arXiv:2301.04132v1 [physics.atom-ph] 10 Jan 2023

模型量子电动力学算符方法：多电子原子和离子中核反冲效应的相对论计算

I. S. Anisimova,[1] A. V. Malyshev,[1] D. A. Glazov,[1] M. Y. Kaygorodov,[1]Y. S. Kozhedub,[1] G. Plunien,[2] 和 V. M. Shabaev[11]圣彼得堡国立大学物理系，Universitetskaya 7/9，199034 圣彼得堡，俄罗斯[2]德累斯顿工业大学理论物理研究所，Mommsenstraße 13，D-01062 德累斯顿，德国

摘要

建立了一种模型算符方法，用于对多电子原子系统中核反冲效应对能级的影响进行全相对论计算。用于处理超越布赖特近似的正常质量位移的模型算符单电子部分，由半局域势和非局域势之和表示。后者通过采用针对类氢离子严格计算的对角矩阵元和非对角矩阵元构造，这些矩阵元取电子与原子核质量比的一阶。超越最低阶相对论近似的比质量位移具有一种可直接用于计算的形式。通过将该方法的预测结果与从头算 QED 计算结果进行比较，检验了该方法的能力。所提出的算符可以很容易地纳入任何基于狄拉克-库仑-布赖特哈密顿量的相对论计算中。

I. 引言

准确描述核反冲效应，对于正确分析大量旨在测量各种原子性质的光谱实验至关重要，例如束缚能和跃迁能，或束缚电子的 g 因子。显然，在相应性质的同位素差异中，这一效应最为显著，参见例如文献 [1–11]。核反冲导致所谓的质量位移。与有限核尺寸引起的场位移一起，这些效应构成同位素位移的主要贡献。对同位素差异开展联合高精度理论与实验研究，不仅能够确定核参数，例如均方电荷半径的变化，还为探寻新物理铺平道路 [12–22]。

在 $(m/M)(\alpha Z)^4 mc^2$ 近似下，其中 m 和 M 分别是电子和原子核的质量， α 是精细结构常数， Z 是核电荷数，核反冲效应对束缚能的影响可由相对论质量位移算符 [23–26] 描述。核反冲效应的完全相对论理论，在 m/M的一阶、 αZ的所有阶以及 α 的零阶下，只能在量子电动力学（QED）的框架内建立 [23, 24, 26], 另见文献 [27–29]。尽管轻原子的核强度参数 αZ 很小，但高阶项的贡献仍可能显著，甚至对氢也是如此[30, 31]。因此，准确处理核反冲效应需要对 αZ进行非微扰考量。迄今为止，相应的从头算 QED 计算仅针对少电子体系完成，参见例如文献 [4, 29, 32–34] 及其中的参考文献。随着电子数增加，严格方法的计算难度迅速上升，使其在更大规模的体系中实际上难以实施。评估与电子自能和真空极化有关的辐射量子电动力学修正也存在类似问题。因此，亟需发展近似且高效的方法，以便在基于狄拉克-库仑-布赖特哈密顿量[35–45]的方法中同时纳入量子电动力学效应和核反冲效应。

对于辐射量子电动力学修正，我们小组提出了模型量子电动力学算符方法 [46] ，该方法最近已扩展至超重元素领域 [47]。用于生成该算符的 `QEDMOD` Fortran 程序包见参考文献 [48]。该算符已成功用于近似描述多种多电子体系中的量子电动力学效应

对束缚能和跃迁能的影响 [49–60]。本研究的主要目标是设计一种类似的方法，用于计算质量反冲算符近似之外的核反冲效应对能级的量子电动力学影响。将所提出的方法与标准电子关联方法结合应用，应能对目前难以进行严格计算的体系中的这一效应作近似的量子电动力学处理。

鉴于过去几十年来彭宁阱中 g 因子测量精度取得了显著进展 [6, 9, 61–67], ，对外磁场存在时的核反冲效应进行高精度评估也变得至关重要。文献 [68] 建立了原子 g 因子上核反冲效应的量子电动力学理论，该理论对 αZ 的所有阶均适用。文献 [6, 69–75] 对少电子离子进行了相应的从头算。对于更复杂的系统，目前只能在最低阶相对论近似下，利用文献 [70] 中从量子电动力学形式体系导出的有效四分量方法，处理核反冲效应对束缚电子 g 因子的影响。在此背景下，本工作针对束缚能中的核反冲效应所发展的模型算符方法，可视为构建更一般算符的第一步，该算符也适用于研究束缚电子的 g 因子。

本文安排如下。在第II节中，我们简要介绍原子和离子能级中核反冲效应的相对论理论。第III 节致力于构建用于核反冲效应QED计算的模型算符。在第IV节中，我们给出了广泛 $Z = 5 - 100$范围内的数值结果，并通过将所提出方法的预测与从头算计算结果进行比较，展示了该方法的性能。附录A中推导了描述核反冲效应对束缚能影响的单电子和双电子矩阵元的非微扰（关于 αZ）表达式。在附录B中，进一步变换这些表达式，使其便于实际计算。最后，附录C总结了构建局域有效势所需的公式；这些势用于第IV节对模型QED算符进行测试。

全文均使用相对论单位制（$\hbar = 1$ 和 $c = 1$）以及海维赛电荷单位（$e^2 = 4\pi\alpha$，其中$e < 0$ 为电子电荷）。

II. 核反冲效应的量子电动力学理论

众所周知，在非相对论近似下，类氢原子的结合能中的核反冲贡献可通过将电子质量 m替换为约化质量 $m_r = mM/(m+M)$来求得。对于含有多个电子的原子，这种方法并不充分，必须考虑核反冲效应的双电子部分 [76]。通过采用质量位移哈密顿量 m/M ，可得到关于[23–25]的最低阶相对论（Breit）一阶修正。对于 N电子体系，该算符可写为

$$H_{\rm MS} = \frac{1}{2M}\sum_{i,j=1}^{N}\left[\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{p}_j - \frac{\alpha Z}{r_i}\left(\boldsymbol{\alpha}_i + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i\cdot\boldsymbol{r}_i)}{r_i^2}\boldsymbol{r}_i\right)\cdot\boldsymbol{p}_j\right], \tag{1}$$

其中，下标 i 和 j 表示电子， $\boldsymbol{p} = -i\boldsymbol{\nabla}$ 表示动量算符， $\boldsymbol{r}$表示位置矢量， $r = |\boldsymbol{r}|$、以及 $\boldsymbol{\alpha}$ 表示狄拉克矩阵。方程（1）中方括号内的第一项对应于非相对论核反冲算符，而第二项则确定了主导相对论修正。

根据 Hughes and Eckart [76], ，原子光谱中的核反冲贡献通常分为正常质量位移（NMS）和特定质量位移（SMS）。因此，哈密顿量（1）可表示为以下各项之和

$$H_{\rm MS} = H_{\rm NMS} + H_{\rm SMS}\,, \tag{2}$$

其中，第一个算符对应于方程（ $i = j$ （1）中的各项，第二个算符对应于 $i \neq j$。为便于进一步讨论，将方程（1）改写为

$$H_{\rm MS} = \frac{1}{2M}\sum_{i,j=1}^{N}\Big[\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{p}_j - 2\boldsymbol{D}_i(0)\cdot\boldsymbol{p}_j\Big] \tag{3}$$

引入矢量算符

$$\boldsymbol{D}(0) = \frac{\alpha Z}{2r}\left(\boldsymbol{\alpha} + \frac{(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\boldsymbol{r}\right). \tag{4}$$

质量位移算符 $H_{\rm MS}$ 给出截至 $(m/M)(\alpha Z)^4 mc^2$ 阶的核反冲修正。该算符广泛用于原子光谱和同位素位移的相对论计算，其中核反冲效应尤为显著 [4, 15, 41, 54, 77–94]。

核反冲效应对束缚能影响的完全相对论理论，只有在严格的 QED方法（超越布赖特近似）框架内才能建立。对于一阶

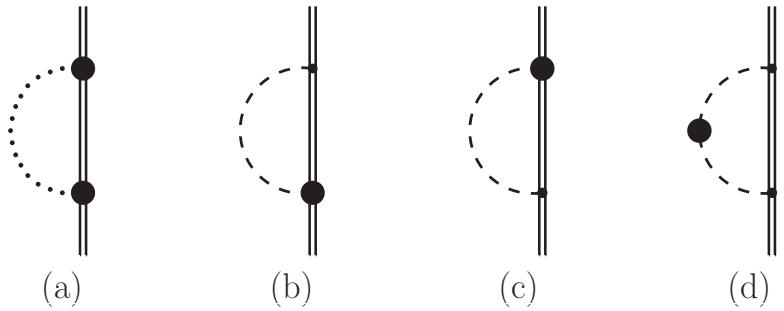

图1. 单电子核反冲图：库仑贡献（a）、单横向贡献（b）和（c），以及双横向贡献（d）。关于费曼规则的说明，请参见正文和参考文献 [26] 。

m/M阶，保留所有 αZ阶，并在 α 零阶近似下，相应理论见文献 [23, 24, 26]。文献 [26] 中建立的形式体系最适合本研究的目标。在这一形式体系中，通过修改标准量子电动力学哈密顿量，将纯核反冲效应纳入考虑；该哈密顿量描述电子-正电子场与量子化电磁场以及原子核的经典库仑势之间的相互作用 V。具体而言，在量子电动力学哈密顿量的相互作用部分加入一个额外项，详见文献 [26] 。因此，借助 Furry 图像相互作用表象下的微扰理论 [95]，可以与非反冲量子电动力学效应（如电子自能和真空极化）采用同等方式，求得纯核反冲效应对能级的影响。构造单个能级和准简并能级的量子电动力学微扰级数的一种便捷方法是双时格林函数（TTGF）方法 [96]。附录 A 采用该方法推导描述核反冲效应对束缚能影响的矩阵元的形式表达式。在这一方法中，零阶单电子波函数 $|\psi_n\rangle$ 及能量 ε_n 被假定为狄拉克方程的解

$$h^{\rm D}|\psi_n\rangle \equiv \big[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m + V\big]|\psi_n\rangle = \varepsilon_n|\psi_n\rangle\,. \tag{5}$$

描述核反冲效应的全阶（关于 αZ）表达式也可分为正常质量位移和 SMS 两部分。单电子（正常质量位移）和双电子（SMS）贡献分别由图 1 和 2所示的费曼图给出。关于处理核反冲效应时所引入的附加图示技术规则的详尽说明，可见参考文献 [26], 另见参考文献 [96]。

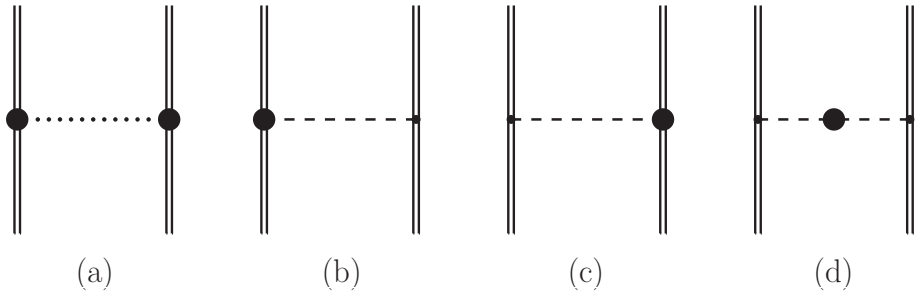

图 2. 双电子核反冲图：库仑贡献 (a)、单横向贡献 (b) 和 (c)，以及双横向贡献 (d)。

为说明全文所用的术语，我们以图 1 为例，简要介绍这些规则。首先，图中的双线和带小点的顶点对应于束缚态量子电动力学的传统图示技术 [96]。具体而言，线表示势 V中的电子传播子，而顶点则源于电子-正电子场和电磁场的标准相互作用。所有其他图示元素均因量子电动力学哈密顿量中存在上述附加项而产生。库仑规范已被证明最适用于核反冲效应研究 [23, 24, 26, 28], ，并由此形成了自然的术语。在此规范下，光子传播子 $D_{\mu\nu}$ $(\omega,\ \boldsymbol{r})$ 被分为库仑、

$$D_{00}(\omega,\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi r}\,, \tag{6}$$

和横向，

$$D_{lk}(\omega,\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\left[\frac{\exp\left(i\sqrt{\omega^2+i0}\,r\right)}{r}\delta_{lk} + \nabla_l\nabla_k\frac{\exp\left(i\sqrt{\omega^2+i0}\,r\right)-1}{\omega^2 r}\right]. \tag{7}$$

各部分，而光子传播子的其余分量均等于零，$D_{l0}=D_{0l}=0$（l、$k=1$、2、3）。图1 中的所有反冲贡献可根据所涉及的传播子（7）的数量进行分类。共有三种可能性 [26]:
（i）连接图1（a）中两个粗点的点线表示所谓的“库仑反冲”相互作用，其完全不包含光子传播子的横向部分；（ii）图1（b）和1（c）中一端带有粗点的虚线表示“单横向光子反冲”相互作用，其中包含 D_{lk} 一次；（iii）最后，图1（d）中间带有粗点的虚线表示“双横向光子反冲”相互作用，

其中涉及两个光子传播子的乘积。我们注意到，最初在文献[23] 中发展的方法与文献 [26] 中的形式体系得出了相同的结果，但该方法意味着对描述电子通过光子交换与原子核相互作用的无限序列费曼图进行求和。在这种情况下，所讨论的三种可能性分别对应于对含有零个、一个和两个横向光子以及任意数量库仑光子的图进行求和。

对 αZ 的所有阶，态 $|\psi_a\rangle$ 的正常质量位移贡献可表示如下 [23, 26]

$$E_{\rm NMS} = \langle\psi_a|{\rm P}(\varepsilon_a)|\psi_a\rangle\,, \tag{8}$$

其中，我们引入算符 P(E)，定义如下

$$\langle\psi_i|{\rm P}(E)|\psi_k\rangle = \frac{i}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_n \frac{\langle\psi_i\psi_n|R(\omega)|\psi_n\psi_k\rangle}{E-\omega-\varepsilon_n(1-i0)} \tag{9}$$

with

$$R(\omega) = \frac{1}{M}\Big[\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{D}_1(\omega)\Big]\cdot\Big[\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{D}_2(\omega)\Big]\,. \tag{10}$$

在公式 (9) 中，$|\psi_i\psi_n\rangle = |\psi_i\rangle|\psi_n\rangle$ 是单电子波函数的直积。公式 ($\boldsymbol{D}(\omega)$ 中的算符与光子传播子的横向部分 (7) 有关，其 k 个笛卡尔分量 $D_k(\omega)$ 等于

$$D_k(\omega) = -4\pi\alpha Z\alpha_l D_{lk}(\omega)\,. \tag{11}$$

算符 $\omega\to 0$ 的极限 $\boldsymbol{D}(\omega)$ 与公式 (4) 一致。公式 (10) 中的指标 1 和 2 表示电子，相应算符作用于这些电子。我们将 $R(\omega)$ 改写为:

$$R(\omega) = R_{\rm c} + R_{\rm tr1}(\omega) + R_{\rm tr2}(\omega)\,, \tag{12}$$

$$R_{\rm c} = \frac{1}{M}\,\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2\,, \tag{13}$$

$$R_{\rm tr1}(\omega) = -\frac{1}{M}\Big[\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{D}_2(\omega) + \boldsymbol{D}_1(\omega)\cdot\boldsymbol{p}_2\Big]\,, \tag{14}$$

$$R_{\rm tr2}(\omega) = \frac{1}{M}\,\boldsymbol{D}_1(\omega)\cdot\boldsymbol{D}_2(\omega)\,. \tag{15}$$

将式（12）代入式（8），即可得到正常质量位移中的库仑、单横向光子和双横向光子贡献。

下面讨论与图2中的费曼图相对应的SMS贡献。为简单起见，我们考虑单行列式未微扰波函数的情形，

$$\Psi_{ab}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_P(-1)^P\psi_{Pa}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{Pb}(\boldsymbol{r}_2)\,, \tag{16}$$

其中 P 是置换算符。推广到多行列式波函数的情形十分简单。SMS贡献关于 αZ的非微扰表达式为 [24, 26]

$$E_{\rm SMS}=-\langle\psi_b\psi_a|R(\Delta)|\psi_a\psi_b\rangle\,, \tag{17}$$

其中 $\Delta=\varepsilon_a-\varepsilon_b$。公式 (17) 给出了双电子算符 R的“交换”项。“直接”项为零，因为对于宇称相同的态，算符$\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 的矩阵元均为零。将 (12) 代入式 (17)，可得 SMS贡献按库仑、单横向光子和双横向光子部分展开的表达式。

