的能级 $E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{CI}}(J)$即为基态能级。在这种方法中，基态能级取决于我们求解 CI 问题的精度。我们通过进行两种不同的 CI-DFS 计算来研究能级顺序对虚轨道数目的依赖性，这两种计算分别称为“DCBQ-CI1”和“DCBQ-CI2”。两种方案均考虑在 DCBQ-RAV 阶段确定的参考组态的单激发（S）和双激发（D）。DCBQ-CI1 方案可视为包含相对较少虚轨道的 CI 问题，而 DCBQ-CI2 方案则纳入了更多虚轨道。表 III 列出了两种 CI 计算中使用的活性轨道和虚轨道。表中未列出的占据轨道均视为冻结芯。活性轨道以及参与最重要组态的虚轨道取自 DF 方程的解，而其他虚轨道则由 DFS 方程的解得到。

表 III. “DCBQ-CI1”和“DCBQ-CI2”计算中使用的活性相对论壳层和虚相对论壳层列表。下标缺失表示，对于给定的 $l$，具有 $l - 1/2$ 和 $l + 1/2$ 的相对论轨道均纳入 CI 问题。

| $Z$ | 活性价壳层 | 虚壳层 | |
|---|---|---|---|
| | | DCBQ-CI1 | DCBQ-CI2 |
| 120 – 121 | $7p_{3/2}8s_{1/2}8p_{1/2}7d_{3/2}$ | $8p_{3/2}7d_{5/2}$ | $9s_{1/2}9p8d6f5g$ |
| 122 – 123 | $8s_{1/2}8p_{1/2}7d_{3/2}6f_{5/2}$ | $8p_{3/2}7d_{5/2}6f_{7/2}$ | $9s_{1/2}9p8d7f5g$ |
| 124 – 133 | $8p_{1/2}6f_{5/2}7d_{3/2}5g_{7/2}$ | $8p_{3/2}7d_{5/2}6f_{7/2}5g_{9/2}$ | $9s_{1/2}9p8d7f6g$ |
| 134 – 144 | $8p_{1/2}6f_{5/2}7d_{3/2}5g_{9/2}$ | $8p_{3/2}6f_{7/2}7d_{5/2}$ | $9s_{1/2}9p_{1/2}8d_{3/2}7f_{5/2}6g_{7/2}$ |
| 145 – 146 | $6f_{5/2}7d_{3/2}5g_{9/2}9s_{1/2}$ | $8p_{3/2}6f_{7/2}7d_{5/2}$ | $10s_{1/2}9p8d7f6g$ |
| 147 – 155 | $6f_{5/2}7d_{3/2}6f_{7/2}9s_{1/2}$ | $8p_{3/2}7d_{5/2}$ | $10s_{1/2}9p8d7f6g$ |
| 156 – 160 | $6f_{7/2}7d_{3/2}9s_{1/2}7d_{5/2}$ | $8p_{3/2}$ | $10s_{1/2}9p8d7f6g$ |
| 161 – 165 | $7d_{3/2}7d_{5/2}9s_{1/2}8p_{3/2}$ | | $10s_{1/2}9p8d7f6g$ |
| 166 – 168 | $7d_{3/2}7d_{5/2}9s_{1/2}8p_{3/2}9p_{1/2}$ | $9p_{3/2}$ | $10s_{1/2}10p8d7f6g$ |
| 169 – 170 | $7d_{5/2}9s_{1/2}8p_{3/2}9p_{1/2}7f_{5/2}$ | $7f_{7/2}9p_{3/2}$ | $10s_{1/2}10p8d8f6g$ |

关联效应可能导致能级结构出现奇异情形。表 IV 给出了一个示例，其中展示了具有 $J = 0$，1、2、3 个最低能级及其相关组态的超重元素（SHE），并列出了 $Z = 168$。可以看出，在 DCBQ-SRC 近似下，当忽略电子-电子关联时，具有 $J = 1$、$E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(J = 1) = -202904.8013$ a.u. 的能级低于具有 $J = 2$、$E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(J = 2) = -202904.7871$ a.u. 和 $J = 0$ 的能级，$E^{\mathrm{DCBQ}}{}_{\mathrm{SRC}}(J = 0) = -202904.7789$ 原子单位。若通过 DCBQ-CI1 方案考虑电子关联，具有 $J = 1$ 的能级会升至具有 $J = 2$ 的能级之上，并高出约 0.025 原子单位。使用 DCBQ-CI2 方案改进电子-电子关联的描述后，具有 $J = 1$的能级再次成为最低能级，而具有 $J = 0$的能级则降至具有 $J = 2$的能级之下。在这种情况下，具有 $J = 0$ 和 $J = 1$ 的能级之间的差约为 0.01 原子单位。这表明，随着

关联处理的改进，基态能级可能发生变化。更重要的是，具有 $J = 0$,1, 2的能级的主导组态并不

彼此重合。因此，可以预期，不仅属于同一组态的能级可能发生互换，涉及其他组态能级的重新排列也可能发生。

表 IV. 对于具有 $Z = 168$ (a.u.) 的超重元素，采用 DCBQ-SRC、DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 方案计算得到的能级 $J = 0$、1、2、3 的最低能级能量 $E^{\mathrm{DCBQ}}(J)$。对于 DCBQ-SRC 值，给出了这些能级的组态。对于 DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 结果，给出了权重至少为 0.05 的组态。

| $J$ | DCBQ-SRC | | DCBQ-CI1 | | DCBQ-CI2 | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $K$ | $E^{\mathrm{DCBQ}}_{\mathrm{SRC}}(K,J)$ | $K$ | $E^{\mathrm{DCBQ}}_{\text{相互作用}}(J)$ 组态 | $K$ | $E^{\mathrm{DCBQ}}_{\text{相互作用}}(J)$ 组态 |
| 0 | $9s^2_{1/2}9p^2_{1/2}$ | $-202904.7789$ | $0.87\cdot 9s^2_{1/2}9p^2_{1/2}+$<br>$0.07\cdot 9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}+$<br>$0.05\cdot 8p^2_{3/2}9p^2_{1/2}$ | $-202904.8206$ | $0.91\cdot 9s^2_{1/2}9p^2_{1/2}$ | $-202904.9561$ |
| 1 | $9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.8013$ | $0.92\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.07\cdot 8p^3_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.8247$ | $0.94\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.9652$ |
| 2 | $9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.7871$ | $0.55\cdot 9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.24\cdot 9s^1_{1/2}8p^1_{3/2}9p^2_{1/2}+$<br>$0.20\cdot 9s^1_{1/2}8p^3_{3/2}$ | $-202904.8491$ | $0.81\cdot 9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.09\cdot 9s^1_{1/2}8p^1_{3/2}9p^2_{1/2}+$<br>$0.07\cdot 9s^1_{1/2}8p^3_{3/2}$ | $-202904.9542$ |
| 3 | $9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.7319$ | $0.99\cdot 9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.7385$ | $0.96\cdot 9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}$ | $-202904.8835$ |

## IV. 结果

首先，我们采用 DCBQ-RAV 方法计算了包含 Breit 相互作用和量子电动力学效应的各组态平均能量。对于范围为 $120 \le Z \le 170$ 的所有超重元素，平均能量最低的组态列于表 V。基态组态以第二列给出的闭壳层组态为参照列出。我们将结果（“DCBQ-RAV”列）与文献 [34]，的结果进行比较，其中计算采用 Dirac-Fock-Slater方法，涵盖至 $Z$ = 173；与文献 [29]，的结果进行比较，其中采用 DF方法，涵盖至 $Z$ = 131；最后，还与文献 [35]，的结果进行比较，其中计算基于相对论密度泛函理论，并考虑了 $121 \le Z \le 131$ 。需要指出的是，在文献 [29] 中，Gaunt相互作用修正以微扰方式计入，而库仑电子-电子相互作用则在密度泛函理论框架内进行自洽处理。此外，由于文献 [29, 35]，使用了非相对论记号，我们在表 V 中保留这些记号，不作任何更改。