在过去三十年中，人们开展了大量关于核反冲效应对束缚能影响的量子电动力学计算 [4, 29, 31–34, 84, 88, 97, 98]。需要指出的是，采用由公式（11）定义的算符 $\boldsymbol{D}$ 得到的表达式（8）和（17）适用于点核情形。在文献 [33], 中，有人指出，核反冲效应的有限核尺寸修正的主要部分，可以通过在公式（5）中采用扩展原子核的势来计及；自该论文发表以来，这一处理方法通常被用于质量位移的量子电动力学计算。该文还发现，在由算符（1）定义的布赖特近似中处理核反冲效应的有限核尺寸修正，会产生阶数为 $(m/M)(\alpha Z)^5(R_{\rm nucl}/\lambda\!\!\!^{-})mc^2$ 的人为贡献，甚至超过阶数为 $(m/M)(\alpha Z)^4(R_{\rm nucl}/\lambda\!\!\!^{-})^2mc^2$ 的主要贡献（此处 $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/(mc)$ 为康普顿波长）。这一人为贡献源于公式（1）中的第一个（库仑）项。然而，它会被核反冲效应的库仑部分相应的有限核尺寸修正完全抵消，这意味着，除主要 $(m/M)(\alpha Z)^4(R_{\rm nucl}/\lambda\!\!\!^{-})^2mc^2$ 项之外的有限核尺寸贡献的严格理论，只能在量子电动力学框架内建立。在文献 [99], 中，通过在核顶角 [100, 101], 中引入形状因子，对布赖特近似质量位移算符（1）进行修改，由此产生的额外有限核尺寸修正得到了评估。该算符不同于在修正

库仑规范 [102, 103]所得算符。采用这两个算符得到的结果之间的主要差异，源于单横向光子部分中阶数为（m/M）（αZ）^{5}（$R_{\rm nucl}/\lambda$）mc^2 的伪贡献；只有在使用文献 [102, 103]中的算符进行计算时才会出现该贡献。与库仑贡献的情形类似，只要也采用修正库仑规范下的光子传播子 [102, 103]进行计算，这一伪项就会被单横向光子量子电动力学修正中相应的有限核尺寸贡献抵消。文献 [34, 71, 119], 采用了文献 [99], 中的额外有限核尺寸修正；该修正不含伪项，被用于估计基于文献 [33]所述方法的计算不确定度。迄今为止，对核反冲效应有限核尺寸修正最为详尽的评估，是在文献 [102]中采用量子电动力学方法完成的。该计算针对 $1s$态进行，证实核反冲效应有限核尺寸修正的主要部分确实可由文献 [33], 中的处理方法计及，我们在本文中也采用这一方法。核反冲效应总有限核尺寸修正的严格量子电动力学处理超出了本文的范围。

将式（8）和（17）限制在最低阶相对论近似下，分别得到质量移位算符（1）的正常质量位移和 SMS 部分。直到最近，所有非微扰（关于 αZ）计算都仅限于 $1/Z$的零阶，即电子-电子相互作用对核反冲效应的修正至多只在布赖特近似下进行考虑。在我们近期的工作中，我们推进了核反冲效应的 QED理论。具体而言，我们考虑了关于 αZ 的所有阶数，并研究了关于 $1/Z$ 的一阶电子-电子相互作用修正对原子和离子束缚能中核反冲效应的单电子 [104] 部分和双电子 [105] 部分的贡献。这些高阶 QED 贡献也超出了本文的范围，但如有需要，可以另外计算。

最后，辐射（$\sim \alpha$）以及关于 m/M 的二阶反冲修正，目前也只能通过 αZ 展开方法获得，参见文献 [106–108] 及其中的参考文献。本文也不考虑这些贡献。

III. 用于核反冲效应的模型QED算符

随着实验取得显著进展，多电子体系的QED计算变得日益重要，但这类计算十分复杂，目前在许多情况下仍无法实现



图 3. 自能图。

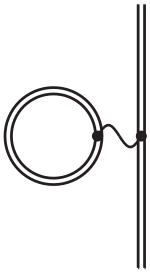

图 4. 真空极化图。

。辐射修正如此，核反冲效应的QED处理亦是如此。因此，迫切需要一种简单的近似方法，以便在各种相对论计算中计入QED修正。传统的一阶QED修正对应于图中所示的自能（SE）、真空极化（VP）和单光子交换图：3、4和5。近期，我们小组在文献[46–48]中提出了用于评估这些效应的近似模型量子电动力学算符方法。本节将阐明使我们能够

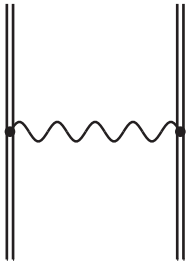

图 5. 单光子交换图。

构建一种类似的方法，以处理超越最低阶相对论近似的核反冲贡献。

模型QED算符方法 [46] 是在TTGF方法框架内建立的。其依据是这样一个事实：对 α 的一阶量子电动力学效应，可由一个有效哈密顿量描述，该哈密顿量作用于由狄拉克方程正能解所构成的所有斯莱特行列式张成的子空间（5），详情参见文献 [109] 。该有效哈密顿量的形式为

$$H = \Lambda^{(+)} \left[\sum_{i}^{N} \left(h_i^{\mathrm{D}} + h_i^{\mathrm{SE}} + h_i^{\mathrm{VP}} \right) + \sum_{i<j}^{N} h_{ij}^{1\mathrm{ph}} \right] \Lambda^{(+)} , \tag{18}$$

其中 $\Lambda^{(+)}$ 是作用于狄拉克哈密顿量 h^{D}正能本征函数的单电子投影算符的乘积，而算符 h^{SE}、 h^{VP}和 $h^{1\mathrm{ph}}$ 分别对应图 3、4和 5中的图。根据第二节 II中简要介绍的核反冲效应的QED理论，对 m/M 为一阶、对 αZ为所有阶时，哈密顿量H 必须补充以下项

$$\delta H = \Lambda^{(+)} \left[\sum_{i}^{N} h_i^{\mathrm{NMS}} + \sum_{i<j}^{N} h_{ij}^{\mathrm{SMS}} \right] \Lambda^{(+)} , \tag{19}$$

其中算符 h^{NMS} 和 h^{SMS} 分别与图1 和2中的图相对应。下文将讨论如何调整算符 δH 中超出布赖特近似的部分，以用于实际的相对论电子结构计算。我们指出，整个形式体系可以推广到这样的情形：式（5）中的势 V 除核势外，还包括某种局域屏蔽势 V_{scr}，以在初始近似中模拟电子间相互作用效应；这对应于扩展版的 Furry 图像。

我们先从图5 中的单光子交换图与图2中的双电子核反冲图之间的类比谈起。对于单光子交换图，TTGF方法给出如下对称表达式： [96, 109]

$$h^{1\mathrm{ph}} = \sum_{i_1 \neq i_2, k_1 \neq k_2}^{\varepsilon_{i_1}, \varepsilon_{i_2}, \varepsilon_{k_1}, \varepsilon_{k_2} > 0} |\psi_{i_1} \psi_{i_2}\rangle \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2}| \frac{1}{2} \Big[I(\varepsilon_{i_1} - \varepsilon_{k_1}) + I(\varepsilon_{i_2} - \varepsilon_{k_2}) \Big] |\psi_{k_1} \psi_{k_2}\rangle \langle \psi_{k_1} \psi_{k_2}| , \tag{20}$$

其中，指标 i_1、 i_2、 k_1 和 k_2 枚举正能量单电子狄拉克本征函数，

$$I(\omega) = e^2 \alpha_1^{\mu} \alpha_2^{\nu} D_{\mu\nu}(\omega, r_{12}) , \tag{21}$$

$\alpha^\mu \equiv \gamma^0\gamma^\mu = (1, \boldsymbol{\alpha})$ 为狄拉克矩阵，库仑规范下的光子传播子由公式（6）和（7）给出。双电子核反冲图的矩阵元通过附录 A中的 TTGF方法推导得出；最终公式见公式（A21）。因此，算符 $h^{\rm SMS}$ 可表示为

$$h^{\rm SMS} = \sum_{i_1\neq i_2, k_1\neq k_2}^{\varepsilon_{i_1},\varepsilon_{i_2},\varepsilon_{k_1},\varepsilon_{k_2}>0} |\psi_{i_1}\psi_{i_2}\rangle\langle\psi_{i_1}\psi_{i_2}| \frac{1}{2}\Big[R(\varepsilon_{i_1}-\varepsilon_{k_1}) + R(\varepsilon_{i_2}-\varepsilon_{k_2})\Big] |\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle\langle\psi_{k_1}\psi_{k_2}|\,, \quad (22)$$

其中，算符 $R(\omega)$由式（10）定义。因此，表达式（20）和（22）仅在将 I替换为 R这一点上有所不同。取库仑规范下零能量转移（$\omega = 0$）时的光子传播子 $D_{\mu\nu}(\omega, r_{12})$，由式（20）可得狄拉克-库仑-布赖特哈密顿量的相互作用部分。在库仑规范下，对公式（20）超出最低阶相对论近似进行处理，会得到所谓的频率依赖的布赖特相互作用。相应的修正可直接纳入电子结构计算中，参见例如文献[57, 60, 110–113], , 无需构造模型算符。省略双横向光子贡献，并在 $R(\omega)$中取 $\omega \to 0$ 极限后，表达式（22）归结为质量位移算符（1）的 SMS 部分。式（22）给出的贡献的其余部分，可与频率依赖的布赖特相互作用修正同等处理。

现在我们来讨论单电子贡献。图4 中的 VP 图在核反冲效应的 QED 理论中没有对应项。因此，我们将重点讨论图3中的 SE 图以及图1中的单电子核反冲图。首先，我们引入 SE 算符 $\Sigma(E)$,

$$\langle\psi_i|\Sigma(E)|\psi_k\rangle = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_n \frac{\langle\psi_i\psi_n|I(\omega)|\psi_n\psi_k\rangle}{E-\omega-\varepsilon_n(1-i0)}\,. \quad (23)$$

这个形式表达式存在紫外发散，必须与质量反项一并重整化，参见例如文献 [114–117]。在 TTGF 方法中，可以得到算符 $h^{\rm SE}$ [46, 109] 的如下对称表达式:

$$h^{\rm SE} = \sum_{i,k}^{\varepsilon_i,\varepsilon_k>0} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \frac{1}{2}\Big[\Sigma_R(\varepsilon_i) + \Sigma_R(\varepsilon_k)\Big] |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\,, \quad (24)$$

其中 $\Sigma_R(\varepsilon)$ 是重整化SE算符。相应的对角和非对角矩阵元见参考文献 [46, 47] 等。单电子核反冲图的矩阵元在 TTGF方法的框架下于

附录 A，最终表达式见式（A14）。与 SE图不同，这一贡献在紫外方面是有限的，无需进行任何重整化。然而，与采用质量位移哈密顿量（1）的计算相比，其求值是一项复杂的任务。算符 $h^{\rm NMS}$ 在 αZ 的所有阶上均有效，可写成如下形式

$$h^{\rm NMS} = \sum_{i,k}^{\varepsilon_i,\varepsilon_k>0} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \frac{1}{2}\Big[{\rm P}(\varepsilon_i) + {\rm P}(\varepsilon_k)\Big] |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \,, \tag{25}$$

式（24）与（25）之间的类比显而易见，本工作利用这一点构建用于单电子核反冲贡献的模型量子电动力学算符方法。由于在布赖特近似下，这一贡献可以通过算符

$$h^{\rm NMS}_{\rm Breit} = \frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{p}^2 - 2\boldsymbol{D}(0)\cdot\boldsymbol{p}\right] \,, \tag{26}$$

我们为 $h^{\rm NMS}$ 的其余（QED）部分构建模型算符，即针对

$$h^{\rm NMS}_{\rm h.o.} \equiv \sum_{i,k}^{\varepsilon_i,\varepsilon_k>0} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \left\{\frac{1}{2}\Big[{\rm P}(\varepsilon_i) + {\rm P}(\varepsilon_k)\Big] - h^{\rm NMS}_{\rm Breit}\right\} |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \,. \tag{27}$$

模型算符方法应同时解决两个问题。首先，由于目前没有足够简单的方法来 从头 计算任意能级（包括连续谱能级）的 P 算符矩阵元，因此必须截断式（27）中的求和。其次，必须保持相互作用的短程性质。为解决这些问题，与文献 [46], 类似，我们将 QED 反冲算符 $h^{\rm NMS}_{\rm h.o.}$近似为半局域（相对于 r）势与非局域势之和

$$\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.} = V_{\rm s.l.} + V_{\rm n.l.} \,. \tag{28}$$

算符 P 与算符 Σ_R 一样，守恒相对论角量子数 $\kappa = (-1)^{j+l+1/2}(j+1/2)$，其中 j 和 l 分别为总角动量和轨道角动量。因此，半局域势可以写成

$$V_{\rm s.l.} = \sum_{\kappa} V^{\kappa}_{\rm s.l.} P_\kappa \,, \tag{29}$$

其中，投影算符 P_κ 仅作用于角变量，其核为 i s

$$P_\kappa(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}') = \begin{pmatrix} \sum_m \Omega_{\kappa m}(\boldsymbol{n})\Omega^\dagger_{\kappa m}(\boldsymbol{n}') & 0 \\ 0 & \sum_m \Omega_{-\kappa m}(\boldsymbol{n})\Omega^\dagger_{-\kappa m}(\boldsymbol{n}') \end{pmatrix} \tag{30}$$

w其中 $\Omega_{\kappa m}(\boldsymbol{n})$ 为球旋量，且 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$。在方程（29）中，我们取 e

$$V^{\kappa}_{\text{s.l.}}(r)=A_{\kappa}\exp(-r/\lambda\!\!\!^{-})\,, \tag{31}$$

其中，参数 A_κ 经过选取，使其能够重现算符$h^{\text{NMS}}_{\text{h.o.}}$在具有给定 κ的最低主量子数 n 态上的对角矩阵元的从头算值。非局域势可写为以下形式

$$V_{\text{n.l.}}=\sum_{j,l=1}^{n}|\phi_j\rangle B_{jl}\langle\phi_l|\,, \tag{32}$$

其中，函数 $\{\phi_i\}_{i=1}^{n}$与参考文献 [46], 中一样，选取为

$$\phi_i(\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}\left[I-(-1)^{s_i}\beta\right]\rho_{l_i}(r)\psi_i(\boldsymbol{r})\,. \tag{33}$$

这里，指标 $s_i=n_i-l_i$ 枚举给定角对称性下的正能态， I 而 β 分别为单位矩阵和标准狄拉克矩阵，因子 $\rho_{l_i}(r)=\exp\left[-2\alpha Z(r/\lambda\!\!\!^{-})/(1+l_i)\right]$ 使函数的局域化程度高于$\{\phi_i\}_{i=1}^{n}$狄拉克方程（5）的本征函数 。最后，方程（32）中的系数 B_{jl} 由以下条件确定：在函数 $\{\psi_i\}_{i=1}^{n}$ 张成的空间中计算得到的模型 QED 算符 $\tilde{h}^{\text{NMS}}_{\text{h.o.}}$ 矩阵元与精确值相同。这导出以下方程

$$\sum_{j,l}^{n}\langle\psi_i|\phi_j\rangle B_{jl}\langle\phi_l|\psi_k\rangle=\langle\psi_i|\left\{\frac{1}{2}\Big[\mathrm{P}(\varepsilon_i)+\mathrm{P}(\varepsilon_k)\Big]-h^{\text{NMS}}_{\text{Breit}}-V_{\text{s.l.}}\right\}|\psi_k\rangle \tag{34}$$

关于 i、$k=1\ldots n$，详情请参阅参考文献[46]。我们指出，核反冲效应的模型QED算符经过了专门设计，因此可以轻松地将 `QEDMOD` Fortran 程序包 [48] 调整为包含该算符。我们建议将改造后的程序包称为`RECMOD` 。

因此，为了确定模型QED算符，我们需要计算 QED 反冲算符 $h^{\text{NMS}}_{\text{h.o.}}$与狄拉克-库仑波函数的对角和非对角矩阵元。迄今为止，文献中仅报道了对角矩阵元的计算。本文采用TTGF方法中推导的表达式，对单电子核反冲贡献进行从头QED 计算。在结束对模型QED算符的描述时，我们指出，在实际计算中，我们利用函数（33）构造模型算符，这些函数对应于主量子数为 ns 的态，以及 $n\leqslant 3$和$np_{1/2}$、 $np_{3/2}$、 $nd_{3/2}$和 $nd_{5/2}$ 且 $n\leqslant 4$ 的态。