在 DCBQ-RAV 近似下，随着 $Z$ 增大，占据规则的总体趋势如下

：对于 $Z = 120$， $8s_{1/2}$ 壳层填满后，电子开始占据 $8p_{1/2}$、 $7d_{3/2}$ 和 $6f_{5/2}$ 壳层。根据我们的计算，$5g_{7/2}$ 壳层中的第一个电子出现在 $Z = 125$。从这个原子序数开始， $5g$ 系列开始。对于 $Z = 126$， $8p_{1/2}$ 壳层成为闭合壳层。随着 $Z$ 进一步增加， $5g_{7/2}$ 和 $5g_{9/2}$ 壳层随后被电子占据。部分占据的 $7d_{3/2}$ 和 $6f_{5/2}$ 壳层仍为价壳层，其占据数变化很小。这一 $5g$占据过程在 $Z = 144$ 时完成，此时 $5g_{7/2}$ 和 $5g_{9/2}$ 壳层已完全占据，而 $7d_{3/2}$ 和 $6f_{5/2}$ 壳层则部分占据。

在两个相对论 $5g$ 壳层都填满后，$6f$ 壳层开始以相当规律的方式被占据：对于 $Z = 148$ 和 $Z = 155$， $6f_{5/2}$ 和 $6f_{7/2}$ 分别被完全占据。对于 $Z = 155$ ， $7d_{3/2}$ 壳层未被占据；对于该区域内的其他 $Z$ ，它仍是部分占据的，直到 $Z = 158$才闭合。最后， $Z = 164$ 的超重元素具有构型 $[\mathrm{Og}]8s^2_{1/2}8p^2_{1/2}5g^8_{7/2}5g^{10}_{9/2}6f^6_{5/2}6f^8_{7/2}7d^4_{3/2}7d^6_{5/2}$ ，所有相对论壳层均被占据。

值得注意的是，在序列 $Z = 120 - 166$ 中， $8p_{3/2}$ 壳层并未填满，这是由于 $8p$ 壳层存在较大的自旋-轨道分裂。DF-RAV 计算

表 V. 使用 DCBQ-RAV 方法评估的原子序数为 $120 \leq Z \leq 170$ 的超重元素基态组态，其中考虑了 Breit相互作用和量子电动力学效应。组态以闭壳层组态为参照列出，闭壳层组态见“闭壳层”列。 [Og] 对应于氮原子的组态。该列后续记录列出了相对论轨道；将这些轨道添加到前面的轨道中，即可得到更重原子的闭壳层组态。本文的结果“DCBQ-RAV”与文献 [29, 34, 35]的结果进行了比较。

| $Z$ | 闭壳层 | DCBQ-RAV | Fricke 和 Soff [34] | Mann 和 Waber [29] | Umemoto 和 Saito [35] |
|---|---|---|---|---|---|
| 120 | [Og] | $8s^2_{1/2}$ | $8s^2_{1/2}$ | $8s^2$ | |
| 121 | $+8s^2_{1/2}$ | $8p^1_{1/2}$ | $8p^1_{1/2}$ | $8p^1$ | $8p^1$ |
| 122 | | $8p^1_{1/2}\ 7d^1_{3/2}$ | $8p^1_{1/2}\ 7d^1_{3/2}$ | $8p^1 7d^1$ | $8p^2$ |
| 123 | | $8p^1_{1/2}\ 7d^1_{3/2}\ 6f^1_{5/2}$ | $8p^1_{1/2}\ 7d^1_{3/2}\ 6f^1_{5/2}$ | $8p^1 7d^1 6f^1$ | $8p^1 7d^1 6f^1$ |
| 124 | | $8p^1_{1/2}\ 6f^3_{5/2}$ | $8p^1_{1/2}\ 6f^3_{5/2}$ | $8p^1 6f^3$ | $8p^2 6f^2$ |
| 125 | | $8p^1_{1/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^1_{7/2}$ | $8p^1_{1/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^1_{7/2}$ | $8p^1 6f^3 5g^1$ | $8p^1 6f^4$ |
| 126 | | $8p^2_{1/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^2_{7/2}$ | $8p^1_{1/2}\ 7d^1_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^2_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^2$ | $8p^1 6f^4 5g^1$ |
| 127 | $+8p^2_{1/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^3_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^3_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^3$ | $8p^2 6f^3 5g^2$ |
| 128 | | $6f^2_{5/2}\ 5g^4_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^4_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^4$ | $8p^2 6f^3 5g^3$ |
| 129 | | $6f^2_{5/2}\ 5g^5_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^5_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^5$ | $8p^2 6f^3 5g^4$ |
| 130 | | $6f^2_{5/2}\ 5g^6_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^6_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^6$ | $8p^2 6f^3 5g^5$ |
| 131 | | $6f^2_{5/2}\ 5g^7_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^7_{7/2}$ | $8p^2 6f^2 5g^7$ | $8p^2 6f^3 5g^6$ |
| 132 | | $7d^1_{3/2}\ 6f^1_{5/2}\ 5g^8_{7/2}$ | $6f^2_{5/2}\ 5g^8_{7/2}$ | | |
| 133 | $+5g^8_{7/2}$ | $6f^3_{5/2}$ | $6f^3_{5/2}$ | | |
| 134 | | $6f^4_{5/2}$ | $6f^4_{5/2}$ | | |
| 135 | | $6f^4_{5/2}\ 5g^1_{9/2}$ | $6f^4_{5/2}\ 5g^1_{9/2}$ | | |
| 136 | | $6f^4_{5/2}\ 5g^2_{9/2}$ | $6f^4_{5/2}\ 5g^2_{9/2}$ | | |
| 137 | | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^3_{9/2}$ | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^3_{9/2}$ | | |
| 138 | | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^4_{9/2}$ | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^4_{9/2}$ | | |
| 139 | | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^5_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^5_{9/2}$ | | |
| 140 | | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^6_{9/2}$ | $7d^1_{3/2}\ 6f^3_{5/2}\ 5g^6_{9/2}$ | | |
| 141 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^7_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^7_{9/2}$ | | |
| 142 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^8_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^8_{9/2}$ | | |
| 143 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^9_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^2_{5/2}\ 5g^9_{9/2}$ | | |
| 144 | | $7d^3_{3/2}\ 6f^1_{5/2}\ 5g^{10}_{9/2}$ | $7d^3_{3/2}\ 6f^1_{5/2}\ 5g^{10}_{9/2}$ | | |
| 145 | $+5g^{10}_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^3_{5/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^3_{5/2}$ | | |
| 146 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^4_{5/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^4_{5/2}$ | | |
| 147 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^5_{5/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^5_{5/2}$ | | |
| 148 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^6_{5/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^6_{5/2}$ | | |
| 149 | $+6f^6_{5/2}$ | $7d^3_{3/2}$ | $7d^3_{3/2}$ | | |
| 150 | | $7d^4_{3/2}$ | $7d^4_{3/2}$ | | |
| 151 | | $7d^3_{3/2}\ 6f^2_{7/2}$ | $7d^3_{3/2}\ 6f^2_{7/2}$ | | |
| 152 | | $7d^3_{3/2}\ 6f^3_{7/2}$ | $7d^3_{3/2}\ 6f^3_{7/2}$ | | |
| 153 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^5_{7/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^5_{7/2}$ | | |
| 154 | | $7d^2_{3/2}\ 6f^6_{7/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^6_{7/2}$ | | |
| 155 | | $9s^1_{1/2}\ 6f^8_{7/2}$ | $7d^2_{3/2}\ 6f^7_{7/2}$ | | |
| 156 | $+6f^8_{7/2}$ | $7d^2_{3/2}$ | $7d^2_{3/2}$ | | |
| 157 | | $7d^3_{3/2}$ | $7d^3_{3/2}$ | | |
| 158 | | $7d^4_{3/2}$ | $7d^4_{3/2}$ | | |
| 159 | $+7d^4_{3/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | | |
| 160 | | $7d^1_{5/2}\ 9s^1_{1/2}$ | $7d^1_{5/2}\ 9s^1_{1/2}$ | | |
| 161 | | $7d^2_{5/2}\ 9s^1_{1/2}$ | $7d^2_{5/2}\ 9s^1_{1/2}$ | | |
| 162 | | $7d^4_{5/2}$ | $7d^4_{5/2}$ | | |
| 163 | | $7d^5_{5/2}$ | $7d^5_{5/2}$ | | |
| 164 | | $7d^6_{5/2}$ | $7d^6_{5/2}$ | | |
| 165 | $+7d^6_{5/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | | |
| 166 | | $9s^2_{1/2}$ | $9s^2_{1/2}$ | | |
| 167 | $+9s^2_{1/2}$ | $8p^1_{3/2}$ | $9p^1_{1/2}$ | | |
| 168 | | $8p^1_{3/2}\ 9p^1_{1/2}$ | $9p^2_{1/2}$ | | |
| 169 | | $8p^1_{3/2}\ 9p^2_{1/2}$ | $8p^1_{3/2}\ 9p^2_{1/2}$ | | |
| 170 | | $8p^2_{3/2}\ 9p^2_{1/2}$ | $8p^2_{3/2}\ 9p^2_{1/2}$ | | |