IV. 核反冲效应的模型 QED 算符测试

在本工作中，为了获得高阶算符 $h^{\mathrm{NMS}}_{\mathrm{h.o.}}$的对角和非对角矩阵元，我们首先计算算符 h^{NMS}对应的数值，然后从中数值减去算符 $h^{\mathrm{NMS}}_{\mathrm{Breit}}$给出的布赖特贡献。对于原子核反冲效应的库仑部分，通过在式（B2）中略去对正能态的求和，并将负能连续谱的贡献加倍，即可解析地完成这一减法。这有助于避免 Z较小时出现较大的相消。计算采用狄拉克-库仑波函数，对主量子数为 ns、 $np_{1/2}$、 $np_{3/2}$、 $nd_{3/2}$和$nd_{5/2}$ 的态，在 $n \leqslant 5$ 的宽广范围内进行。计算所用的势为式（5）中的扩展原子核势。对于 $Z \leqslant 14$，核电荷分布采用均匀带电球模型，否则采用费米模型。核电荷半径取自文献 [118, 119]。用于表示电子格林函数的单电子基组由 B样条构成 [120] ，并采用双动能平衡方法 [121]。积分 ω 按照附录B中给出的方程进行。

从头算结果可方便地用无量纲函数 $F_{n_i n_k}(\alpha Z)$ 表示，该函数定义为

$$\langle\psi_i|h^{\mathrm{NMS}}_{\mathrm{h.o.}}|\psi_k\rangle = \frac{m}{M}\frac{(\alpha Z)^5}{(n_i n_k)^{3/2}} F_{n_i n_k}(\alpha Z)\, mc^2\,. \tag{35}$$

我们关于 ns、 $np_{1/2}$、 $np_{3/2}$、 $nd_{3/2}$和 $nd_{5/2}$ 态的数据分别列于表I、II、III、IV和V中。文中给出了库仑修正、单横向光子和双横向光子修正，以及总的 QED 反冲贡献。未列出近似处理核尺寸修正所带来的不确定度；考虑到这一点，所报数值精确到列出的所有位数。对于表I-V中未列出的 Z 取值，可通过多项式拟合得到函数$F_{n_i n_k}(\alpha Z)$。

$$F_{n_i n_k}(\alpha Z) = \sum_{n=1}^{N} F_{n_i n_k}(\alpha Z_n) \prod_{m\neq n} \frac{Z - Z_m}{Z_n - Z_m}\,. \tag{36}$$

核反冲效应的模型QED算符是利用 ns 态（ $n \leqslant 3$ ）以及 np 和 nd 态（ $n \leqslant 4$）的矩阵元构造的。根据定义，

表I. 算符的矩阵元 $h_{\mathrm{h.o.}}^{\mathrm{NMS}}$对于 ns 态，使用扩展原子核的狄拉克-库仑波函数计算。标签（n_i, n_k）表示由方程（$F_{n_i n_k}$ 定义的函数 35）。标记为“c”、“tr1”、“tr2”和“tot”的行分别包含库仑、单横向光子、双横向光子和总原子核反冲贡献。

Z	项	(1, 1)	(1, 2)	(1, 3)	(1, 4)	(1, 5)	(2, 2)	(2, 3)	(2, 4)	(2, 5)	(3, 3)	(3, 4)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 5)	(5, 5)
5	c	−0.385 22	−0.385 32	−0.385 31	−0.385 30	−0.385 28	−0.385 42	−0.385 40	−0.385 39	−0.385 38	−0.385 39	−0.385 38	−0.385 37	−0.385 37	−0.385 36	−0.385 35
	tr1	2.732 91	2.802 47	2.807 94	2.809 23	2.809 68	2.925 71	2.941 92	2.944 48	2.945 25	2.971 87	2.978 25	2.979 68	2.989 97	2.993 14	2.998 90
	tr2	−0.970 02	−0.939 91	−0.935 26	−0.933 65	−0.932 91	−0.930 21	−0.924 15	−0.922 37	−0.921 56	−0.922 21	−0.920 03	−0.919 17	−0.919 32	−0.918 30	−0.917 96
	tot	1.377 67	1.477 25	1.487 37	1.490 28	1.491 49	1.610 08	1.632 36	1.636 72	1.638 31	1.664 26	1.672 84	1.675 14	1.685 28	1.689 49	1.695 60
10	c	−0.359 34	−0.359 73	−0.359 70	−0.359 65	−0.359 61	−0.360 14	−0.360 10	−0.360 06	−0.360 02	−0.360 07	−0.360 02	−0.359 99	−0.359 98	−0.359 94	−0.359 90
	tr1	2.227 48	2.298 20	2.303 46	2.304 51	2.304 78	2.421 64	2.437 53	2.439 83	2.440 40	2.467 08	2.473 17	2.474 39	2.484 57	2.487 52	2.493 05
	tr2	−0.650 44	−0.619 34	−0.614 59	−0.612 92	−0.612 13	−0.607 24	−0.600 83	−0.598 94	−0.598 08	−0.598 33	−0.595 99	−0.595 06	−0.595 05	−0.593 93	−0.593 47
	tot	1.217 70	1.319 12	1.329 16	1.331 94	1.333 04	1.454 27	1.476 60	1.480 83	1.482 30	1.508 67	1.517 16	1.519 35	1.529 54	1.533 65	1.539 68
15	c	−0.340 02	−0.340 93	−0.340 87	−0.340 78	−0.340 70	−0.341 86	−0.341 80	−0.341 71	−0.341 63	−0.341 75	−0.341 65	−0.341 57	−0.341 55	−0.341 47	−0.341 39
	tr1	1.952 62	2.025 57	2.030 60	2.031 34	2.031 37	2.150 64	2.166 24	2.168 19	2.168 49	2.195 43	2.201 16	2.202 11	2.212 17	2.214 84	2.220 07
	tr2	−0.489 17	−0.457 02	−0.452 12	−0.450 37	−0.449 53	−0.442 51	−0.435 73	−0.433 74	−0.432 81	−0.432 67	−0.430 16	−0.429 16	−0.428 98	−0.427 77	−0.427 18
	tot	1.123 43	1.227 61	1.237 60	1.240 19	1.241 15	1.366 27	1.388 70	1.392 75	1.394 05	1.421 01	1.429 36	1.431 39	1.441 63	1.445 60	1.451 49
20	c	−0.324 33	−0.325 95	−0.325 87	−0.325 70	−0.325 57	−0.327 63	−0.327 54	−0.327 38	−0.327 25	−0.327 46	−0.327 30	−0.327 17	−0.327 14	−0.327 01	−0.326 87
	tr1	1.772 26	1.848 42	1.853 20	1.853 57	1.853 29	1.976 45	1.991 78	1.993 33	1.993 29	2.020 67	2.025 99	2.026 61	2.036 55	2.038 87	2.043 73
	tr2	−0.388 09	−0.354 77	−0.349 70	−0.347 85	−0.346 95	−0.337 81	−0.330 63	−0.328 52	−0.327 52	−0.327 01	−0.324 32	−0.323 24	−0.322 91	−0.321 60	−0.320 89
	tot	1.059 85	1.167 69	1.177 64	1.180 01	1.180 77	1.311 01	1.333 61	1.337 43	1.338 52	1.366 21	1.374 37	1.376 20	1.386 49	1.390 27	1.395 97
25	c	−0.312 16	−0.314 72	−0.314 60	−0.314 36	−0.314 16	−0.317 36	−0.317 25	−0.317 02	−0.316 81	−0.317 15	−0.316 91	−0.316 71	−0.316 68	−0.316 47	−0.316 27
	tr1	1.644 47	1.724 80	1.729 33	1.729 25	1.728 60	1.857 11	1.872 22	1.873 30	1.872 86	1.900 87	1.905 70	1.905 93	1.915 76	1.917 68	1.922 11
	tr2	−0.317 79	−0.283 13	−0.277 86	−0.275 91	−0.274 95	−0.263 62	−0.256 02	−0.253 79	−0.252 73	−0.251 83	−0.248 96	−0.247 82	−0.247 33	−0.245 93	−0.245 11
	tot	1.014 53	1.126 95	1.136 87	1.138 98	1.139 50	1.276 14	1.298 94	1.302 49	1.303 32	1.331 89	1.339 83	1.341 40	1.351 75	1.355 28	1.360 73
30	c	−0.302 86	−0.306 57	−0.306 42	−0.306 09	−0.305 81	−0.310 43	−0.310 30	−0.309 97	−0.309 69	−0.310 18	−0.309 85	−0.309 57	−0.309 52	−0.309 24	−0.308 96
	tr1	1.550 87	1.636 38	1.640 65	1.640 06	1.638 98	1.774 39	1.789 29	1.789 84	1.788 94	1.817 76	1.822 05	1.821 83	1.831 53	1.832 99	1.836 91
	tr2	−0.265 64	−0.229 46	−0.223 96	−0.221 91	−0.220 89	−0.207 25	−0.199 21	−0.196 85	−0.195 73	−0.194 43	−0.191 39	−0.190 19	−0.189 55	−0.188 06	−0.187 13
	tot	0.982 37	1.100 35	1.110 27	1.112 05	1.112 29	1.256 71	1.279 78	1.283 01	1.283 52	1.313 15	1.320 81	1.322 07	1.332 46	1.335 69	1.340 83
35	c	−0.296 03	−0.301 13	−0.300 96	−0.300 52	−0.300 14	−0.306 48	−0.306 33	−0.305 89	−0.305 51	−0.306 19	−0.305 75	−0.305 37	−0.305 31	−0.304 94	−0.304 56
	tr1	1.481 88	1.573 68	1.577 68	1.576 49	1.574 93	1.718 92	1.733 66	1.733 59	1.732 16	1.761 99	1.765 67	1.764 92	1.774 49	1.775 41	1.778 76
	tr2	−0.225 14	−0.187 23	−0.181 46	−0.179 31	−0.178 23	−0.162 10	−0.153 59	−0.151 12	−0.149 94	−0.148 22	−0.145 01	−0.143 75	−0.142 96	−0.141 39	−0.140 36
	tot	0.960 71	1.085 32	1.095 26	1.096 67	1.096 56	1.250 33	1.273 73	1.276 58	1.276 70	1.307 58	1.314 90	1.315 79	1.326 22	1.329 08	1.333 84
40	c	−0.291 95	−0.298 73	−0.298 52	−0.297 96	−0.297 47	−0.305 90	−0.305 73	−0.305 16	−0.304 66	−0.305 56	−0.305 00	−0.304 51	−0.304 43	−0.303 94	−0.303 45
	tr1	1.432 10	1.531 46	1.535 16	1.533 30	1.531 16	1.685 67	1.700 27	1.699 50	1.697 44	1.728 53	1.731 49	1.730 14	1.739 58	1.739 87	1.742 55
	tr2	−0.192 55	−0.152 64	−0.146 57	−0.144 32	−0.143 18	−0.124 34	−0.115 33	−0.112 73	−0.111 51	−0.109 34	−0.105 97	−0.104 66	−0.103 71	−0.102 08	−0.100 96
	tot	0.947 60	1.080 09	1.090 06	1.091 02	1.090 51	1.255 43	1.279 22	1.281 60	1.281 27	1.313 63	1.320 53	1.320 97	1.331 44	1.333 85	1.338 13
45	c	−0.289 62	−0.298 37	−0.298 13	−0.297 41	−0.296 80	−0.307 71	−0.307 52	−0.306 80	−0.306 17	−0.307 34	−0.306 62	−0.305 99	−0.305 90	−0.305 28	−0.304 65
	tr1	1.398 15	1.506 51	1.509 91	1.507 26	1.504 46	1.671 73	1.686 23	1.684 63	1.681 85	1.714 46	1.716 60	1.714 53	1.723 83	1.723 38	1.725 28
	tr2	−0.165 44	−0.123 23	−0.116 83	−0.114 47	−0.113 29	−0.091 42	−0.081 85	−0.079 15	−0.077 89	−0.075 22	−0.071 69	−0.070 34	−0.069 24	−0.067 55	−0.066 36
	tot	0.943 09	1.084 91	1.094 94	1.095 38	1.094 38	1.272 60	1.296 85	1.298 68	1.297 79	1.331 89	1.338 29	1.338 20	1.348 68	1.350 55	1.354 27
50	c	−0.289 66	−0.300 76	−0.300 49	−0.299 60	−0.298 82	−0.312 74	−0.312 53	−0.311 62	−0.310 83	−0.312 33	−0.311 43	−0.310 63	−0.310 53	−0.309 74	−0.308 95
	tr1	1.378 25	1.497 34	1.500 41	1.496 85	1.493 28	1.676 01	1.690 42	1.687 86	1.684 22	1.718 67	1.719 85	1.716 94	1.726 07	1.724 76	1.725 74
	tr2	−0.142 25	−0.097 35	−0.090 58	−0.088 11	−0.086 89	−0.061 59	−0.051 43	−0.048 62	−0.047 34	−0.044 12	−0.040 43	−0.039 06	−0.037 80	−0.036 07	−0.034 83
	tot	0.946 35	1.099 23	1.109 34	1.109 15	1.107 57	1.301 67	1.326 46	1.327 62	1.326 06	1.362 23	1.367 99	1.367 25	1.377 74	1.378 95	1.381 97
55	c	−0.291 87	−0.305 78	−0.305 46	−0.304 35	−0.303 39	−0.320 95	−0.320 71	−0.319 57	−0.318 58	−0.320 48	−0.319 36	−0.318 36	−0.318 23	−0.317 25	−0.316 26
	tr1	1.371 39	1.503 32	1.506 02	1.501 38	1.496 90	1.698 37	1.712 73	1.709 02	1.704 35	1.741 04	1.741 07	1.737 16	1.746 09	1.743 76	1.743 64
	tr2	−0.121 77	−0.073 73	−0.066 55	−0.063 97	−0.062 72	−0.033 46	−0.022 65	−0.019 74	−0.018 45	−0.014 61	−0.010 78	−0.009 40	−0.007 98	−0.006 23	−0.004 95
	tot	0.957 75	1.123 81	1.134 01	1.133 06	1.130 80	1.343 96	1.369 37	1.369 70	1.367 32	1.405 95	1.410 94	1.409 39	1.419 88	1.420 28	1.422 43
60	c	−0.296 55	−0.313 83	−0.313 46	−0.312 09	−0.310 91	−0.332 90	−0.332 62	−0.331 21	−0.329 97	−0.332 37	−0.330 97	−0.329 73	−0.329 57	−0.328 34	−0.327 11
	tr1	1.377 42	1.524 78	1.527 07	1.521 16	1.515 60	1.739 91	1.754 21	1.749 12	1.743 20	1.782 62	1.781 27	1.776 13	1.784 85	1.781 26	1.779 83
	tr2	−0.103 11	−0.051 36	−0.043 71	−0.041 03	−0.039 76	−0.005 86	0.005 68	0.008 66	0.009 94	0.014 51	0.018 46	0.019 82	0.021 40	0.023 16	0.024 45
	tot	0.977 76	1.159 59	1.169 91	1.168 04	1.164 93	1.401 15	1.427 26	1.426 57	1.423 17	1.464 76	1.468 77	1.466 23	1.476 68	1.476 08	1.477 17
65	c	−0.303 46	−0.324 77	−0.324 33	−0.322 64	−0.321 18	−0.348 59	−0.348 27	−0.346 50	−0.344 96	−0.347 97	−0.346 22	−0.344 68	−0.344 48	−0.342 95	−0.341 42
	tr1	1.396 53	1.562 56	1.564 38	1.556 92	1.550 05	1.802 35	1.816 60	1.809 81	1.802 38	1.845 14	1.842 08	1.835 46	1.843 89	1.838 79	1.835 75
	tr2	−0.085 48	−0.029 30	−0.021 10	−0.018 34	−0.017 07	0.022 39	0.034 73	0.037 78	0.039 00	0.044 43	0.048 49	0.049 79	0.051 55	0.053 27	0.054 53
	tot	1.007 59	1.208 49	1.218 94	1.215 94	1.211 81	1.476 15	1.503 07	1.501 08	1.496 41	1.541 61	1.544 36	1.540 57	1.550 96	1.549 11	1.548 86
70	c	−0.312 32	−0.338 41	−0.337 87	−0.335 79	−0.333 99	−0.367 99	−0.367 59	−0.365 40	−0.363 47	−0.367 23	−0.365 05	−0.363 13	−0.362 88	−0.360 97	−0.359 08
	tr1	1.429 20	1.617 95	1.619 19	1.609 86	1.601 40	1.888 22	1.902 39	1.893 47	1.884 16	1.931 07	1.925 88	1.917 40	1.925 49	1.918 50	1.913 49
	tr2	−0.068 14	−0.006 59	0.002 21	0.005 04	0.006 29	0.052 51	0.065 78	0.068 83	0.069 96	0.076 44	0.080 57	0.081 76	0.083 70	0.085 34	0.086 52
	tot	1.048 75	1.272 94	1.283 53	1.279 11	1.273 70	1.572 74	1.600 58	1.596 91	1.590 65	1.640 28	1.641 40	1.636 04	1.646 32	1.642 87	1.640 94
75	c	−0.325 49	−0.357 59	−0.356 91	−0.354 33	−0.352 11	−0.394 53	−0.394 02	−0.391 26	−0.388 84	−0.393 56	−0.390 82	−0.388 41	−0.388 09	−0.385 71	−0.383 33
	tr1	1.478 73	1.695 60	1.696 15	1.684 47	1.674 03	2.004 16	2.018 20	2.006 58	1.994 87	2.046 99	2.039 09	2.028 26	2.035 92	2.026 54	2.019 05
	tr2	−0.050 43	0.017 69	0.027 18	0.030 06	0.031 24	0.085 88	0.100 18	0.103 20	0.104 16	0.111 93	0.116 07	0.117 10	0.119 23	0.120 71	0.121 76
	tot	1.102 81	1.355 69	1.366 42	1.360 20	1.353 16	1.695 51	1.724 36	1.718 52	1.710 20	1.765 36	1.764 35	1.756 95	1.767 06	1.761 55	1.757 47
80	c	−0.342 01	−0.381 48	−0.380 61	−0.377 40	−0.374 64	−0.427 63	−0.426 97	−0.423 46	−0.420 41	−0.426 36	−0.422 88	−0.419 84	−0.419 44	−0.416 43	−0.413 44
	tr1	1.546 61	1.798 52	1.798 17	1.783 53	1.770 61	2.155 49	2.169 28	2.154 16	2.139 39	2.198 12	2.186 70	2.172 84	2.179 94	2.167 51	2.156 85
	tr2	−0.031 49	0.044 81	0.055 12	0.057 99	0.059 04	0.124 35	0.139 85	0.142 75	0.143 45	0.152 85	0.156 92	0.157 67	0.160 02	0.161 25	0.162 05
	tot	1.173 10	1.461 85	1.472 68	1.464 12	1.455 01	1.852 21	1.882 17	1.873 44	1.862 42	1.924 61	1.920 74	1.910 67	1.920 53	1.912 33	1.905 46
85	c	−0.363 06	−0.411 74	−0.410 59	−0.406 55	−0.403 11	−0.469 65	−0.468 73	−0.464 25	−0.460 37	−0.467 90	−0.463 45	−0.459 59	−0.459 05	−0.455 23	−0.451 44
	tr1	1.637 02	1.933 23	1.931 69	1.913 23	1.897 11	2.352 28	2.365 60	2.345 85	2.327 07	2.394 33	2.378 27	2.360 44	2.366 80	2.350 36	2.335 60
	tr2	−0.010 33	0.076 35	0.087 59	0.090 38	0.091 22	0.170 37	0.187 26	0.189 89	0.190 19	0.201 69	0.205 57	0.205 90	0.208 47	0.209 30	0.209 72
	tot	1.263 63	1.597 84	1.608 68	1.597 05	1.585 23	2.053 00	2.084 13	2.071 49	2.056 88	2.128 13	2.120 39	2.106 75	2.116 22	2.104 44	2.093 89
90	c	−0.387 02	−0.446 77	−0.445 20	−0.440 10	−0.435 78	−0.519 19	−0.517 86	−0.512 09	−0.507 14	−0.516 63	−0.510 91	−0.505 98	−0.505 25	−0.500 38	−0.495 56
	tr1	1.751 33	2.103 35	2.100 12	2.076 68	2.056 45	2.602 04	2.614 45	2.588 50	2.564 41	2.642 73	2.620 44	2.597 35	2.602 71	2.581 00	2.560 88
	tr2	0.014 21	0.114 20	0.126 52	0.129 10	0.129 60	0.226 99	0.245 50	0.247 65	0.247 34	0.261 62	0.265 08	0.264 77	0.267 58	0.267 81	0.267 63
	tot	1.378 52	1.770 78	1.781 44	1.765 68	1.750 27	2.309 84	2.342 09	2.324 07	2.304 61	2.387 71	2.374 61	2.356 14	2.365 04	2.348 43	2.332 95
95	c	−0.418 54	−0.492 61	−0.490 42	−0.483 89	−0.478 41	−0.584 20	−0.582 24	−0.574 69	−0.568 27	−0.580 41	−0.572 92	−0.566 54	−0.565 54	−0.559 25	−0.553 03
	tr1	1.901 10	2.325 75	2.320 09	2.289 96	2.264 23	2.929 69	2.940 48	2.905 96	2.874 62	2.967 70	2.936 82	2.906 55	2.910 52	2.881 65	2.854 30
	tr2	0.043 88	0.161 36	0.174 94	0.177 10	0.177 06	0.299 16	0.319 58	0.320 91	0.319 64	0.337 68	0.340 40	0.339 10	0.342 16	0.341 44	0.340 34
	tot	1.526 44	1.994 50	2.004 61	1.983 17	1.962 88	2.644 65	2.677 82	2.652 18	2.625 99	2.724 97	2.704 30	2.679 11	2.687 14	2.663 85	2.641 62
100	c	−0.461 28	−0.554 59	−0.551 47	−0.542 94	−0.535 85	−0.672 46	−0.669 50	−0.659 39	−0.650 90	−0.666 71	−0.656 70	−0.648 26	−0.646 85	−0.638 55	−0.630 36
	tr1	2.100 97	2.622 83	2.613 55	2.574 12	2.540 84	3.369 87	3.377 77	3.331 00	3.289 46	3.402 83	3.359 72	3.319 31	3.321 30	3.282 39	3.244 99
	tr2	0.081 50	0.222 61	0.237 65	0.239 05	0.238 14	0.394 73	0.417 40	0.417 33	0.414 57	0.437 86	0.439 26	0.436 43	0.439 73	0.437 54	0.435 00
	tot	1.721 18	2.290 85	2.299 73	2.270 24	2.243 12	3.092 14	3.125 68	3.088 93	3.053 13	3.173 98	3.142 28	3.107 48	3.114 18	3.081 38	3.049 62

表 II. 算符的矩阵元 $h_{\mathrm{h.o.}}^{\mathrm{NMS}}$对于 $^{n}p_{1/2}$ 态，使用扩展原子核的狄拉克-库仑波函数计算。符号与表 I中相同。

Z	项	(2, 2)	(2, 3)	(2, 4)	(2, 5)	(3, 3)	(3, 4)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 5)	(5, 5)
5	c	−0.000 21	−0.000 22	−0.000 23	−0.000 23	−0.000 24	−0.000 25	−0.000 25	−0.000 26	−0.000 26	−0.000 26
	tr1	−0.047 48	−0.047 34	−0.049 21	−0.050 21	−0.041 34	−0.041 70	−0.042 96	−0.038 43	−0.038 63	−0.036 79
	tr2	−0.038 02	−0.033 95	−0.033 02	−0.032 64	−0.035 70	−0.034 42	−0.034 00	−0.034 89	−0.034 32	−0.034 51
	tot	−0.085 70	−0.081 51	−0.082 46	−0.083 08	−0.077 29	−0.076 37	−0.077 20	−0.073 57	−0.073 20	−0.071 56
10	c	−0.000 76	−0.000 83	−0.000 85	−0.000 86	−0.000 90	−0.000 92	−0.000 93	−0.000 95	−0.000 96	−0.000 97
	tr1	−0.048 58	−0.048 67	−0.050 59	−0.051 62	−0.042 94	−0.043 37	−0.044 65	−0.040 19	−0.040 42	−0.038 63
	tr2	−0.023 13	−0.018 17	−0.017 02	−0.016 54	−0.018 55	−0.016 93	−0.016 39	−0.016 95	−0.016 22	−0.016 20
	tot	−0.072 47	−0.067 67	−0.068 47	−0.069 02	−0.062 39	−0.061 22	−0.061 97	−0.058 08	−0.057 59	−0.055 80
15	c	−0.001 61	−0.001 75	−0.001 80	−0.001 82	−0.001 91	−0.001 96	−0.001 98	−0.002 01	−0.002 03	−0.002 05
	tr1	−0.048 87	−0.049 08	−0.051 02	−0.052 04	−0.043 48	−0.043 94	−0.045 22	−0.040 81	−0.041 05	−0.039 28
	tr2	−0.008 21	−0.002 37	−0.001 00	−0.000 43	−0.001 38	0.000 58	0.001 24	0.001 01	0.001 90	0.002 11
	tot	−0.058 69	−0.053 20	−0.053 82	−0.054 29	−0.046 76	−0.045 32	−0.045 96	−0.041 81	−0.041 18	−0.039 22
20	c	−0.002 74	−0.002 98	−0.003 06	−0.003 09	−0.003 24	−0.003 32	−0.003 36	−0.003 41	−0.003 45	−0.003 49
	tr1	−0.048 49	−0.048 73	−0.050 64	−0.051 65	−0.043 15	−0.043 60	−0.044 86	−0.040 48	−0.040 71	−0.038 95
	tr2	0.006 94	0.013 66	0.015 24	0.015 89	0.016 04	0.018 32	0.019 10	0.019 20	0.020 24	0.020 65
	tot	−0.044 30	−0.038 04	−0.038 46	−0.038 85	−0.030 36	−0.028 60	−0.029 12	−0.024 69	−0.023 92	−0.021 78
25	c	−0.004 16	−0.004 51	−0.004 63	−0.004 68	−0.004 90	−0.005 02	−0.005 08	−0.005 15	−0.005 21	−0.005 26
	tr1	−0.047 52	−0.047 68	−0.049 54	−0.050 52	−0.042 03	−0.042 43	−0.043 65	−0.039 28	−0.039 48	−0.037 71
	tr2	0.022 47	0.030 10	0.031 87	0.032 60	0.033 88	0.036 49	0.037 37	0.037 81	0.038 99	0.039 59
	tot	−0.029 21	−0.022 09	−0.022 30	−0.022 60	−0.013 05	−0.010 96	−0.011 35	−0.006 62	−0.005 69	−0.003 38
30	c	−0.005 87	−0.006 36	−0.006 52	−0.006 59	−0.006 90	−0.007 07	−0.007 15	−0.007 25	−0.007 33	−0.007 40
	tr1	−0.045 96	−0.045 95	−0.047 72	−0.048 66	−0.040 12	−0.040 44	−0.041 60	−0.037 23	−0.037 39	−0.035 60
	tr2	0.038 57	0.047 13	0.049 09	0.049 89	0.052 36	0.055 30	0.056 27	0.057 05	0.058 38	0.059 16
	tot	−0.013 26	−0.005 18	−0.005 15	−0.005 36	0.005 34	0.007 78	0.007 52	0.012 57	0.013 67	0.016 16
35	c	−0.007 91	−0.008 57	−0.008 78	−0.008 87	−0.009 29	−0.009 52	−0.009 61	−0.009 75	−0.009 85	−0.009 94
	tr1	−0.043 78	−0.043 50	−0.045 15	−0.046 03	−0.037 39	−0.037 59	−0.038 67	−0.034 30	−0.034 39	−0.032 57
	tr2	0.055 45	0.064 97	0.067 11	0.067 96	0.071 72	0.074 97	0.076 03	0.077 17	0.078 62	0.079 57
	tot	0.003 77	0.012 90	0.013 18	0.013 06	0.025 04	0.027 86	0.027 74	0.033 12	0.034 39	0.037 06
40	c	−0.010 35	−0.011 21	−0.011 47	−0.011 58	−0.012 14	−0.012 42	−0.012 54	−0.012 71	−0.012 83	−0.012 96
	tr1	−0.040 88	−0.040 23	−0.041 72	−0.042 52	−0.033 73	−0.033 78	−0.034 76	−0.030 36	−0.030 37	−0.028 51
	tr2	0.073 35	0.083 87	0.086 17	0.087 05	0.092 21	0.095 78	0.096 90	0.098 41	0.099 98	0.101 09
	tot	0.022 11	0.032 43	0.032 98	0.032 95	0.046 34	0.049 57	0.049 60	0.055 33	0.056 77	0.059 63
45	c	−0.013 24	−0.014 33	−0.014 65	−0.014 78	−0.015 51	−0.015 86	−0.016 00	−0.016 22	−0.016 36	−0.016 51
	tr1	−0.037 14	−0.036 00	−0.037 28	−0.037 99	−0.028 97	−0.028 83	−0.029 70	−0.025 26	−0.025 17	−0.023 26
	tr2	0.092 53	0.104 12	0.106 55	0.107 45	0.114 16	0.118 03	0.119 20	0.121 10	0.122 76	0.124 02
	tot	0.042 14	0.053 79	0.054 62	0.054 68	0.069 67	0.073 33	0.073 50	0.079 62	0.081 23	0.084 26
50	c	−0.016 71	−0.018 07	−0.018 45	−0.018 60	−0.019 54	−0.019 96	−0.020 12	−0.020 39	−0.020 56	−0.020 73
	tr1	−0.032 34	−0.030 56	−0.031 59	−0.032 19	−0.022 86	−0.022 49	−0.023 22	−0.018 72	−0.018 53	−0.016 55
	tr2	0.113 34	0.126 07	0.128 61	0.129 49	0.137 94	0.142 10	0.143 29	0.145 61	0.147 35	0.148 73
	tot	0.064 29	0.077 45	0.078 57	0.078 70	0.095 54	0.099 65	0.099 95	0.106 49	0.108 26	0.111 45
55	c	−0.020 89	−0.022 56	−0.023 02	−0.023 19	−0.024 37	−0.024 87	−0.025 05	−0.025 38	−0.025 57	−0.025 76
	tr1	−0.026 18	−0.023 57	−0.024 30	−0.024 76	−0.015 03	−0.014 38	−0.014 94	−0.010 38	−0.010 05	−0.008 01
	tr2	0.136 21	0.150 16	0.152 78	0.153 61	0.164 02	0.168 46	0.169 64	0.172 40	0.174 18	0.175 66
	tot	0.089 14	0.104 03	0.105 47	0.105 66	0.124 62	0.129 21	0.129 64	0.136 64	0.138 56	0.141 89
60	c	−0.025 97	−0.028 01	−0.028 55	−0.028 74	−0.030 23	−0.030 82	−0.031 02	−0.031 42	−0.031 63	−0.031 84
	tr1	−0.018 21	−0.014 56	−0.014 91	−0.015 23	−0.004 95	−0.003 96	−0.004 34	0.000 32	0.000 78	0.002 90
	tr2	0.161 66	0.176 94	0.179 60	0.180 33	0.193 01	0.197 71	0.198 82	0.202 07	0.203 86	0.205 40
	tot	0.117 48	0.134 37	0.136 14	0.136 36	0.157 82	0.162 93	0.163 46	0.170 97	0.173 01	0.176 46
65	c	−0.032 20	−0.034 68	−0.035 31	−0.035 50	−0.037 39	−0.038 07	−0.038 28	−0.038 76	−0.038 98	−0.039 20
	tr1	−0.007 82	−0.002 83	−0.002 73	−0.002 87	0.008 12	0.009 52	0.009 35	0.014 12	0.014 74	0.016 93
	tr2	0.190 40	0.207 15	0.209 79	0.210 35	0.225 67	0.230 60	0.231 59	0.235 37	0.237 11	0.238 67
	tot	0.150 39	0.169 64	0.171 75	0.171 97	0.196 40	0.202 05	0.202 66	0.210 73	0.212 87	0.216 39
70	c	−0.039 86	−0.042 88	−0.043 59	−0.043 79	−0.046 17	−0.046 94	−0.047 16	−0.047 73	−0.047 95	−0.048 17
	tr1	0.005 89	0.012 57	0.013 22	0.013 27	0.025 24	0.027 10	0.027 17	0.032 09	0.032 86	0.035 12
	tr2	0.223 32	0.241 72	0.244 25	0.244 57	0.263 02	0.268 13	0.268 92	0.273 29	0.274 92	0.276 42
	tot	0.189 35	0.211 41	0.213 88	0.214 05	0.242 09	0.248 29	0.248 93	0.257 64	0.259 83	0.263 37
75	c	−0.049 60	−0.053 28	−0.054 08	−0.054 26	−0.057 29	−0.058 16	−0.058 36	−0.059 05	−0.059 25	−0.059 46
	tr1	0.024 29	0.033 18	0.034 49	0.034 74	0.048 06	0.050 47	0.050 78	0.055 90	0.056 83	0.059 12
	tr2	0.261 68	0.281 94	0.284 26	0.284 22	0.306 42	0.311 65	0.312 14	0.317 16	0.318 58	0.319 95
	tot	0.236 37	0.261 84	0.264 67	0.264 70	0.297 20	0.303 96	0.304 56	0.314 01	0.316 16	0.319 62
80	c	−0.062 00	−0.066 50	−0.067 38	−0.067 51	−0.071 39	−0.072 35	−0.072 50	−0.073 33	−0.073 49	−0.073 65
	tr1	0.049 34	0.061 11	0.063 19	0.063 66	0.078 85	0.081 90	0.082 45	0.087 82	0.088 88	0.091 18
	tr2	0.307 16	0.329 55	0.331 51	0.330 95	0.357 75	0.362 99	0.363 02	0.368 79	0.369 87	0.370 98
	tot	0.294 49	0.324 16	0.327 32	0.327 10	0.365 21	0.372 54	0.372 97	0.383 28	0.385 26	0.388 51
85	c	−0.078 11	−0.083 62	−0.084 56	−0.084 61	−0.089 62	−0.090 65	−0.090 71	−0.091 70	−0.091 76	−0.091 83
	tr1	0.084 05	0.099 64	0.102 65	0.103 31	0.121 15	0.124 92	0.125 68	0.131 39	0.132 52	0.134 74
	tr2	0.362 14	0.387 02	0.388 39	0.387 12	0.419 60	0.424 71	0.424 08	0.430 70	0.431 24	0.431 93
	tot	0.368 07	0.403 04	0.406 48	0.405 82	0.451 13	0.458 97	0.459 05	0.470 40	0.472 00	0.474 83
90	c	−0.098 98	−0.105 73	−0.106 68	−0.106 56	−0.113 08	−0.114 12	−0.114 01	−0.115 19	−0.115 08	−0.114 98
	tr1	0.132 64	0.153 30	0.157 37	0.158 15	0.179 78	0.184 33	0.185 22	0.191 38	0.192 44	0.194 41
	tr2	0.429 94	0.457 76	0.458 22	0.455 91	0.495 59	0.500 32	0.498 72	0.506 33	0.506 06	0.506 05
	tot	0.463 60	0.505 33	0.508 91	0.507 50	0.562 30	0.570 53	0.569 92	0.582 51	0.583 41	0.585 49
95	c	−0.127 26	−0.135 59	−0.136 45	−0.136 05	−0.144 66	−0.145 63	−0.145 22	−0.146 62	−0.146 22	−0.145 81
	tr1	0.202 82	0.230 40	0.235 64	0.236 35	0.263 61	0.268 94	0.269 73	0.276 49	0.277 22	0.278 67
	tr2	0.515 74	0.547 05	0.546 10	0.542 32	0.591 28	0.595 25	0.592 23	0.600 99	0.599 48	0.598 41
	tot	0.591 30	0.641 86	0.645 29	0.642 63	0.710 23	0.718 56	0.716 74	0.730 85	0.730 49	0.731 26
100	c	−0.166 93	−0.177 34	−0.177 94	−0.177 03	−0.188 67	−0.189 38	−0.188 44	−0.190 12	−0.189 19	−0.188 27
	tr1	0.307 52	0.344 73	0.351 15	0.351 41	0.387 25	0.393 20	0.393 45	0.401 03	0.400 91	0.401 29
	tr2	0.627 54	0.663 10	0.659 98	0.654 01	0.715 27	0.717 85	0.712 70	0.722 81	0.719 43	0.716 67
	tot	0.768 12	0.830 49	0.833 19	0.828 39	0.913 85	0.921 67	0.917 70	0.933 72	0.931 15	0.929 69