对于 $Z = 166$ ，结果表明，$8p$ 壳层的自旋-轨道分裂约为 80 eV。 $9s_{1/2}$ 壳层闭合后，首个 $8p_{3/2}$ 电子出现在具有 $Z = 167$ 的超重元素中。然而，对于 $Z = 168$ ，$9p_{1/2}$ 壳层的能量优势高于 $8p_{3/2}$壳层。即使是具有 $Z = 170$ 的最后一个考察超重元素， $8p_{3/2}$ 壳层也未完全占据。我们的 DCBQ-RAV 计算还发现了另一个值得注意的现象：对于 $Z = 155$，价层含有 $9s_{1/2}$ 电子的组态在能量上比含有 $7d_{3/2}$ 个电子的组态更有利，而其相邻元素—— $Z = 154$ 和 $Z = 156$ ——的 $7d_{3/2}$ 壳层中均有两个电子。接下来，在 $Z = 159$–161 这一系列中会出现 $9s_{1/2}$ 电子；最后，从具有 $Z = 165$ 的元素开始， $9s_{1/2}$ 壳层便常规地建立起来。

在整个计算过程中，我们发现基态组态可能会因 Breit 相互作用修正而改变，详见第三节的讨论。这种变化在 $Z = 125$ 和 $Z = 140$ 中可以观察到，而在 $Z$的其他取值下从未出现。关于 QED 修正，我们推断，在所研究的超重元素中，采用 DCBQ-RAV 方法时，QED 修正不会改变基态组态。总的来说，除 $Z = 125$ 和 $Z = 140$外，在所有情况下，我们的 DCBQ-RAV 基态组态均与未考虑 Breit 和 QED 修正所得的 DF-RAV 结果一致。

对于 $Z = 120$ – 131，我们的 DCBQ-RAV 结果与参考文献 [29]的结果完全一致。对于 $121 \leq Z \leq 123$的超重元素，所得基态组态与参考文献 [35] 中相关结果一致，但在 $Z$的其他可用取值下则有所不同。对于所研究的八种超重元素，我们的 DF-RAV 结果与参考文献 [34] 中未考虑 Breit 和 QED 修正的结果不同，具体为 $Z = 125$， 126， 132， 139， 140，155， 167 和 168。对于 $Z = 155$，我们的结果预测， $9s_{1/2}$电子会在 $6f_{7/2}$占据序列中意外跃迁。参考文献 [34]中或许未考虑含有价$9s_{1/2}$ 电子的组态。至于其他差异，它们似乎并无系统性，可能是由于参考文献 [34]采用了 Slater 交换相互作用近似所致。尽管如此，这些偏差的真正原因仍不清楚。

继续分析，我们旨在确定最低能级的组态。我们采用 CI-DFS 方法，使用单组态方案 DCBQ-SRC，以及更为精细的方案 DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2。与 DCBQ-RAV 方法相同，这些方案也纳入了 Breit 和 QED 修正，但采用的是非微扰方式。CI 计算的详细说明见第三节。

表 VI 列出了在三种所考察的 CI 方案下，$120 \leq Z \leq 170$ 超重元素中 DCBQ 能量最低的能级。此外，还列出了这些能级的量子数 $J$。对于 DCBQ-SRC 结果，给出了基态能级所属的组态。DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 的结果包含电子-电子关联效应。对于这些数据，我们列出对基态能级贡献权重至少为 0.05 的组态。与前表的结构一致，组态均以闭壳层组态为参照给出。所得结果与先前的多组态 Dirac-Fock 计算结果 [47]进行了比较。沿用文献 [47]中的非相对论记号。

比较表V和表VI可见，采用SRC方法得到的基态能级组态与RAV基态组态在近一半的情况下不同（为方便起见， $Z$ 相应数值以粗体标出）。这一结果表明超重元素的能级结构十分复杂，第三节中对 $Z = 125$ 进行了详细讨论。

接下来的讨论分为两部分。首先，我们归纳多组态计算结果的一般趋势，并将其与单组态计算结果进行比较。需要指出的是，DCBQ-CI1和DCBQ-CI2的结果总体上差异不大。因此，在这一部分中，我们通常省略下标“1”或“2”，并将多组态计算统称为“DCBQ-CI”。第二部分中，我们比较采用组态相互作用方法得到的CI1和CI2结果。

正如 DCBQ-RAV 方案所预测的那样，我们的多组态 DCBQ-CI 结果检测到，在 $Z = 125$ 的超重元素基态中首次出现了 $5g$ 电子。然而，与 DCBQ-RAV 结果不同，DCBQ-CI 方案预测，对于 $Z = 145$ ， $5g$壳层变为闭合，而不是 $Z = 144$。在 $Z = 125$–132 的范围内，多组态计算表明，在所有八种情况下，所得基态能级的主导组态都不同于 DCBQ-RAV 方法所得的组态。此外，随着 $5g$壳层逐渐被占据，在 $Z = 125$–145 范围内的一些超重元素基态中会发生组态混合。在所考虑的大多数情况下，主导组态的权重处于 0.80 – 0.90 的范围内。具有不同占据数的 $8p_{1/2}$、 $7d_{3/2}$、 $6f_{5/2}$ 和 $5g_{7/2,\ 9/2}$ 壳层组态会发生混合。DCBQ-CI 方案表明，从 $Z = 130$ 开始，基态能级的主导组态中 $8p_{1/2}$ 壳层完全占据。然而，具有部分占据 $8p_{1/2}$ 壳层的组态也对这些能级有所贡献（权重为