表 III. 算符的矩阵元 $h_{\rm h.o.}^{\rm NMS}$对于$^{np}p_{3/2}$ 态，使用扩展原子核的狄拉克-库仑波函数计算得出。符号与表I中相同。

Z	项	(2, 2)	(2, 3)	(2, 4)	(2, 5)	(3, 3)	(3, 4)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 5)	(5, 5)
5	c	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05
	tr1	−0.039 16	−0.038 65	−0.040 38	−0.041 32	−0.032 21	−0.032 43	−0.033 62	−0.029 01	−0.029 15	−0.027 24
	tr2	−0.047 51	−0.043 89	−0.043 11	−0.042 79	−0.046 28	−0.045 17	−0.044 83	−0.045 85	−0.045 36	−0.045 65
	tot	−0.086 71	−0.082 59	−0.083 54	−0.084 16	−0.078 54	−0.077 65	−0.078 50	−0.074 91	−0.074 56	−0.072 94
10	c	−0.000 13	−0.000 15	−0.000 15	−0.000 15	−0.000 16	−0.000 16	−0.000 16	−0.000 17	−0.000 17	−0.000 17
	tr1	−0.033 00	−0.032 50	−0.034 21	−0.035 13	−0.026 01	−0.026 22	−0.027 40	−0.022 79	−0.022 92	−0.021 01
	tr2	−0.042 60	−0.038 59	−0.037 74	−0.037 40	−0.040 29	−0.039 04	−0.038 65	−0.039 47	−0.038 92	−0.039 09
	tot	−0.075 73	−0.071 23	−0.072 10	−0.072 69	−0.066 46	−0.065 42	−0.066 22	−0.062 43	−0.062 01	−0.060 27
15	c	−0.000 25	−0.000 28	−0.000 28	−0.000 29	−0.000 30	−0.000 31	−0.000 31	−0.000 31	−0.000 32	−0.000 32
	tr1	−0.026 78	−0.026 30	−0.027 99	−0.028 90	−0.019 73	−0.019 93	−0.021 11	−0.016 48	−0.016 60	−0.014 68
	tr2	−0.038 14	−0.033 77	−0.032 88	−0.032 51	−0.034 83	−0.033 44	−0.033 03	−0.033 66	−0.033 04	−0.033 11
	tot	−0.065 17	−0.060 34	−0.061 15	−0.061 70	−0.054 85	−0.053 68	−0.054 44	−0.050 45	−0.049 96	−0.048 11
20	c	−0.000 39	−0.000 42	−0.000 43	−0.000 44	−0.000 46	−0.000 47	−0.000 47	−0.000 48	−0.000 48	−0.000 49
	tr1	−0.020 51	−0.020 04	−0.021 73	−0.022 64	−0.013 37	−0.013 57	−0.014 74	−0.010 08	−0.010 20	−0.008 26
	tr2	−0.034 03	−0.029 34	−0.028 41	−0.028 03	−0.029 79	−0.028 28	−0.027 84	−0.028 28	−0.027 60	−0.027 58
	tot	−0.054 93	−0.049 80	−0.050 57	−0.051 10	−0.043 61	−0.042 31	−0.043 05	−0.038 84	−0.038 29	−0.036 33
25	c	−0.000 53	−0.000 58	−0.000 59	−0.000 59	−0.000 62	−0.000 64	−0.000 64	−0.000 65	−0.000 66	−0.000 67
	tr1	−0.014 18	−0.013 74	−0.015 42	−0.016 33	−0.006 93	−0.007 12	−0.008 29	−0.003 59	−0.003 70	−0.001 74
	tr2	−0.030 25	−0.025 26	−0.024 29	−0.023 90	−0.025 11	−0.023 48	−0.023 02	−0.023 28	−0.022 55	−0.022 43
	tot	−0.044 97	−0.039 57	−0.040 30	−0.040 83	−0.032 66	−0.031 24	−0.031 95	−0.027 52	−0.026 91	−0.024 84
30	c	−0.000 68	−0.000 73	−0.000 75	−0.000 76	−0.000 79	−0.000 81	−0.000 82	−0.000 83	−0.000 84	−0.000 84
	tr1	−0.007 80	−0.007 37	−0.009 06	−0.009 98	−0.000 39	−0.000 57	−0.001 75	0.003 02	0.002 91	0.004 90
	tr2	−0.026 77	−0.021 49	−0.020 49	−0.020 10	−0.020 77	−0.019 03	−0.018 54	−0.018 63	−0.017 84	−0.017 63
	tot	−0.035 25	−0.029 59	−0.030 31	−0.030 83	−0.021 95	−0.020 41	−0.021 11	−0.016 44	−0.015 77	−0.013 58
35	c	−0.000 83	−0.000 89	−0.000 91	−0.000 92	−0.000 96	−0.000 98	−0.000 99	−0.001 01	−0.001 02	−0.001 03
	tr1	−0.001 34	−0.000 92	−0.002 63	−0.003 56	0.006 27	0.006 10	0.004 92	0.009 77	0.009 66	0.011 68
	tr2	−0.023 58	−0.018 02	−0.017 00	−0.016 60	−0.016 74	−0.014 89	−0.014 39	−0.014 30	−0.013 45	−0.013 16
	tot	−0.025 75	−0.019 84	−0.020 55	−0.021 08	−0.011 43	−0.009 77	−0.010 46	−0.005 54	−0.004 81	−0.002 50
40	c	−0.000 97	−0.001 05	−0.001 07	−0.001 08	−0.001 13	−0.001 16	−0.001 17	−0.001 18	−0.001 19	−0.001 20
	tr1	0.005 20	0.005 62	0.003 89	0.002 95	0.013 08	0.012 93	0.011 73	0.016 68	0.016 58	0.018 65
	tr2	−0.020 67	−0.014 85	−0.013 81	−0.013 41	−0.013 02	−0.011 06	−0.010 54	−0.010 27	−0.009 38	−0.008 99
	tot	−0.016 45	−0.010 28	−0.011 00	−0.011 54	−0.001 07	0.000 71	0.000 02	0.005 22	0.006 01	0.008 45
45	c	−0.001 12	−0.001 21	−0.001 23	−0.001 24	−0.001 30	−0.001 33	−0.001 34	−0.001 36	−0.001 37	−0.001 38
	tr1	0.011 84	0.012 28	0.010 52	0.009 56	0.020 07	0.019 94	0.018 72	0.023 80	0.023 71	0.025 82
	tr2	−0.018 06	−0.011 98	−0.010 92	−0.010 51	−0.009 60	−0.007 54	−0.007 00	−0.006 56	−0.005 61	−0.005 14
	tot	−0.007 34	−0.000 90	−0.001 64	−0.002 19	0.009 17	0.011 07	0.010 38	0.015 88	0.016 73	0.019 30
50	c	−0.001 27	−0.001 36	−0.001 39	−0.001 40	−0.001 47	−0.001 50	−0.001 51	−0.001 53	−0.001 55	−0.001 56
	tr1	0.018 61	0.019 10	0.017 29	0.016 31	0.027 27	0.027 17	0.025 93	0.031 16	0.031 08	0.033 26
	tr2	−0.015 74	−0.009 41	−0.008 34	−0.007 93	−0.006 48	−0.004 32	−0.003 77	−0.003 15	−0.002 16	−0.001 60
	tot	0.001 60	0.008 33	0.007 57	0.006 98	0.019 32	0.021 35	0.020 64	0.026 48	0.027 38	0.030 10
55	c	−0.001 41	−0.001 52	−0.001 55	−0.001 56	−0.001 63	−0.001 67	−0.001 68	−0.001 71	−0.001 72	−0.001 74
	tr1	0.025 52	0.026 08	0.024 24	0.023 22	0.034 73	0.034 66	0.033 40	0.038 81	0.038 75	0.041 00
	tr2	−0.013 74	−0.007 15	−0.006 06	−0.005 65	−0.003 69	−0.001 42	−0.000 86	−0.000 06	0.000 98	0.001 63
	tot	0.010 37	0.017 42	0.016 63	0.016 01	0.029 40	0.031 57	0.030 86	0.037 05	0.038 01	0.040 89
60	c	−0.001 56	−0.001 67	−0.001 71	−0.001 72	−0.001 80	−0.001 84	−0.001 86	−0.001 88	−0.001 90	−0.001 92
	tr1	0.032 61	0.033 28	0.031 39	0.030 34	0.042 48	0.042 47	0.041 18	0.046 81	0.046 77	0.049 09
	tr2	−0.012 07	−0.005 21	−0.004 12	−0.003 70	−0.001 22	0.001 15	0.001 72	0.002 70	0.003 79	0.004 52
	tot	0.018 99	0.026 40	0.025 57	0.024 91	0.039 46	0.041 78	0.041 04	0.047 63	0.048 66	0.051 70
65	c	−0.001 70	−0.001 83	−0.001 87	−0.001 88	−0.001 97	−0.002 02	−0.002 03	−0.002 06	−0.002 08	−0.002 10
	tr1	0.039 90	0.040 73	0.038 79	0.037 69	0.050 59	0.050 65	0.049 33	0.055 21	0.055 20	0.057 62
	tr2	−0.010 74	−0.003 62	−0.002 51	−0.002 10	0.000 89	0.003 36	0.003 95	0.005 11	0.006 24	0.007 06
	tot	0.027 46	0.035 28	0.034 41	0.033 71	0.049 51	0.052 00	0.051 25	0.058 26	0.059 36	0.062 58
70	c	−0.001 85	−0.001 99	−0.002 03	−0.002 04	−0.002 15	−0.002 19	−0.002 21	−0.002 24	−0.002 26	−0.002 28
	tr1	0.047 42	0.048 47	0.046 47	0.045 33	0.059 10	0.059 26	0.057 91	0.064 08	0.064 10	0.066 63
	tr2	−0.009 78	−0.002 40	−0.001 27	−0.000 86	0.002 62	0.005 20	0.005 80	0.007 14	0.008 32	0.009 22
	tot	0.035 80	0.044 09	0.043 17	0.042 43	0.059 58	0.062 27	0.061 50	0.068 97	0.070 16	0.073 57
75	c	−0.002 00	−0.002 15	−0.002 19	−0.002 21	−0.002 32	−0.002 37	−0.002 39	−0.002 43	−0.002 45	−0.002 47
	tr1	0.055 20	0.056 54	0.054 49	0.053 29	0.068 09	0.068 37	0.066 99	0.073 49	0.073 56	0.076 21
	tr2	−0.009 21	−0.001 56	−0.000 42	0.000 00	0.003 95	0.006 64	0.007 25	0.008 76	0.010 00	0.010 98
	tot	0.044 00	0.052 83	0.051 88	0.051 08	0.069 72	0.072 64	0.071 84	0.079 82	0.081 11	0.084 72
80	c	−0.002 15	−0.002 31	−0.002 36	−0.002 37	−0.002 51	−0.002 56	−0.002 58	−0.002 62	−0.002 64	−0.002 66
	tr1	0.063 29	0.065 00	0.062 90	0.061 64	0.077 62	0.078 05	0.076 64	0.083 52	0.083 65	0.086 45
	tr2	−0.009 05	−0.001 15	0.000 01	0.000 44	0.004 84	0.007 63	0.008 25	0.009 94	0.011 22	0.012 29
	tot	0.052 09	0.061 54	0.060 56	0.059 70	0.079 95	0.083 12	0.082 31	0.090 84	0.092 23	0.096 07
85	c	−0.002 30	−0.002 48	−0.002 53	−0.002 55	−0.002 70	−0.002 76	−0.002 78	−0.002 82	−0.002 84	−0.002 87
	tr1	0.071 71	0.073 90	0.071 75	0.070 43	0.087 76	0.088 39	0.086 95	0.094 27	0.094 48	0.097 44
	tr2	−0.009 36	−0.001 19	0.000 00	0.000 43	0.005 24	0.008 14	0.008 77	0.010 63	0.011 96	0.013 10
	tot	0.060 05	0.070 23	0.069 22	0.068 31	0.090 30	0.093 77	0.092 94	0.102 08	0.103 59	0.107 68
90	c	−0.002 46	−0.002 66	−0.002 71	−0.002 73	−0.002 90	−0.002 96	−0.002 99	−0.003 03	−0.003 06	−0.003 08
	tr1	0.080 50	0.083 29	0.081 11	0.079 72	0.098 59	0.099 47	0.098 01	0.105 82	0.106 12	0.109 28
	tr2	−0.010 14	−0.001 73	−0.000 51	−0.000 06	0.005 10	0.008 10	0.008 75	0.010 76	0.012 14	0.013 36
	tot	0.067 89	0.078 90	0.077 89	0.076 92	0.100 79	0.104 61	0.103 77	0.113 55	0.115 21	0.119 56
95	c	−0.002 63	−0.002 85	−0.002 91	−0.002 93	−0.003 11	−0.003 18	−0.003 21	−0.003 26	−0.003 28	−0.003 31
	tr1	0.089 69	0.093 24	0.091 04	0.089 58	0.110 20	0.111 39	0.109 92	0.118 28	0.118 71	0.122 08
	tr2	−0.011 46	−0.002 80	−0.001 55	−0.001 09	0.004 36	0.007 46	0.008 12	0.010 29	0.011 71	0.013 01
	tot	0.075 61	0.087 59	0.086 59	0.085 56	0.111 45	0.115 67	0.114 83	0.125 31	0.127 14	0.131 77
100	c	−0.002 81	−0.003 05	−0.003 11	−0.003 13	−0.003 34	−0.003 42	−0.003 44	−0.003 50	−0.003 53	−0.003 56
	tr1	0.099 35	0.103 82	0.101 63	0.100 10	0.122 68	0.124 27	0.122 80	0.131 78	0.132 36	0.135 97
	tr2	−0.013 34	−0.004 48	−0.003 18	−0.002 70	0.002 95	0.006 14	0.006 82	0.009 11	0.010 58	0.011 94
	tot	0.083 20	0.096 29	0.095 34	0.094 26	0.122 30	0.127 00	0.126 17	0.137 39	0.139 41	0.144 35