约 0.05 或更高），最高约至$Z \approx 135-137$。

在范围 $Z$ =147 – 151 内，也会出现部分占据的 $7d_{3/2}$ 和 $6f_{5/2}$ 壳层构型的混合。从 $Z = 152$ 的超重元素开始，基态的情况变得更加清晰，此时 $6f_{5/2}$ 壳层已完全占据。直到 $Z = 165$，主导组态的权重大于 0.90，而且在大多数情况下，基态能级的主导组态与采用 DCBQ-RAV 方法得到的基态组态一致。特别是，超重元素 $Z = 164$ 的所有相对论壳层均闭合，其基态组态也得到了更精细方法的验证。对于超重元素 $Z = 168$ 和 $Z = 169$，在 DCBQ-CI1 方案下，基态能级的主导组态区分度较低。例如，$Z = 168$ 的主导组态的 DCBQ-CI1 权重仅为 0.55；即使对于具有未闭合 $5g_{7/2}$ 和 $5g_{9/2}$ 壳层的超重元素，也未出现这种情况。然而，增加活性轨道的数量可以改善这一状况；对于 $Z = 168$, DCBQ-CI2 方案得到的主导组态权重为 0.92。这是由于能级发生了互换，详见第三节中的相关讨论。

我们在多组态计算中得到的总体趋势如下。首先，在约 80% 的所研究情形中，DCBQ-SRC 方法下能级最低的组态，是 DCBQ-CI 方法下基态能级的主导组态。其次，在约 75% 的情形中，采用 DCBQ-SRC 方案且不考虑电子关联得到的基态能级，与通过 DCBQ-CI 方法得到的基态能级一致。偏差主要集中在 $Z = 131-138$ 范围内，此时$5g_{7/2}$ 和 $5g_{9/2}$ 壳层部分占据，且多个组态之间存在强相互作用。从 DCBQ-SRC 方法转为 DCBQ-CI 方法时，主导组态和基态能级同时发生变化的情况，例如出现在 $Z = 131$。在这种情况下，第一种方案给出的组态 $K_{\mathrm{SRC}} = 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}$的 $J_{\mathrm{SRC}} = 25/2$，而第二种方案则预测最低能级为 $J_{\mathrm{CI}} = 21/2$，其主导组态为 $K_{\mathrm{CI}} = 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}$，权重约为 $0.82-0.85$。

现在我们来对比两种 DCBQ-CI 方案的结果。与 DCBQ-CI1 数据相比，

从表 VII 可以看出，一些超重元素的基态能级与能级之间有明显的分离——

采用 DCBQ-CI2 方法对电子间相关进行更精确的处理后，51 种情况中有 4 种的基态能级发生了变化。在这 4 种情况中，有 3 种的基态能级主导组态也发生了变化。这些需要特别关注的超重元素，其 $Z = 130$，137，143 和 168。举例来说，对于 $Z = 130$，在 DCBQ-SRC 和 DCBQ-CI1 方案中，均预测组态 $K = 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2}$ 的能级 $J = 14$ 为基态能级：$K_{\mathrm{SRC}} = K_{\mathrm{CI1}} = K$。然而，采用 DCBQ-CI2 方案评估的电子相关效应改变了基态能级，使其变为 $J = 12$，其主导组态为$K_{\mathrm{CI2}} = 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2} \neq K$。

我们将 DCBQ-CI2 的结果与文献 [47] 中唯一可用的系统性多组态计算进行比较；该计算也考虑了 Breit相互作用。由于该文未给出用于表征基态能级的量子数 $J$，我们只能比较组态。我们发现，对于 $Z = 123$–128、$Z = 130$、$Z = 136$–137、$Z = 143$–144、$Z = 152$–156 以及 $Z = 163$ 的超重元素，其基态所含组态存在不一致。由于文献 [47] 缺少计算细节，因此难以找出这种差异可能的原因。

从 DCBQ-CI1 计算转向 DCBQ-CI2 计算时，基态能级发生了变化，且结果与此前的结果存在偏差，这引出了以下问题：假设进行规模更大的 CI 计算，能否改变所得到的基态，就像 DCBQ-CI2 方案相较于 DCBQ-CI1 改变了基态一样？只有通过相应的大规模 CI 计算，才能全面回答这一问题。不过，为了了解哪些情况下关联效应可能改变基态能级的主导组态，我们考察了两种 DCBQ-CI 计算中基态能级与属于不同主导组态的最近能级之间的能量差的变化。此项研究有助于确定基态能级在某种意义上是否与其他组态的能级相隔离，以及电子关联是否会破坏这种隔离。表 VII 列出了相应差值的绝对值。表 VII 未列出 $Z = 120$ 对应的超重元素，因为它具有基态组态 $K^* = [\mathrm{Og}]8s^2_{1/2}$，对此并无疑义。

其他组态的能级几乎不受相关处理方案的影响。例如，对于 $Z = 121$，DCBQ-

表 VII. 对于范围为$121 \leq Z \leq 170$ 的超重元素，主导组态 $K^*$的基态能级与属于不同于 $K^*$ 的主导组态的最近激发能级之间能量差的绝对值（原子单位）。结果分别针对 DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 方案给出。

| $Z$ | CI1 | CI2 | $Z$ | CI1 | CI2 | $Z$ | CI1 | CI2 | $Z$ | CI1 | CI2 | $Z$ | CI1 | CI2 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 121 | 0.0399 | 0.0378 | 131 | 0.0047 | 0.0069 | 141 | 0.0195 | 0.0106 | 151 | 0.0176 | 0.0114 | 161 | 0.0103 | 0.0059 |
| 122 | 0.0127 | 0.0107 | 132 | 0.0083 | 0.0118 | 142 | 0.0143 | 0.0046 | 152 | 0.0059 | 0.0122 | 162 | 0.0094 | 0.0016 |
| 123 | 0.0299 | 0.0351 | 133 | 0.0254 | 0.0204 | 143 | 0.0015 | 0.0116 | 153 | 0.0062 | 0.0129 | 163 | 0.0111 | 0.0176 |
| 124 | 0.0050 | 0.0046 | 134 | 0.0313 | 0.0270 | 144 | 0.0013 | 0.0129 | 154 | 0.0107 | 0.0008 | 164 | 0.0492 | 0.0542 |
| 125 | 0.0062 | 0.0057 | 135 | 0.0165 | 0.0125 | 145 | 0.0539 | 0.0376 | 155 | 0.0108 | 0.0257 | 165 | 0.0424 | 0.0443 |
| 126 | 0.0106 | 0.0126 | 136 | 0.0062 | 0.0095 | 146 | 0.0352 | 0.0273 | 156 | 0.0136 | 0.0110 | 166 | 0.0153 | 0.0305 |
| 127 | 0.0070 | 0.0089 | 137 | 0.0011 | 0.0043 | 147 | 0.0398 | 0.0349 | 157 | 0.0208 | 0.0212 | 167 | 0.0022 | 0.0096 |
| 128 | 0.0116 | 0.0123 | 138 | 0.0248 | 0.0303 | 148 | 0.0715 | 0.0760 | 158 | 0.0529 | 0.0555 | 168 | 0.0244 | 0.0091 |
| 129 | 0.0071 | 0.0034 | 139 | 0.0370 | 0.0322 | 149 | 0.0583 | 0.0568 | 159 | 0.0568 | 0.0581 | 169 | 0.0066 | 0.0087 |
| 130 | 0.0022 | 0.0009 | 140 | 0.0237 | 0.0088 | 150 | 0.0295 | 0.0300 | 160 | 0.0308 | 0.0285 | 170 | 0.0287 | 0.0324 |

CI1 和 DCBQ-CI2 方案中的能级间隔分别为 0.0399 a.u. 和 0.0378 a.u. 在其他情况下，随着关联处理的改进，基态能级与其他组态能级之间的间隔会增大。因此，对于 $Z = 155$，该间隔从 DCBQ-CI1 方案中的 0.0108 a.u. 增至 DCBQ-CI2 方案中的 0.0257 a.u. 尽管如此，仍难以为所有待研究体系制定可靠的标准，以判断随着组态空间增大，对基态能级有贡献的主导组态是否发生变化。从这一角度来看，最值得关注的超重元素是在 DCBQ-CI2 方案中所考察能级之间的间隔很小（小于数千分之一 a.u.）的那些元素。此外，我们也将能级间隔在 DCBQ-CI2 方案中相较于 DCBQ-CI1 结果显著减小的情况纳入这一类别。通过分析表 VII 中的数据，我们认为，$Z = 129, 130, 137, 140, 142, 154, 161, 162, 168$ 和 169 号超重元素的基态能级可能具有不同于 DCBQ-CI2 方案所得结果的主导组态。这些元素需要通过更精细的电子关联计算加以研究。

## V. 结论

在本文的研究范围内，我们对范围为 $120 \leq Z \leq 170$ 的超重元素基态进行了广泛的相对论研究。计算中严格考虑了Breit相互作用，并采用模型量子电动力学算符方法 [51–53] 考虑量子电动力学效应。首先，利用狄拉克–福克方法，在相对论组态平均近似下确定基态组态。据推断，量子电动力学效应无法改变基态组态，这与Breit相互作用不同。

为确定组态的能级结构，我们采用基于狄拉克–福克–斯图姆轨道的组态相互作用方法求得基态能级。我们研究了超重元素中轨道占据顺序的一般趋势。结果表明，尽管所研究超重元素的电子结构复杂，其基态能级仍具有明确的主导组态，权重超过 0.85。最后，我们证明电子关联效应能够改变基态能级的主导组态。对于某些超重元素，需要进行大规模计算，才能更可靠地确定基态以及低能级结构。尽管如此，本研究通过多组态方法得到的超重元素基态组态，可作为准确计算这些元素各类原子性质的坚实基础，也可用于考察电子-电子关联、QED 和相对论效应对元素周期律的影响。

## VI. 致谢

感谢 Yu. Ts. Oganessian 富有启发性的讨论。我们也衷心感谢与 E. Eliav、V. Pershina 和 A. V. Titov 的宝贵交流。本研究得到俄罗斯联邦科学与高等教育部资助，资助编号 075-10-2020-117。

[1] P. Pyykkö 和 J. P. Desclaux, 《化学研究纪事》12, 276 (1978)。[2] P. Pyykkö, 《化学评论》88, 563 (1988)。[3] P. Pyykkö, 《化学评论》112, 371 (2012)。[4]Y. T. Oganessian 和 V. K. Utyonkov, 《物理学进展报告》78, 036301 (2015)。[5]Y. T. Oganessian、A. Sobiczewski 和 G. M. Ter-Akopian, 《物理学文稿》92, 023003 (2017)。[6] V. Pershina, 《核物理 A》944, 578 (2015)。[7] V. Pershina, 《放射化学学报》107, 833 (2019)。[8] S. A. Giuliani、Z. Matheson、W. Nazarewicz、E. Olsen、P.-G. Reinhard、J. Sadhukhan、B. Schuetrumpf、N. Schunck 和 P. Schwerdtfeger, 《现代物理学评论》91, 011001 (2019)。[9] T. K. Sato、M. Asai、A. Borschevsky、T. Stora、N. Sato、Y. Kaneya、K. Tsukada、C. E. Düllmann、K. Eberhardt、E. Eliav、S. Ichikawa、U. Kaldor、J. V. Kratz、S. Miyashita、Y. Nagame、K. Ooe、A. Osa、D. Renisch、J. Runke、M. Schädel、P. Thörle-Pospiech、A. Toyoshima 和 N. Trautmann, 《自然》520, 209 (2015)。[10] E. Eliav、U. Kaldor、Y. Ishikawa 和 P. Pyykkö, 《物理评论快报》77, 5350 (1996)。[11] I. Goidenko、L. Labzowsky、E. Eliav、U. Kaldor 和 P. Pyykkö, 《物理评论 A》67, 020102 (2003)。[12] B. G. C. Lackenby、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum, 《物理评论 A》98, 042512 (2018)。[13] Y. Guo、L. F. Pašteka、E. Eliav 和 A. Borschevsky, 《量子化学进展》83, 107 (2021)。[14] M. Y. Kaygorodov、L. V. Skripnikov、I. I. Tupitsyn、E. Eliav、Y. S. Kozhedub、A. V. Malyshev、A. V. Oleynichenko、V. M. Shabaev、A. V. Titov 和 A. V. Zaitsevskii, 《物理评论 A》104, 012819 (2021)。[15] P. Pyykkö, 《物理化学化学物理》13, 161 (2011)。[16] O. R. Smits、P. Indelicato、W. Nazarewicz、M. Piibeleht 和 P. Schwerdtfeger，hal-03884148 (2022)。[17] I. Pomeranchuk 和 J. Smorodinsky, 《苏联物理学杂志》9, 97 (1945)。[18] V. Voronkov 和 N. Kolesnikov, 《实验与理论物理学杂志》39, 189 (1961), [《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》12, 136 (1961)]。[19] S. S. Gershtein 和 Y. B. Zel'dovich, 《实验与理论物理学杂志》57, 654 (1969), [《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》30, 358 (1970)]; 《新物理学通讯》1, 835 (1969)。[20] W. Pieper 和 W. Greiner, 《物理学杂志》218, 327 (1969)。[21] Y. B. Zel'dovich 和 V. S. Popov, 《物理科学进展》**105**, 403 1971 [ **14**, 673 1972 ] ( ), 《苏联物理学进展》( )。[22] W. Greiner、B. Müller 和 J. Rafelski, 《强场量子电动力学》，第 1 版，理论与数学物理（施普林格，柏林，海德堡，1985）。[23] V. S. Popov, 《核物理学》64, 421 (2001), [《原子核物理学》64, 367 (2001)]。[24] S. I. Godunov、B. Machet 和 M. I. Vysotsky, 《欧洲物理学杂志 C》77, 782 (2017)。[25]J. Rafelski、J. Kirsch、B. Müller、J. Reinhardt 和 W. Greiner, 《用重离子探测量子电动力学真空》（施普林格，Cham，2017年），第211–251页。[26] R. V. Popov、V. M. Shabaev、D. A. Telnov、I. I. Tupitsyn、I. A. Maltsev、Y. S. Kozhedub、A. I. Bondarev、N. V. Kozin、X. Ma、G. Plunien、T. Stöhlker、D. A. Tumakov 和 V. A. Zaytsev, 《物理评论D辑》102，076005（2020年）。[27] D. N. Voskresensky, 《宇宙》7，104（2021年）。[28] A. Krasnov 和 K. Sveshnikov, 《现代物理快报A辑》37，2250136（2022年）。[29] J. B. Mann 和 J. T. Waber, 《化学物理学杂志》53，2397（1970年）。[30] C. Lu、T. Carlson、F. Malik、T. Tucker 和 C. Nestor, 《原子数据与核数据表》3，1（1971年）。[31] B. Fricke、W. Greiner 和 J. T. Waber, 《理论化学纪事》21，235（1971年）。[32] B. Fricke 和 J. T. Waber, 《化学物理学杂志》57，371（1972年）。[33] J. Desclaux, 《原子数据与核数据表》12，311（1973年）。[34] B. Fricke 和 G. Soff, 《原子数据与核数据表》19，83（1977年）。[35] K. Umemoto 和 S. Saito, 《日本物理学会志》65，3175（1996年）。[36] Z. Zhou、J. Kas、J. Rehr 和 W. Ermler, 《原子数据与核数据表》114，262（2017年）。[37] E. Eliav、S. Shmulyian、U. Kaldor 和 Y. Ishikawa, 《化学物理学杂志》109，3954（1998年）。[38] E. Eliav、A. Landau、Y. Ishikawa 和 U. Kaldor, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》35，1693（2002年）。[39] I. S. Lim、P. Schwerdtfeger、B. Metz 和 H. Stoll, 《化学物理学杂志》122，104103（2005年）。[40] P. Indelicato、J. P. Santos、S. Boucard 和 J.-P. Desclaux, 《欧洲物理学杂志D辑》45，155（2007年）。[41] P. Indelicato、J. Bieroń 和 P. Jönsson, 《理论化学纪事》129，495（2011年）。[42] L. V. Skripnikov、N. S. Mosyagin 和 A. V. Titov, 《化学物理快报》555，79（2013年）。[43]A. Borschevsky、V. Pershina、E. Eliav 和 U. Kaldor, 《化学物理学杂志》138，124302（2013年）。[44] J. S. M. Ginges 和 J. C. Berengut, 《物理评论 A》93，052509（2016年）；《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》49，095001（2016年）。[45] A. V. Zaitsevskii、Y. A. Demidov、N. S. Mosyagin、L. V. Skripnikov 和 A. V. Titov, 《辐射应用》1，132（2016年）。[46] I. I. Tupitsyn、A. V. Malyshev、D. A. Glazov、M. Y. Kaygorodov、Y. S. Kozhedub、I. M. Savelyev 和 V. M. Shabaev, 《光学与光谱学》129，841（2021年），[《光学与光谱学》129，1038（2021年）]。[47] V. I. Nefedov、M. B. Trzhaskovskaya 和 V. G. Yarzhemskii, 《化学物理学报告》408，149（2006年）。[48] I. I. Tupitsyn、V. M. Shabaev、J. R. Crespo López-Urrutia、I. Draganić、R. Soria Orts 和 J. Ullrich, 《物理评论 A》68，022511（2003年）。