表 IV. 算符 $h_{\rm h.o.}^{\rm NMS}$针对 $nd_{3/2}$ 态的矩阵元，使用扩展原子核的狄拉克-库仑波函数计算。符号与表I中的相同。

Z	项	(3, 3)	(3, 4)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 5)	(5, 5)
5	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.009 32	−0.009 18	−0.009 69	−0.008 14	−0.008 40	−0.007 46
	tr2	−0.009 38	−0.007 96	−0.007 56	−0.009 08	−0.008 53	−0.008 94
	tot	−0.018 70	−0.017 13	−0.017 26	−0.017 22	−0.016 93	−0.016 39
10	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.008 96	−0.008 89	−0.009 44	−0.007 89	−0.008 17	−0.007 25
	tr2	−0.008 14	−0.006 64	−0.006 24	−0.007 53	−0.006 94	−0.007 24
	tot	−0.017 10	−0.015 53	−0.015 68	−0.015 41	−0.015 11	−0.014 50
15	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.008 62	−0.008 64	−0.009 21	−0.007 66	−0.007 98	−0.007 07
	tr2	−0.006 88	−0.005 31	−0.004 91	−0.005 96	−0.005 33	−0.005 54
	tot	−0.015 50	−0.013 95	−0.014 12	−0.013 62	−0.013 31	−0.012 61
20	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	−0.000 01
	tr1	−0.008 30	−0.008 40	−0.009 00	−0.007 45	−0.007 80	−0.006 91
	tr2	−0.005 61	−0.003 97	−0.003 57	−0.004 38	−0.003 71	−0.003 82
	tot	−0.013 92	−0.012 38	−0.012 58	−0.011 84	−0.011 51	−0.010 73
25	c	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01
	tr1	−0.007 99	−0.008 18	−0.008 81	−0.007 24	−0.007 63	−0.006 76
	tr2	−0.004 33	−0.002 62	−0.002 22	−0.002 79	−0.002 08	−0.002 08
	tot	−0.012 33	−0.010 81	−0.011 04	−0.010 05	−0.009 72	−0.008 85
30	c	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 02	−0.000 02
	tr1	−0.007 69	−0.007 97	−0.008 64	−0.007 05	−0.007 47	−0.006 61
	tr2	−0.003 04	−0.001 25	−0.000 85	−0.001 18	−0.000 42	−0.000 32
	tot	−0.010 74	−0.009 23	−0.009 51	−0.008 25	−0.007 91	−0.006 95
35	c	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 03
	tr1	−0.007 39	−0.007 76	−0.008 48	−0.006 85	−0.007 32	−0.006 46
	tr2	−0.001 73	0.000 13	0.000 53	0.000 45	0.001 25	0.001 45
	tot	−0.009 13	−0.007 65	−0.007 97	−0.006 43	−0.006 09	−0.005 03
40	c	−0.000 02	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 04	−0.000 04
	tr1	−0.007 08	−0.007 56	−0.008 31	−0.006 65	−0.007 15	−0.006 30
	tr2	−0.000 41	0.001 53	0.001 93	0.002 10	0.002 95	0.003 26
	tot	−0.007 51	−0.006 05	−0.006 41	−0.004 59	−0.004 24	−0.003 08
45	c	−0.000 03	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05
	tr1	−0.006 77	−0.007 34	−0.008 15	−0.006 43	−0.006 98	−0.006 12
	tr2	0.000 94	0.002 96	0.003 35	0.003 78	0.004 68	0.005 09
	tot	−0.005 87	−0.004 42	−0.004 83	−0.002 70	−0.002 35	−0.001 08
50	c	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 06	−0.000 06	−0.000 07	−0.000 07
	tr1	−0.006 44	−0.007 11	−0.007 97	−0.006 19	−0.006 78	−0.005 91
	tr2	0.002 30	0.004 40	0.004 80	0.005 49	0.006 43	0.006 96
	tot	−0.004 18	−0.002 76	−0.003 23	−0.000 77	−0.000 41	0.000 98
55	c	−0.000 06	−0.000 07	−0.000 08	−0.000 08	−0.000 09	−0.000 09
	tr1	−0.006 09	−0.006 86	−0.007 77	−0.005 92	−0.006 54	−0.005 66
	tr2	0.003 69	0.005 88	0.006 27	0.007 23	0.008 23	0.008 86
	tot	−0.002 46	−0.001 05	−0.001 58	0.001 24	0.001 60	0.003 11
60	c	−0.000 08	−0.000 09	−0.000 10	−0.000 11	−0.000 11	−0.000 12
	tr1	−0.005 70	−0.006 57	−0.007 55	−0.005 59	−0.006 26	−0.005 36
	tr2	0.005 11	0.007 38	0.007 77	0.009 02	0.010 06	0.010 81
	tot	−0.000 68	0.000 72	0.000 13	0.003 32	0.003 69	0.005 33
65	c	−0.000 10	−0.000 12	−0.000 12	−0.000 13	−0.000 14	−0.000 15
	tr1	−0.005 28	−0.006 24	−0.007 28	−0.005 21	−0.005 92	−0.004 99
	tr2	0.006 55	0.008 92	0.009 31	0.010 84	0.011 94	0.012 81
	tot	0.001 17	0.002 56	0.001 90	0.005 50	0.005 88	0.007 67
70	c	−0.000 12	−0.000 14	−0.000 15	−0.000 17	−0.000 18	−0.000 19
	tr1	−0.004 80	−0.005 85	−0.006 96	−0.004 75	−0.005 49	−0.004 52
	tr2	0.008 02	0.010 49	0.010 87	0.012 72	0.013 86	0.014 86
	tot	0.003 10	0.004 50	0.003 76	0.007 79	0.008 20	0.010 15
75	c	−0.000 15	−0.000 18	−0.000 19	−0.000 20	−0.000 22	−0.000 23
	tr1	−0.004 26	−0.005 38	−0.006 57	−0.004 20	−0.004 96	−0.003 94
	tr2	0.009 53	0.012 10	0.012 48	0.014 63	0.015 84	0.016 96
	tot	0.005 12	0.006 54	0.005 73	0.010 23	0.010 66	0.012 79
80	c	−0.000 18	−0.000 21	−0.000 23	−0.000 25	−0.000 26	−0.000 28
	tr1	−0.003 63	−0.004 82	−0.006 08	−0.003 52	−0.004 30	−0.003 22
	tr2	0.011 07	0.013 74	0.014 12	0.016 60	0.017 87	0.019 12
	tot	0.007 26	0.008 71	0.007 81	0.012 84	0.013 30	0.015 62
85	c	−0.000 22	−0.000 26	−0.000 27	−0.000 30	−0.000 32	−0.000 33
	tr1	−0.002 89	−0.004 13	−0.005 48	−0.002 68	−0.003 47	−0.002 31
	tr2	0.012 64	0.015 42	0.015 80	0.018 62	0.019 94	0.021 33
	tot	0.009 52	0.011 03	0.010 05	0.015 64	0.016 16	0.018 69
90	c	−0.000 26	−0.000 31	−0.000 32	−0.000 36	−0.000 38	−0.000 40
	tr1	−0.002 02	−0.003 29	−0.004 72	−0.001 65	−0.002 44	−0.001 17
	tr2	0.014 23	0.017 14	0.017 51	0.020 68	0.022 07	0.023 59
	tot	0.011 95	0.013 54	0.012 47	0.018 68	0.019 26	0.022 03
95	c	−0.000 31	−0.000 36	−0.000 38	−0.000 42	−0.000 45	−0.000 47
	tr1	−0.001 00	−0.002 26	−0.003 77	−0.000 38	−0.001 14	0.000 25
	tr2	0.015 85	0.018 89	0.019 25	0.022 79	0.024 24	0.025 90
	tot	0.014 55	0.016 26	0.015 10	0.021 99	0.022 65	0.025 68
100	c	−0.000 37	−0.000 43	−0.000 45	−0.000 50	−0.000 52	−0.000 55
	tr1	0.000 23	−0.000 98	−0.002 57	0.001 19	0.000 48	0.002 02
	tr2	0.017 49	0.020 65	0.021 01	0.024 92	0.026 44	0.028 25
	tot	0.017 35	0.019 24	0.017 98	0.025 62	0.026 39	0.029 72

表 V. 对于扩展原子核，使用狄拉克-库仑波函数计算的 $h_{\mathrm{h.o.}}^{\mathrm{NMS}}$态的 $nd_{5/2}$ 算符的矩阵元。符号与表I中相同。

Z	项	(3, 3)	(3, 4)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 5)	(5, 5)
5	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.008 63	−0.008 46	−0.008 96	−0.007 37	−0.007 61	−0.006 65
	tr2	−0.010 06	−0.008 65	−0.008 26	−0.009 84	−0.009 31	−0.009 74
	tot	−0.018 69	−0.017 11	−0.017 22	−0.017 21	−0.016 92	−0.016 39
10	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.007 56	−0.007 44	−0.007 94	−0.006 32	−0.006 56	−0.005 60
	tr2	−0.009 51	−0.008 04	−0.007 66	−0.009 07	−0.008 51	−0.008 87
	tot	−0.017 07	−0.015 48	−0.015 60	−0.015 39	−0.015 08	−0.014 48
15	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.006 50	−0.006 42	−0.006 93	−0.005 27	−0.005 52	−0.004 56
	tr2	−0.008 96	−0.007 43	−0.007 05	−0.008 31	−0.007 72	−0.008 01
	tot	−0.015 45	−0.013 85	−0.013 98	−0.013 58	−0.013 25	−0.012 57
20	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00	0.000 00
	tr1	−0.005 43	−0.005 40	−0.005 92	−0.004 21	−0.004 48	−0.003 51
	tr2	−0.008 41	−0.006 83	−0.006 46	−0.007 56	−0.006 94	−0.007 16
	tot	−0.013 84	−0.012 23	−0.012 38	−0.011 77	−0.011 42	−0.010 67
25	c	0.000 00	0.000 00	0.000 00	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01
	tr1	−0.004 36	−0.004 38	−0.004 91	−0.003 16	−0.003 44	−0.002 46
	tr2	−0.007 87	−0.006 24	−0.005 88	−0.006 81	−0.006 17	−0.006 32
	tot	−0.012 24	−0.010 63	−0.010 79	−0.009 98	−0.009 61	−0.008 79
30	c	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01
	tr1	−0.003 29	−0.003 36	−0.003 90	−0.002 10	−0.002 39	−0.001 40
	tr2	−0.007 34	−0.005 66	−0.005 30	−0.006 08	−0.005 41	−0.005 49
	tot	−0.010 64	−0.009 03	−0.009 21	−0.008 18	−0.007 81	−0.006 90
35	c	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01
	tr1	−0.002 22	−0.002 34	−0.002 89	−0.001 03	−0.001 33	−0.000 34
	tr2	−0.006 82	−0.005 10	−0.004 74	−0.005 36	−0.004 67	−0.004 68
	tot	−0.009 05	−0.007 44	−0.007 64	−0.006 40	−0.006 01	−0.005 03
40	c	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 01	−0.000 02	−0.000 02
	tr1	−0.001 14	−0.001 31	−0.001 87	0.000 05	−0.000 26	0.000 74
	tr2	−0.006 32	−0.004 54	−0.004 20	−0.004 66	−0.003 94	−0.003 88
	tot	−0.007 47	−0.005 87	−0.006 09	−0.004 62	−0.004 22	−0.003 16
45	c	−0.000 01	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02
	tr1	−0.000 06	−0.000 28	−0.000 85	0.001 13	0.000 81	0.001 83
	tr2	−0.005 83	−0.004 01	−0.003 67	−0.003 97	−0.003 23	−0.003 10
	tot	−0.005 90	−0.004 30	−0.004 54	−0.002 85	−0.002 44	−0.001 29
50	c	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 02	−0.000 03	−0.000 03
	tr1	0.001 04	0.000 76	0.000 17	0.002 23	0.001 90	0.002 93
	tr2	−0.005 35	−0.003 49	−0.003 16	−0.003 30	−0.002 54	−0.002 34
	tot	−0.004 33	−0.002 74	−0.003 01	−0.001 09	−0.000 66	0.000 57
55	c	−0.000 02	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03
	tr1	0.002 14	0.001 81	0.001 20	0.003 35	0.003 00	0.004 05
	tr2	−0.004 89	−0.002 98	−0.002 67	−0.002 65	−0.001 86	−0.001 59
	tot	−0.002 78	−0.001 20	−0.001 50	0.000 67	0.001 11	0.002 43
60	c	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 03	−0.000 04	−0.000 04
	tr1	0.003 25	0.002 87	0.002 24	0.004 48	0.004 12	0.005 19
	tr2	−0.004 45	−0.002 50	−0.002 20	−0.002 01	−0.001 20	−0.000 87
	tot	−0.001 23	0.000 34	0.000 01	0.002 43	0.002 88	0.004 29
65	c	−0.000 03	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 04
	tr1	0.004 37	0.003 94	0.003 29	0.005 62	0.005 25	0.006 35
	tr2	−0.004 03	−0.002 03	−0.001 74	−0.001 40	−0.000 57	−0.000 16
	tot	0.000 31	0.001 87	0.001 51	0.004 18	0.004 64	0.006 14
70	c	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 04	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05
	tr1	0.005 50	0.005 02	0.004 34	0.006 79	0.006 41	0.007 53
	tr2	−0.003 63	−0.001 59	−0.001 31	−0.000 80	0.000 05	0.000 53
	tot	0.001 83	0.003 39	0.002 99	0.005 94	0.006 41	0.008 01
75	c	−0.000 04	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 06	−0.000 06
	tr1	0.006 65	0.006 11	0.005 41	0.007 98	0.007 58	0.008 74
	tr2	−0.003 25	−0.001 17	−0.000 90	−0.000 23	0.000 65	0.001 19
	tot	0.003 35	0.004 90	0.004 46	0.007 69	0.008 17	0.009 87
80	c	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 05	−0.000 06	−0.000 06	−0.000 06
	tr1	0.007 81	0.007 22	0.006 50	0.009 19	0.008 78	0.009 97
	tr2	−0.002 90	−0.000 77	−0.000 51	0.000 32	0.001 22	0.001 83
	tot	0.004 86	0.006 40	0.005 93	0.009 44	0.009 94	0.011 74
85	c	−0.000 05	−0.000 06	−0.000 06	−0.000 07	−0.000 07	−0.000 07
	tr1	0.008 98	0.008 35	0.007 59	0.010 42	0.010 01	0.011 24
	tr2	−0.002 57	−0.000 39	−0.000 15	0.000 84	0.001 76	0.002 45
	tot	0.006 37	0.007 90	0.007 38	0.011 20	0.011 71	0.013 62
90	c	−0.000 06	−0.000 06	−0.000 07	−0.000 07	−0.000 08	−0.000 08
	tr1	0.010 18	0.009 49	0.008 71	0.011 69	0.011 27	0.012 54
	tr2	−0.002 26	−0.000 04	0.000 19	0.001 34	0.002 29	0.003 05
	tot	0.007 86	0.009 39	0.008 83	0.012 96	0.013 48	0.015 51
95	c	−0.000 06	−0.000 07	−0.000 07	−0.000 08	−0.000 08	−0.000 09
	tr1	0.011 39	0.010 66	0.009 84	0.012 99	0.012 56	0.013 88
	tr2	−0.001 98	0.000 29	0.000 50	0.001 81	0.002 78	0.003 62
	tot	0.009 35	0.010 87	0.010 26	0.014 72	0.015 26	0.017 40
100	c	−0.000 07	−0.000 08	−0.000 08	−0.000 09	−0.000 09	−0.000 10
	tr1	0.012 63	0.011 85	0.010 99	0.014 32	0.013 88	0.015 25
	tr2	−0.001 73	0.000 58	0.000 78	0.002 26	0.003 25	0.004 16
	tot	0.010 82	0.012 35	0.011 69	0.016 49	0.017 04	0.019 31

表 VI. $4s$、 $5s$、 $5p$和 $5d$ 态的高阶核反冲修正，以函数 F 表示，该函数由方程（35）定义。标为 $\langle\psi_v|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}|\psi_v\rangle$ 的列表示使用模型 QED 算符得到的结果， $\langle\psi_v|V_{\rm s.l.}|\psi_v\rangle$ 表示模型算符半局域部分的贡献，“精确”表示从头算得的数值。具有 ns 的 $n\leqslant 3$ 态，以及具有 np和 nd 的 $n\leqslant 4$ 态未列出，因为按照构造，算符$\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}$能够精确再现这些态对应的修正。