[49]I. I. Tupitsyn、A. V. Volotka、D. A. Glazov、V. M. Shabaev、G. Plunien、J. R. Crespo López-Urrutia、A. Lapierre 和 J. Ullrich，《物理评论 A》72，062503（2005年）。[50] I. I. Tupitsyn、N. A. Zubova、V. M. Shabaev、G. Plunien 和 T. Stöhlker，《物理评论 A》98，022517（2018年）。[51] V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn 和 V. A. Yerokhin，《物理评论 A》88，012513（2013年）。[52] V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn 和 V. A. Yerokhin，《计算机物理学通讯》189，175（2015年）；223，69（2018年）。[53] A. V. Malyshev、D. A. Glazov、V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn、V. A. Yerokhin 和 V. A. Zaytsev，《物理评论 A》106，012806（2022年）。[54] I. Lindgren 和 A. Rosen，《原子物理案例研究》IV 4，93（1975年）。[55] I. P. Grant，《伦敦皇家学会会刊A辑：数学与物理科学》262，555（1961年）。[56] I. Grant，《物理学进展》19，747（1970年）。[57] P. Indelicato 和 J. P. Desclaux，《物理评论 A》42，5139（1990年）。[58] P. Pyykkö 和 L.-B. Zhao，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》36，1469（2003年）。[59] I. Draganić、J. R. Crespo López-Urrutia、R. DuBois、S. Fritzsche、V. M. Shabaev、R. S. Orts、I. I. Tupitsyn、Y. Zou 和 J. Ullrich，《物理评论快报》91，183001（2003年）。[60] V. V. Flambaum 和 J. S. M. Ginges，《物理评论 A》72，052115（2005年）。[61] C. Thierfelder 和 P. Schwerdtfeger，《物理评论 A》82，062503（2010年）。[62] I. I. Tupitsyn 和 E. V. Berseneva，《光学与光谱学》114，743（2013年），[《光学与光谱学》114，682（2013年）]。[63] L. V. Skripnikov，《化学物理学杂志》154，201101（2021年）。[64] L. V. Skripnikov、D. V. Chubukov 和 V. M. Shakhova，《化学物理学杂志》155，144103（2021年）。[65] A. Sunaga 和 T. Saue，《分子物理学》119，e1974592（2021年）。[66]A. Sunaga、M. Salman 和 T. Saue，《化学物理学杂志》157，164101（2022年）。[67] A. V. Oleynichenko、A. V. Zaitsevskii、N. S. Mosyagin、A. N. Petrov、E. Eliav 和 A. V. Titov，《预印本》2022，2022120530（2022年）。

表 VI：对于原子序数为 $120 \leq Z \leq 170$ 的超重元素，采用 DCBQ-SRC、DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 方案计算得到的总能量最低的能级、对这些能级有贡献的主要组态以及总角动量$J$。对于 DCBQ-CI1 和 DCBQ-CI2 的结果，列出权重至少为 0.05 的组态。所得组态均相对于“闭壳层”列中列出的闭壳层组态给出。第一列中以粗体显示的 $Z$ 值表示采用 DCBQ-RAV 和 DCBQ-SRC 方法得到的基态组态不同的情况。此外，为便于读者查阅表格，$Z$ 周围还采用了以下标记。下划线“ ”表示采用 DCBQ-SRC 方法计算得到的基态 $J_{\mathrm{SRC}}$ 能级不同于采用 DCBQ-CI1 方法计算得到的 $J_{\mathrm{CI1}}$ 能级，$J_{\mathrm{SRC}} \neq J_{\mathrm{CI1}}$。左侧竖线“| ”表示基态 SRC 能级所属的组态 $K_{\mathrm{SRC}}$ 不同于基态 CI1 能级的主导组态 $K_{\mathrm{CI1}}$，$K_{\underline{\mathrm{SRC}}} \neq K_{\mathrm{CI1}}$。上划线“ ”表示 $J_{\mathrm{CI1}} \neq J_{\mathrm{CI2}}$。最后，右侧竖线“|”表示 $K_{\mathrm{CI1}} \neq K_{\mathrm{CI2}}$ 的情况。所得基态能级与文献 [47] 的结果进行了比较。保留了文献 [47] 中的非相对论记号。

—

| $Z$ | 闭合壳层 | DCBQ-SRC | $J_{\mathrm{SRC}}$ | DCBQ-CI1 | $J_{\mathrm{CI1}}$ | DCBQ-CI2 | $J_{\mathrm{CI2}}$ | 参考文献 [47] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 120 | [Og] | $8s^2_{1/2}$ | 0 | $0.94 \cdot 8s^2_{1/2}$ | 0 | $0.93 \cdot 8s^2_{1/2}$ | 0 | $8s^2$ |
| 121 | | $8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.92 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.91 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}$ | 1/2 | $8s^28p^1$ |
| 122 | | $8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}$ | 2 | $0.85 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}+$<br>$0.09 \cdot 8s^1_{1/2}8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}$ | 2 | $0.84 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}+$<br>$0.07 \cdot 8s^1_{1/2}8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}$ | 2 | $7d^18p^1$ |
| 123 | | $8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^1_{5/2}$ | 9/2 | $0.83 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^1_{5/2}+$<br>$0.14 \cdot 8s^1_{1/2}8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^1_{5/2}$ | 9/2 | $0.82 \cdot 8s^2_{1/2}8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^1_{5/2}+$<br>$0.09 \cdot 8s^1_{1/2}8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^1_{5/2}$ | 9/2 | $6f^28p^1$ |
| \|**124** | $+8s^2$ | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}$ | 6 | $0.83 \cdot 8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}+$<br>$0.10 \cdot 8p^1_{1/2}6f^2_{5/2}6f^1_{7/2}$ | 5 | $0.85 \cdot 8p^1_{1/2}6f^3_{5/2}+$<br>$0.07 \cdot 8p^1_{1/2}6f^2_{5/2}6f^1_{7/2}$ | 5 | $6f^28p^2$ |
| **125** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$ | 17/2 | $0.96 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$ | 17/2 | $0.94 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^1_{7/2}$ | 17/2 | $0.81 \cdot 5g^16f^28p^2+$<br>$0.17 \cdot 5g^16f^17d^28p^1+$<br>$0.02 \cdot 6f^37d^18p^1$ |
| **126** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^2_{7/2}$ | 10 | $0.93 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^2_{7/2}$ | 10 | $0.92 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^2_{7/2}$ | 10 | $0.998 \cdot 5g^26f^38p^1+$<br>$0.002 \cdot 5g^26f^28p^2$ |
| **127** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^3_{7/2}$ | 27/2 | $0.95 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^3_{7/2}$ | 27/2 | $0.94 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^3_{7/2}$ | 27/2 | $0.88 \cdot 5g^36f^28p^2+$<br>$0.12 \cdot 5g^36f^17d^28p^1$ |
| **128** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^4_{7/2}$ | 14 | $0.80 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^4_{7/2}+$<br>$0.14 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^3_{7/2}5g^1_{9/2}$ | 14 | $0.81 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^4_{7/2}+$<br>$0.13 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^3_{7/2}5g^1_{9/2}$ | 14 | $0.88 \cdot 5g^46f^28p^2+$<br>$0.12 \cdot 5g^46f^17d^28p^1$ |
| **129** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{7/2}$ | 29/2 | $0.93 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^4_{7/2}6f^1_{7/2}$ | 29/2 | $0.94 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{7/2}$ | 29/2 | $5g^46f^37d^18p^1$ |
| **130**\| | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2}$ | 14 | $0.92 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^5_{7/2}6f^1_{7/2}$ | 14 | $0.85 \cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{7/2}$ | 12 | $5g^56f^37d^18p^1$ |
| \|**131** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}$ | 25/2 | $0.82 \cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^6_{7/2}+$<br>$0.05 \cdot 8p^2_{1/2}6f^2_{5/2}5g^6_{7/2}6f^1_{7/2}$ | 21/2 | $0.85 \cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}+$<br>$0.05 \cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{7/2}$ | 21/2 | $0.86 \cdot 5g^66f^38p^2+$<br>$0.14 \cdot 5g^66f^27d^28p^1$ |
| \|**132** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^7_{7/2}$ | 10 | $0.84 \cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^7_{7/2}+$<br>$0.08 \cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^7_{7/2}+$<br>$0.06 \cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^7_{7/2}$ | 6 | $0.87 \cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^7_{7/2}+$<br>$0.05 \cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^7_{7/2}$ | 6 | $5g^76f^38p^2$ |

表 VI。（续）

| $Z$ | 闭合壳层 | DCBQ-SRC | $J_{\mathrm{SRC}}$ | DCBQ-CI1 | $J_{\mathrm{CI1}}$ | DCBQ-CI2 | $J_{\mathrm{CI2}}$ | 参考文献 [47] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| \|**133** | | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^8_{7/2}$ | 13/2 | $0.83\cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^8_{7/2}+$<br>$0.09\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^8_{7/2}$ | 9/2 | $0.87\cdot 8p^2_{1/2}6f^3_{5/2}5g^8_{7/2}$ | 9/2 | $5g^8 6f^3 8p^2$ |
| \|**134** | $+5g^8_{7/2}$ | $8p^1_{1/2}7d^1_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 6 | $0.82\cdot 8p^2_{1/2}6f^4_{5/2}+$<br>$0.07\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}+$<br>$0.06\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 4 | $0.84\cdot 8p^2_{1/2}6f^4_{5/2}+$<br>$0.05\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}+$<br>$0.05\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 4 | $5g^8 6f^4 8p^2$ |
| \|**135** | | $8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^1_{9/2}$ | 13/2 | $0.82\cdot 8p^2_{1/2}6f^4_{5/2}5g^1_{9/2}+$<br>$0.08\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^1_{9/2}+$<br>$0.05\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}5g^1_{9/2}$ | 5/2 | $0.85\cdot 8p^2_{1/2}6f^4_{5/2}5g^1_{9/2}+$<br>$0.06\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^1_{9/2}$ | 5/2 | $5g^9 6f^4 8p^2$ |
| **136** | | $8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^2_{9/2}$ | 3 | $0.91\cdot 8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^2_{9/2}+$<br>$0.05\cdot 7d^3_{3/2}6f^3_{5/2}5g^2_{9/2}$ | 4 | $0.89\cdot 8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^2_{9/2}$ | 4 | $5g^{10}6f^4 8p^2$ |
| \|137\| | | $8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^3_{9/2}$ | 19/2 | $0.80\cdot 8p^2_{1/2}6f^4_{5/2}5g^3_{9/2}+$<br>$0.11\cdot 8p^1_{1/2}7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^3_{9/2}$ | 13/2 | $0.89\cdot 8p^2_{1/2}7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^3_{9/2}$ | 17/2 | $5g^{11}6f^4 8p^2$ |
| 138 | $+8p^2_{1/2}$ | $7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{9/2}$ | 6 | $0.91\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{9/2}$ | 7 | $0.89\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^4_{9/2}$ | 7 | $5g^{12}6f^3 7d^1 8p^2$ |
| 139 | | $7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{9/2}$ | 13/2 | $0.92\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{9/2}$ | 13/2 | $0.91\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^5_{9/2}$ | 13/2 | $5g^{13}6f^3 7d^1 8p^2$ |
| \|**140** | | $7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^6_{9/2}$ | 6 | $0.90\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{9/2}+$<br>$0.05\cdot 7d^1_{3/2}6f^2_{5/2}5g^6_{9/2}6f^1_{7/2}$ | 6 | $0.90\cdot 7d^1_{3/2}6f^3_{5/2}5g^6_{9/2}$ | 6 | $5g^{14}6f^3 7d^1 8p^2$ |
| 141 | | $7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^7_{9/2}$ | 9/2 | $0.93\cdot 7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^7_{9/2}$ | 9/2 | $0.91\cdot 7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^7_{9/2}$ | 9/2 | $5g^{15}6f^2 7d^2 8p^2$ |
| 142 | | $7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 2 | $0.91\cdot 7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 2 | $0.89\cdot 7d^2_{3/2}6f^2_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 2 | $5g^{16}6f^2 7d^2 8p^2$ |
| **143** | | $7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 5/2 | $0.93\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 3/2 | $0.92\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^8_{9/2}$ | 1/2 | $5g^{17}6f^2 7d^2 8p^2$ |
| **144** | | $7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^9_{9/2}$ | 7 | $0.96\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^9_{9/2}$ | 7 | $0.94\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^9_{9/2}$ | 7 | $0.95\cdot 5g^{17}6f^2 7d^3 8p^2+$<br>$0.05\cdot 5g^{17}6f^4 7d^1 8p^2$ |
| 145 | | $7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^{10}_{9/2}$ | 13/2 | $0.96\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^{10}_{9/2}$ | 13/2 | $0.93\cdot 7d^2_{3/2}6f^3_{5/2}5g^{10}_{9/2}$ | 13/2 | $5g^{18}6f^3 7d^2 8p^2$ |
| 146 | $+5g^{10}_{9/2}$ | $7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 6 | $0.95\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 6 | $0.91\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}$ | 6 | $6f^4 7d^2 8p^2$ |
| 147 | | $7d^2_{3/2}6f^5_{5/2}$ | 7/2 | $0.89\cdot 7d^2_{3/2}6f^5_{5/2}+$<br>$0.07\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}6f^1_{7/2}$ | 9/2 | $0.88\cdot 7d^2_{3/2}6f^5_{5/2}+$<br>$0.05\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{5/2}6f^1_{7/2}$ | 9/2 | $6f^5 7d^2 8p^2$ |
| 148 | | $7d^2_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 2 | $0.94\cdot 7d^2_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 2 | $0.93\cdot 7d^2_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 2 | $6f^6 7d^2 8p^2$ |
| 149 | | $7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 3/2 | $0.96\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 3/2 | $0.93\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}$ | 3/2 | $6f^6 7d^3 8p^2$ |
| **150** | | $7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^1_{7/2}$ | 2 | $0.85\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^1_{7/2}+$<br>$0.11\cdot 7d^3_{3/2}6f^5_{5/2}6f^2_{7/2}$ | 2 | $0.89\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^1_{7/2}+$<br>$0.06\cdot 7d^3_{3/2}6f^5_{5/2}6f^2_{7/2}$ | 2 | $6f^7 7d^3 8p^2$ |
| 151 | | $7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^2_{7/2}$ | 9/2 | $0.89\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^2_{7/2}+$<br>$0.09\cdot 7d^3_{3/2}6f^5_{5/2}6f^3_{7/2}$ | 9/2 | $0.89\cdot 7d^3_{3/2}6f^6_{5/2}6f^2_{7/2}+$<br>$0.06\cdot 7d^3_{3/2}6f^5_{5/2}6f^3_{7/2}$ | 9/2 | $6f^8 7d^3 8p^2$ |
| **152** | $+6f^6_{5/2}$ | $7d^2_{3/2}6f^4_{7/2}$ | 6 | $0.95\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{7/2}$ | 6 | $0.92\cdot 7d^2_{3/2}6f^4_{7/2}$ | 6 | $6f^9 7d^3 8p^2$ |
| 153 | | $7d^2_{3/2}6f^5_{7/2}$ | 11/2 | $0.96\cdot 7d^2_{3/2}6f^5_{7/2}$ | 11/2 | $0.93\cdot 7d^2_{3/2}6f^5_{7/2}$ | 11/2 | $6f^{10}7d^3 8p^2$ |