Z	态	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	精确	Z	态	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	精确
10	$4s$	1.2024	1.5325	1.5295	60	$4s$	0.8494	1.4804	1.4767
	$5s$	1.2017	1.5445	1.5397		$5s$	0.8394	1.4833	1.4772
	$5p_{1/2}$	−0.0922	−0.0545	−0.0558		$5p_{1/2}$	0.1282	0.1782	0.1765
	$5p_{3/2}$	−0.0965	−0.0590	−0.0603		$5p_{3/2}$	0.0221	0.0540	0.0517
	$5d_{3/2}$	−0.0279	−0.0157	−0.0145		$5d_{3/2}$	−0.0010	0.0058	0.0053
	$5d_{5/2}$	−0.0278	−0.0156	−0.0145		$5d_{5/2}$	−0.0019	0.0044	0.0043
20	$4s$	1.0162	1.3896	1.3865	70	$4s$	0.9227	1.6503	1.6463
	$5s$	1.0141	1.4010	1.3960		$5s$	0.9088	1.6475	1.6409
	$5p_{1/2}$	−0.0555	−0.0204	−0.0218		$5p_{1/2}$	0.1963	0.2652	0.2634
	$5p_{3/2}$	−0.0692	−0.0349	−0.0363		$5p_{3/2}$	0.0406	0.0762	0.0736
	$5d_{3/2}$	−0.0225	−0.0116	−0.0107		$5d_{3/2}$	0.0047	0.0110	0.0101
	$5d_{5/2}$	−0.0224	−0.0116	−0.0107		$5d_{5/2}$	0.0028	0.0084	0.0080
30	$4s$	0.9090	1.3357	1.3325	80	$4s$	1.0683	1.9249	1.9205
	$5s$	0.9053	1.3460	1.3408		$5s$	1.0478	1.9125	1.9055
	$5p_{1/2}$	−0.0162	0.0177	0.0162		$5p_{1/2}$	0.2880	0.3904	0.3885
	$5p_{3/2}$	−0.0437	−0.0119	−0.0136		$5p_{3/2}$	0.0578	0.0990	0.0961
	$5d_{3/2}$	−0.0172	−0.0075	−0.0069		$5d_{3/2}$	0.0108	0.0169	0.0156
	$5d_{5/2}$	−0.0171	−0.0076	−0.0069		$5d_{5/2}$	0.0073	0.0124	0.0117
40	$4s$	0.8484	1.3348	1.3314	90	$4s$	1.3278	2.3698	2.3650
	$5s$	0.8430	1.3436	1.3381		$5s$	1.2952	2.3406	2.3329
	$5p_{1/2}$	0.0262	0.0612	0.0596		$5p_{1/2}$	0.4244	0.5875	0.5855
	$5p_{3/2}$	−0.0200	0.0103	0.0084		$5p_{3/2}$	0.0739	0.1228	0.1195
	$5d_{3/2}$	−0.0119	−0.0033	−0.0031		$5d_{3/2}$	0.0173	0.0236	0.0220
	$5d_{5/2}$	−0.0119	−0.0036	−0.0032		$5d_{5/2}$	0.0117	0.0165	0.0155
50	$4s$	0.8280	1.3813	1.3777	100	$4s$	1.7885	3.1190	3.1142
	$5s$	0.8206	1.3877	1.3820		$5s$	1.7322	3.0568	3.0496
	$5p_{1/2}$	0.0733	0.1131	0.1115		$5p_{1/2}$	0.6515	0.9319	0.9297
	$5p_{3/2}$	0.0019	0.0322	0.0301		$5p_{3/2}$	0.0889	0.1478	0.1444
	$5d_{3/2}$	−0.0065	0.0011	0.0010		$5d_{3/2}$	0.0246	0.0317	0.0297
	$5d_{5/2}$	−0.0068	0.0004	0.0006		$5d_{5/2}$	0.0158	0.0206	0.0193

表 VII. 中性碱金属中价层 ns 电子超出布赖特近似的单电子核反冲修正，以函数 F 表示，该函数由方程（35）定义。标签 CH 和 $x_\alpha = 0$、1/3、2/3 和 1 分别对应不同的有效势。详情见正文。

Atom	方法	CH	$x_\alpha = 0$	$x_\alpha = 1/3$	$x_\alpha = 2/3$	$x_\alpha = 1$
钠 $3s$	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	0.0502	0.0446	0.0437	0.0473	0.0575
	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	0.0581	0.0516	0.0508	0.0553	0.0676
	精确	0.0561	0.0499	0.0496	0.0544	0.0671
K $4s$	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	0.0255	0.0214	0.0213	0.0243	0.0319
	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	0.0313	0.0263	0.0264	0.0302	0.0400
	精确	0.0311	0.0261	0.0263	0.0302	0.0401
铷 $5s$	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	0.0100	0.0080	0.0082	0.0098	0.0136
	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	0.0141	0.0112	0.0116	0.0140	0.0195
	精确	0.0142	0.0113	0.0117	0.0141	0.0197
铯 $6s$	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	0.00645	0.00504	0.00525	0.00642	0.00927
	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	0.01019	0.00796	0.00835	0.01026	0.01490
	精确	0.01028	0.00803	0.00841	0.01034	0.01500
钫 $7s$	$\langle\psi_v\|V_{\rm s.l.}\|\psi_v\rangle$	0.00586	0.00416	0.00457	0.00595	0.00906
	$\langle\psi_v\|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}\|\psi_v\rangle$	0.00999	0.00708	0.00782	0.01022	0.01563
	精确	0.01004	0.00712	0.00786	0.01026	0.01568

该算符能够精确再现这些态的 QED 反冲贡献。因此，可以将该算符用于计算主量子数更高的态的相应修正，以检验其“预测能力”。表 VI列出了氢样离子中 $4s$、 $5s$、 $5p_{1/2}$、 $5p_{3/2}$、 $5d_{3/2}$ 和 $5d_{5/2}$ 态的布赖特近似以外的核反冲贡献。标记为 $\langle\psi_v|V_{\rm s.l.}|\psi_v\rangle$ 和 $\langle\psi_v|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}|\psi_v\rangle$ 的列分别给出了采用模型QED算符的半局域部分（29）和完整模型QED算符（28）得到的预测值。这些数值与表 I-V中的从头计算结果进行了比较，并列于最后一列。可以看出，数据总体上吻合良好，尤其是对于 s态。我们强调模型QED算符非局域部分的重要性。对于 np态和 nd 态，函数 $F_{n_i n_k}$ 在 Z的中间取值处改变符号，因此在那里绝对值较小。结果，模型QED算符预测的相对精度在这些区域略有下降。

迄今为止，多电子体系中正常质量位移的 QED 贡献通常是在扩展弗里图像下，采用独立电子近似进行计算和评估的，参见例如文献 [4, 10, 84]。为展示所提出的模型量子电动力学算符方法的表现，我们将其用于评估核反冲效应对中性碱金属价电子能量的影响。首先，我们使用局域有效势，对 从头计算 其 ns 态的单电子贡献，所用方法 V 如方程（5）所示。我们采用附录 C中讨论的核哈特里（CH）势和 x_α 势。从头计算得到的正常质量位移 QED 贡献列于表 VII 中标记为“精确”的行。模型QED算符的数值通过将算符（28）与由狄拉克方程（5）确定的价电子波函数取平均得到，其中势 V 由方程（C3）给出。除完整模型算符的预测值 $\langle\psi_v|\tilde{h}^{\rm NMS}_{\rm h.o.}|\psi_v\rangle$外，还列出了 $\langle\psi_v|V_{\rm s.l.}|\psi_v\rangle$ 仅采用半局域部分（29）得到的结果。如表 VII所示，对于所有碱金属，近似值与精确值均吻合良好。因此，基于氢样离子计算建立的模型QED算符，在非类氢情形下也能取得合理效果。

最后，在结束对碱金属的讨论时，我们注意到，与文献[122], 中的情况一样，最终结果对初始近似中所选势的依赖性很强。结果的离散显然与对电子间相互作用效应的近似处理有关。我们认为，将所发展的核反冲效应模型QED算符与处理电子关联的标准方法相结合，将有助于实现更精确的评估。然而，此类计算超出了本文的范围。我们将使用核反冲效应模型QED算符进行系统计算留待今后研究。

五、结论

本文提出了模型量子电动力学算符方法，用于处理超越布赖特近似的多电子原子系统束缚能核反冲效应。该方法与先前提出的、用于近似计算能级辐射修正的方法类似 [46]。所构建的算符可轻松纳入任何基于狄拉克-库仑-布赖特哈密顿量的相对论计算中。

通过将模型QED算符的预测与严格QED计算的结果进行比较，验证了该方法的性能。

VI. 致谢

本研究得到“BASIS”理论物理与数学促进基金会、俄罗斯基础研究基金会和俄罗斯国家原子能公司的支持，项目编号为 20-21-00098。I.S.A. 的研究工作得到德俄跨学科科学中心（G-RISC）的支持；该中心由德国联邦外交部通过德国学术交流中心（DAAD）资助。

附录 A：准简并能级束缚能中核反冲效应的单电子和双电子贡献

在本附录中，我们将利用双时格林函数（TTGF）方法推导核反冲效应对束缚能的贡献的完全相对论表达式[96]。设所考虑的两个态的未微扰波函数分别为 $|u_i\rangle$ 和 $|u_k\rangle$。在推导过程中，我们假设$E_i^{(0)}$ 和 $E_k^{(0)}$ 这两个态对应的未微扰能量不同，因此 $|u_i\rangle \neq |u_k\rangle$。然而，所有得到的表达式在能量相同的情况下也成立；当然，对于对角矩阵元，它们将归结为表达式（8）和（17）。为推导这些公式，我们引入由态 $|u_i\rangle$ 和 $|u_k\rangle$张成的模型子空间 Ω，并针对这些态构造准简并能级的 QED 微扰理论。Ω 上的投影算符为

$$P^{(0)} = |u_i\rangle\langle u_i| + |u_k\rangle\langle u_k| \,. \tag{A1}$$

该推导过程可以很容易地推广到任意数量的准简并能级。

首先，我们回顾一下 TTGF 方法应用于准简并能级时的基本思想。关于该方法的详细说明，可参见文献 [96,109, 126]。 N电子 TTGF 定义为

$$G(t',t;\boldsymbol{r}'_1,\ldots,\boldsymbol{r}'_N;\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) = \langle 0|T\psi(x'_1)\cdots\psi(x'_N)\bar{\psi}(x_N)\cdots\bar{\psi}(x_1)|0\rangle \Big|_{\substack{t'^0_1=\ldots=t'^0_N\equiv t' \\ t^0_1=\ldots=t^0_N\equiv t}} , \tag{A2}$$

其中， ψ 是海森堡表象中的电子-正电子场算符， $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$,$x = (t^0, \boldsymbol{r})$，而 T 是时间序算符。转到混合表象后，可得

$$\mathcal{G}(E; \boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_N; \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)\delta(E - E') = \frac{1}{2\pi i}\frac{1}{N!}\int_{-\infty}^{\infty} dt dt' \; e^{iE't' - iEt}\, G(t', t; \boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_N; \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)\,. \tag{A3}$$

采用 $P^{(0)}$，我们可以引入格林函数（A3）在子空间 Ω 上的投影，

$$g(E) = P^{(0)}\mathcal{G}(E)\gamma_1^0 \ldots \gamma_N^0 P^{(0)}\,, \tag{A4}$$

ˆ ˆ 随后确定 K 和 P 算符：

$$\hat{K} \equiv \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma dE \; Eg(E)\,, \tag{A5}$$

$$\hat{P} \equiv \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma dE \; g(E)\,. \tag{A6}$$

逆时针取向的围道 Γ 在复数 E 平面上包围对应于准简并能级的极点，并将 $g(E)$的所有其他奇点排除在外。ˆ 所研究的系统由有效算符 H 完整描述，其定义为

$$\hat{H} = \hat{P}^{-1/2}\,\hat{K}\,\hat{P}^{-1/2}\,. \tag{A7}$$

格林函数（A2）的微扰理论导出算符 H的微扰级数。

在 m/M的一阶近似下，核反冲效应由图 1 和图 2 所示的一电子和二电子费曼图描述。这些图的费曼规则已在例如文献 [26], 中给出，另见文献 [96]。算符 H的一阶贡献可表示为

$$\hat{H}^{(1)} = \hat{K}^{(1)} - \frac{1}{2}\hat{P}^{(1)}\hat{K}^{(0)} - \frac{1}{2}\hat{K}^{(0)}\hat{P}^{(1)}\,, \tag{A8}$$

其中上标表示展开参数的各阶。核反冲效应的贡献由算符（A8）在未受扰动函数 $|u_i\rangle$ 和 $|u_k\rangle$的基中的矩阵元决定：

$$H^{(1)}_{ik} \equiv \langle u_i|\hat{H}^{(1)}|u_k\rangle\,. \tag{A9}$$

在零阶近似下，算符 $\hat{}K$ 的矩阵为对角矩阵，$K_{ik}^{(0)} = E_i^{(0)}\delta_{ik}$。因此，可以得到

$$H_{ik}^{(1)} = K_{ik}^{(1)} - \frac{E_i^{(0)} + E_k^{(0)}}{2} P_{ik}^{(1)} \,. \tag{A10}$$

现在，我们直接推导关于核反冲效应对束缚能影响的所需非微扰（在 αZ 中）公式。我们从图 1 中各图对应的单电子（正常质量位移）贡献开始。在这种情况下，$N = 1$ 和未微扰波函数 $|u_i\rangle$、$|u_k\rangle$ 以及能量 $E_i^{(0)}$、$E_k^{(0)}$ 分别由狄拉克本征函数和本征值给出，见公式（5）。当前推导与图 3 所示自能图的推导类似。应用费曼规则 [26], ，可以得到格林函数 $\Delta g^{(1)}{}_{\text{正常质量位移}}(E)$ 在子空间 Ω [96] 上的投影矩阵元表达式:

$$\Delta g^{(1)}_{\mathrm{NMS},ik}(E) = \frac{\langle\psi_i|\mathrm{P}(E)|\psi_k\rangle}{(E-\varepsilon_i)(E-\varepsilon_k)} \,, \tag{A11}$$

其中算符 P 在公式（9）中定义。相应的贡献对 K 和 P 算符可写为:

$$K^{(1)}_{\mathrm{NMS},ik} = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma dE\, E\, \Delta g^{(1)}_{\mathrm{NMS},ik}(E) = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_i-\varepsilon_k}\langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_i)|\psi_k\rangle + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_k-\varepsilon_i}\langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_k)|\psi_k\rangle \,, \tag{A12}$$

$$P^{(1)}_{\mathrm{NMS},ik} = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma dE\, \Delta g^{(1)}_{\mathrm{NMS},ik}(E) = \frac{1}{\varepsilon_i-\varepsilon_k}\langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_i)|\psi_k\rangle + \frac{1}{\varepsilon_k-\varepsilon_i}\langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_k)|\psi_k\rangle \,. \tag{A13}$$

将方程（A12）和（A13）代入公式（A10），最终得到正常质量位移贡献

$$H_{\mathrm{NMS},ik} = \frac{1}{2}\Big[\langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_i)|\psi_k\rangle + \langle\psi_i|\mathrm{P}(\varepsilon_k)|\psi_k\rangle\Big] \,. \tag{A14}$$

关于图中双电子（SMS）贡献的非微扰（在 αZ方面）表达式的推导同样直接，但更加繁琐。对于这种情况，$N = 2$ 为简便起见，我们假设未微扰波函数 $|u_i\rangle$ 和 $|u_k\rangle$ 分别由单行列式波函数 $\Psi_{i_1 i_2}$ 和 $\Psi_{k_1 k_2}$给出，见式（16）。相应的未微扰能量等于 $E_i^{(0)} = \varepsilon_{i_1} + \varepsilon_{i_2}$ 和 $E_k^{(0)} = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2}$。推导过程与图 5中单光子交换图的推导相同。格林

函数 $\Delta g^{(1)}{}_{\mathrm{SMS}}(E)$ 在子空间 Ω 上的投影可写为 [26, 96]

$$\Delta g^{(1)}_{\mathrm{SMS},ik}(E) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int dp_1 dp_1' \sum_P (-1)^P \langle \psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(p_1-p_1')|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle \times \frac{1}{(p_1'-\varepsilon_{Pi_1}+i0)(E-p_1'-\varepsilon_{Pi_2}+i0)} \frac{1}{(p_1-\varepsilon_{k_1}+i0)(E-p_1-\varepsilon_{k_2}+i0)}, \tag{A15}$$