表 VI。（续）

| $Z$ | 闭合壳层 | DCBQ-SRC | $J_{\mathrm{SRC}}$ | DCBQ-CI1 | $J_{\mathrm{CI1}}$ | DCBQ-CI2 | $J_{\mathrm{CI2}}$ | 参考文献 [47] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 154 | | $7d^2_{3/2}6f^6_{7/2}$ | 6 | $0.98\cdot 7d^2_{3/2}6f^6_{7/2}$ | 6 | $0.95\cdot 7d^2_{3/2}6f^6_{7/2}$ | 6 | $6f^{11}7d^38p^2$ |
| \|**155** | | $7d^2_{3/2}6f^7_{7/2}$ | 7/2 | $0.99\cdot 9s^1_{1/2}6f^8_{7/2}$ | 1/2 | $0.94\cdot 9s^1_{1/2}6f^8_{7/2}$ | 1/2 | $6f^{12}7d^38p^2$ |
| 156 | | $7d^2_{3/2}6f^8_{7/2}$ | 2 | $0.97\cdot 7d^2_{3/2}6f^8_{7/2}$ | 2 | $0.97\cdot 7d^2_{3/2}6f^8_{7/2}$ | 2 | $6f^{13}7d^38p^2$ |
| 157 | $+6f^8_{7/2}$ | $7d^3_{3/2}$ | 3/2 | $0.96\cdot 7d^3_{3/2}$ | 3/2 | $0.96\cdot 7d^3_{3/2}$ | 3/2 | $6f^{14}7d^38p^2$ |
| 158 | | $7d^4_{3/2}$ | 0 | $0.98\cdot 7d^4_{3/2}$ | 0 | $0.96\cdot 7d^4_{3/2}$ | 0 | $6f^{14}7d^48p^2$ |
| 159 | $+7d^4_{3/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.98\cdot 9s^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.96\cdot 9s^1_{1/2}$ | 1/2 | $6f^{14}7d^48p^29s^1$ |
| 160 | | $7d^1_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 3 | $0.96\cdot 7d^1_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 3 | $0.95\cdot 7d^1_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 3 | $6f^{14}7d^58p^29s^1$ |
| 161 | | $7d^2_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 9/2 | $0.97\cdot 7d^2_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 9/2 | $0.92\cdot 7d^2_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 9/2 | $6f^{14}7d^68p^29s^1$ |
| **162** | | $7d^3_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 5 | $0.98\cdot 7d^3_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 5 | $0.96\cdot 7d^3_{5/2}9s^1_{1/2}$ | 5 | $6f^{14}7d^78p^29s^1$ |
| 163 | | $7d^5_{5/2}$ | 5/2 | $0.96\cdot 7d^5_{5/2}$ | 5/2 | $0.95\cdot 7d^5_{5/2}$ | 5/2 | $6f^{14}7d^88p^29s^1$ |
| 164 | | $7d^6_{5/2}$ | 0 | $0.98\cdot 7d^6_{5/2}$ | 0 | $0.96\cdot 7d^6_{5/2}$ | 0 | $6f^{14}7d^{10}8p^2$ |
| 165 | $+7d^6_{5/2}$ | $9s^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.98\cdot 9s^1_{1/2}$ | 1/2 | $0.96\cdot 9s^1_{1/2}$ | 1/2 | |
| 166 | | $9s^2_{1/2}$ | 0 | $0.84\cdot 9s^2_{1/2}+0.10\cdot 8p^2_{3/2}$ | 0 | $0.90\cdot 9s^2_{1/2}$ | 0 | |
| \|**167** | | $9s^1_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}$ | 3/2 | $0.88\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}+0.06\cdot 8p^3_{3/2}$ | 3/2 | $0.91\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}$ | 3/2 | |
| \|$\overline{168}$\| | | $9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}$ | 1 | $0.55\cdot 9s^1_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.24\cdot 9s^1_{1/2}8p^1_{3/2}9p^2_{1/2}+$<br>$0.20\cdot 9s^1_{1/2}8p^3_{3/2}$ | 2 | $0.94\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^1_{1/2}$ | 1 | |
| **169** | | $9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}$ | 3/2 | $0.76\cdot 9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.16\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^2_{1/2}+$<br>$0.06\cdot 9s^2_{1/2}8p^3_{3/2}$ | 3/2 | $0.83\cdot 9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^1_{1/2}+$<br>$0.07\cdot 9s^2_{1/2}8p^1_{3/2}9p^2_{1/2}$ | 3/2 | |
| 170 | | $9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^2_{1/2}$ | 2 | $0.96\cdot 9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^2_{1/2}$ | 2 | $0.93\cdot 9s^2_{1/2}8p^2_{3/2}9p^2_{1/2}$ | 2 | |