其中算符 R 由式（10）定义。利用单位矩阵

$$\frac{1}{(p_1'-\varepsilon_{Pi_1}+i0)(E-p_1'-\varepsilon_{Pi_2}+i0)} = \frac{1}{E-E_i^{(0)}}\left(\frac{1}{p_1'-\varepsilon_{Pi_1}+i0}+\frac{1}{E-p_1'-\varepsilon_{Pi_2}+i0}\right) \tag{A16}$$

对式（A15）中的第二对分母也采用类似处理，即可明确分离出位于围道 Γ内的格林函数极点。于是，ˆ该 K 算符的贡献为

$$\begin{aligned} K^{(1)}_{\mathrm{SMS},ik} &= \oint_\Gamma dE\, E\, \Delta g^{(1)}_{\mathrm{SMS},ik}(E) \\ &= \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int dp_1 dp_1' \sum_P (-1)^P \langle \psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(p_1-p_1')|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle \\ &\times \left\{ \frac{E_i^{(0)}}{E_i^{(0)}-E_k^{(0)}}\left(\frac{2\pi}{i}\delta(p_1'-\varepsilon_{Pi_1})\right)\left(\frac{1}{p_1-\varepsilon_{k_1}+i0}+\frac{1}{E_i^{(0)}-p_1-\varepsilon_{k_2}+i0}\right) \right. \\ &\left. + \frac{E_k^{(0)}}{E_k^{(0)}-E_i^{(0)}}\left(\frac{1}{p_1'-\varepsilon_{Pi_1}+i0}+\frac{1}{E_k^{(0)}-p_1'-\varepsilon_{Pi_2}+i0}\right)\left(\frac{2\pi}{i}\delta(p_1-\varepsilon_{k_1})\right) \right\}, \end{aligned} \tag{A17}$$

其中单位矩阵

$$\frac{1}{p-\varepsilon+i0}+\frac{1}{-p+\varepsilon+i0} = \frac{2\pi}{i}\delta(p-\varepsilon) \tag{A18}$$

被采用。定义系数 A 和 B 使得 $K^{(1)}{}_{\mathrm{SMS}\,ik} \equiv AE_i^{(0)}+BE_k^{(0)}$，对算符 ˆ 的贡献$P$可表示为 $P_{(1)\,\mathrm{SMS}\,ik} = A+B$。因此，公式（A10）

得出

$$H_{\mathrm{SMS},ik} = \frac{1}{2}\frac{i}{2\pi}\int d\omega \sum_P (-1)^P \times \left\{ \langle\psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(\omega-\varepsilon_{Pi_1})|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle \left(\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k_1}+i0}+\frac{1}{E_i^{(0)}-\omega-\varepsilon_{k_2}+i0}\right) + \langle\psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(\varepsilon_{k_1}-\omega)|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle \left(\frac{1}{\omega-\varepsilon_{Pi_1}+i0}+\frac{1}{E_k^{(0)}-\omega-\varepsilon_{Pi_2}+i0}\right) \right\}. \tag{A19}$$

积分 对 ω 的积分可使用标准单位矩阵关系式 ($\omega_1 < 0 < \omega_2$) 进行计算 :

$$\int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega \frac{f(\omega)}{\omega \pm i0} = \mp i\pi f(0) + \mathrm{P.V.}\int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega \frac{f(\omega)}{\omega}, \tag{A20}$$

其中 P.V 表示主值积分。事实上，对式 (A20)中的四项均应用公式A19)，并考虑到所有主值积分都因下式为 $R(\omega)$ 关于 ω的偶函数而消失，最终可得 SMS贡献

$$H_{\mathrm{SMS},ik} = \frac{1}{2}\sum_P (-1)^P \left[\langle\psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(\Delta_1)|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle + \langle\psi_{Pi_1}\psi_{Pi_2}|R(\Delta_2)|\psi_{k_1}\psi_{k_2}\rangle\right], \tag{A21}$$

其中 $\Delta_1 = \varepsilon_{Pi_1} - \varepsilon_{k_1}$和 $\Delta_2 = \varepsilon_{Pi_2} - \varepsilon_{k_2}$。

附录 B：单电子贡献的计算公式

鉴于定义 (9)，附录 A 中得到的表达式 (A14) 采用了一种形式，便于使用有限基组方法 [120, 121, 127] 进行计算。因此，主要困难在于计算关于 ω的积分。当 ω取较大的实数值时，光子传播子 (7) 是一个强烈振荡的函数。为克服这一困难，采用维克旋转较为方便。在本附录中，我们讨论贡献 $H_{\mathrm{NMS},ik}$的相关变换。

利用公式（12），可以将公式（A14）表示为库仑、单横向光子和双横向光子贡献之和

$$H_{\mathrm{NMS},ik} = H^{\mathrm{c}}_{\mathrm{NMS},ik} + H^{\mathrm{tr1}}_{\mathrm{NMS},ik} + H^{\mathrm{tr2}}_{\mathrm{NMS},ik}. \tag{B1}$$

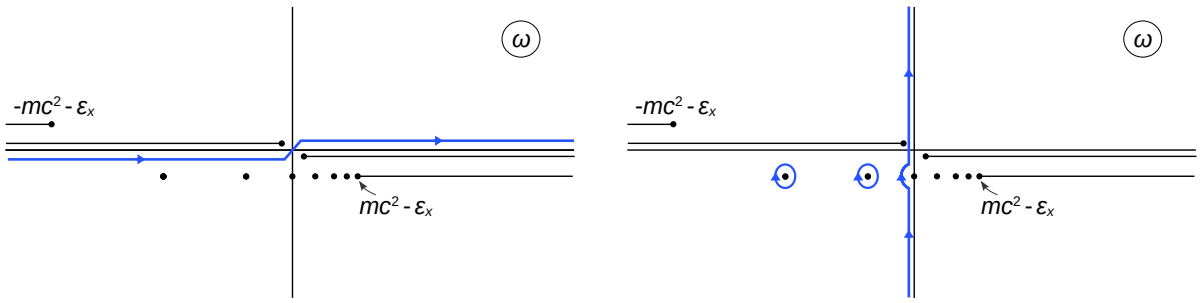

图6. 单横向光子和双横向光子贡献中算符 P(ε_x) 被积函数的极点和支割线。积分路径：原始路径沿实轴定向（左图）；旋转至虚轴后的路径（右图）。

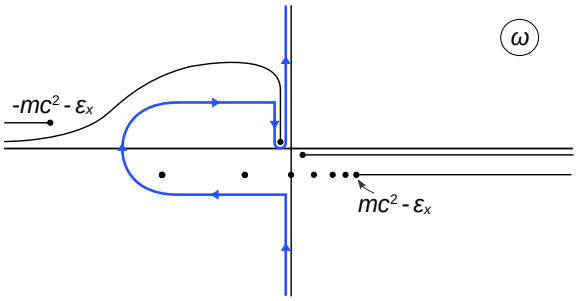

图7. 单横向光子和双横向光子贡献中算符 P(ε_x) 被积函数的极点和支割线。复平面中的积分路径选取为避开被积函数的所有奇点。

在库仑贡献中，对 ω 的积分可利用恒等式（A20）进行解析计算

$$H^{\mathrm{c}}_{\mathrm{NMS},ik} = \frac{1}{2}\left[\sum_{n}^{\varepsilon_n>0}\langle\psi_i\psi_n|R_{\mathrm{c}}|\psi_n\psi_k\rangle - \sum_{n}^{\varepsilon_n<0}\langle\psi_i\psi_n|R_{\mathrm{c}}|\psi_n\psi_k\rangle\right]. \tag{B2}$$

单横向光子和双横向光子贡献的处理方式相同。下文在本附录中，我们将它们统称为“横向光子”（tr）贡献。图6左图显示了沿实轴取向的原始积分路径，同时也标出了被积函数的极点和支割线。将积分路径维克旋转至虚轴后，电子格林函数的束缚态极点会以留数的形式被取出，见图6右图。横向光子贡献的最终公式

可以写成三项之和

$$H^{\rm tr}_{{\rm NMS},ik} = H^{{\rm tr}(a)}_{{\rm NMS},ik} + H^{{\rm tr}(b)}_{{\rm NMS},ik} + H^{{\rm tr}(c)}_{{\rm NMS},ik}\,. \tag{B3}$$

第一项来自图中圆圈标出的留数。6 其表达式为

$$H^{{\rm tr}(a)}_{{\rm NMS},ik} = \frac{1}{2}\sum_{x=i,k}\sum_{n}^{-1<\varepsilon_n<\varepsilon_x} \langle\psi_i\psi_n|R_{\rm tr}(\varepsilon_n-\varepsilon_x)|\psi_n\psi_k\rangle\,, \tag{B4}$$

为简洁起见，我们在 x 上引入求和，以考虑该表达式关于 P(E) 自变量的对称形式。第二项对应于相反宇称态之间简并的情形。该项源自位于 $\omega = 0$ 的极点，其形式为

$$H^{{\rm tr}(b)}_{{\rm NMS},ik} = \frac{1}{4}\sum_{x=i,k}\sum_{n}^{\varepsilon_n=\varepsilon_x} \langle\psi_i\psi_n|R_{\rm tr}(0)|\psi_n\psi_k\rangle\,. \tag{B5}$$

Fi最后，第三项对应于沿虚轴的积分 is

$$H^{{\rm tr}(c)}_{{\rm NMS},ik} = \frac{1}{2}\sum_{x=i,k}\sum_{n}^{\varepsilon_n\neq\varepsilon_x}\frac{1}{\pi}\int_0^\infty dy\,\frac{\varepsilon_n-\varepsilon_x}{y^2+(\varepsilon_n-\varepsilon_x)^2}\langle\psi_i\psi_n|R_{\rm tr}(iy)|\psi_n\psi_k\rangle\,. \tag{B6}$$

类似于（B2）、（B4）、（B5）和（B6）的表达式，例如在参考文献 [32]中已有推导。然而，其中仅考虑了对角矩阵元的情形。此外，参考文献 [32]给出了布赖特近似以外的高阶量子电动力学修正公式，而本文的公式还包括最低阶相对论贡献。

作为对 ω 积分程序的另一项交叉检验，我们还采用图7中示意的围道进行积分。该围道经过专门选择，以避开复平面中的所有奇点。我们采用两种积分路径旋转方案计算了矩阵元 $H_{\rm NMS,\ ik}$ 。结果显示，两种方案高度吻合。

附录 C：局域有效势

在第IV节中，为了测试核反冲效应的模型QED算符的性能，我们需要用核心哈特里（CH）和 x_α 势（例如参见文献 [122]）替代 V 方程（5）中的项。这些势可以用价电子的电荷密度表示，

$$\rho_v(r) = g_v^2(r) + f_v^2(r)\,, \tag{C1}$$

以及原子实的电荷
密度，

$$\rho_{\rm core}(r) = \sum_c (2j_c + 1)\left[g_c^2(r) + f_c^2(r)\right]. \tag{C2}$$

这里，狄拉克波函数中的大分量 g和小分量 f在方程（C1）和（C2）中，是在局域势中自洽确定的

$$V(r) = -\frac{\alpha Z_{\rm eff}(r)}{r}, \tag{C3}$$

其中， $Z_{\rm eff}(r)$ 是有效电荷。CH 势表示为

$$Z_{\rm eff}^{\rm CH}(r) = Z_{\rm nucl}(r) - r\int_0^\infty dr' \frac{\rho_{\rm core}(r')}{\max\{r, r'\}}, \tag{C4}$$

其中， $Z_{\rm nucl}(r)$ 考虑了原子核的有限尺寸。定义总电荷密度 $\rho_{\rm tot} = \rho_{\rm core} + \rho_v$ 后， x_α 势的有效电荷可写为

$$Z_{\rm eff}^{x_\alpha}(r) = Z_{\rm nucl}(r) - r\int_0^\infty dr' \frac{\rho_{\rm tot}(r')}{\max\{r, r'\}} + x_\alpha\left[\frac{81}{32\pi^2} r\rho_{\rm tot}(r)\right]^{1/3}. \tag{C5}$$

我们取 x_α 的值分别为 0、1/3、2/3 和 1。取值 $x_\alpha = 0$ 对应狄拉克-哈特里势，
$x_\alpha = 2/3$ 对应科恩-沈势 [123], ，而 $x_\alpha = 1$ 则对应狄拉克-斯莱特势 [124]。为了恢复x_α 势的正确渐近行为，我们引入拉特修正 [125]。

[1] S. R. Elliott、P. Beiersdorfer 和 M. H. Chen，《物理评论快报》76，1031（1996）；77，4278(E)（1996）。

[2] S. R. Elliott、P. Beiersdorfer、M. H. Chen、V. Decaux 和 D. A. Knapp，《物理评论》C 57，583（1998）。

[3] R. Schuch、E. Lindroth、S. Madzunkov、M. Fogle、T. Mohamed 和 P. Indelicato，《物理评论快报》95，183003（2005）。

[4] R. Soria Orts, Z. Harman, J. R. Crespo L´opez-Urrutia, A. N. Artemyev, H. Bruhns, A. J. G. Mart´ınez, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, A. Lapierre, V. Mironov, V. M. Shabaev, H. Tawara, I. I. Tupitsyn, J. Ullrich 和 A. V. Volotka，《物理评论快报》97，103002（2006）。

[5] C. Brandau, C. Kozhuharov, Z. Harman, A. M¨uller, S. Schippers, Y. S. Kozhedub, D. Bern- hardt, S. B¨ohm, J. Jacobi, E. W. Schmidt, P. H. Mokler, F. Bosch, H.-J. Kluge, Th. St¨ohlker, K. Beckert, P. Beller, F. Nolden, M. Steck, A. Gumberidze, R. Reuschl, U. Spillmann, F. J. Currell, I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, A. Wolf 和 Z. Stachura，《物理评论快报》100，073201（2008）。[6]F. K¨ohler, K. Blaum, M. Block, S. Chenmarev, S. Eliseev, D. A. Glazov, M. Gon- charov, J. Hou, A. Kracke, D. A. Nesterenko, Y. N. Novikov, W. Quint, E. M. Ramirez, V. M. Shabaev, S. Sturm, A. V. Volotka 和 G. Werth，自然·通讯7，10246（2016）。[7] B. Maaß, T. H¨uther, K. K¨onig, J. Kr¨amer, J. Krause, A. Lovato, P. M¨uller, K. Pachucki, M. Puchalski, R. Roth, R. S´ anchez, F. Sommer, R. B. Wiringa 和 W. N¨ortersh¨auser，《物理评论快报》122，182501（2019）。[8] ´A. Koszor´us, X. F. Yang, W. G. Jiang, S. J. Novario, S. W. Bai, J. Billowes, C. L. Binnersley, M. L. Bissell, T. E. Cocolios, B. S. Cooper, R. P. de Groote, A. Ekstr¨om, K. T. Flanagan, C. Forss´en, S. Franchoo, R. F. G. Ruiz, F. P. Gustafsson, G. Hagen, G. R. Jansen, A. Kanel- lakopoulos, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, G. Neyens, T. Papenbrock, P.-G. Reinhard, C. M. Ricketts, B. K. Sahoo, A. R. Vernon 和 S. G. Wilkins，自然·物理17，439（2021）。[9] T. Sailer, V. Debierre, Z. Harman, F. Heiße, C. K¨onig, J. Morgner, B. Tu, A. V. Volotka, C. H. Keitel, K. Blaum 和 S. Sturm，自然606，479（2022）。[10] S. A. King, L. J. Spieß, P. Micke, A. Wilzewski, T. Leopold, E. Benkler, R. Lange, N. Huntemann, A. Surzhykov, V. A. Yerokhin, J. R. C. L´opez-Urrutia 和 P. O. Schmidt, arXiv:2205.13053 [physics.atom-ph]（2022）。[11] J. Z. Han, C. Pan, K. Y. Zhang, X. F. Yang, S. Q. Zhang, J. C. Berengut, S. Goriely, H. Wang, Y. M. Yu, J. Meng, J. W. Zhang 和 L. J. Wang，物理评论研究4，033049（2022）。[12] C. Frugiuele, E. Fuchs, G. Perez 和 M. Schlaffer，物理评论D 96，015011（2017）。[13] J. C. Berengut, D. Budker, C. Delaunay, V. V. Flambaum, C. Frugiuele, E. Fuchs, C. Gro- jean, R. Harnik, R. Ozeri, G. Perez 和 Y. Soreq，《物理评论快报》120，091801（2018）。[14] V. V. Flambaum, A. J. Geddes 和 A. V. Viatkina，《物理评论A》97，032510（2018）。[15] V. A. Yerokhin, R. A. M¨uller, A. Surzhykov, P. Micke 和 P. O. Schmidt，《物理评论A》101，012502（2020）。

[16] N.-H. Rehbehn, M. K. Rosner, H. Bekker, J. C. Berengut, P. O. Schmidt, S. A. King, P. Micke, M. F. Gu, R. M¨uller, A. Surzhykov 和 J. R. C. L´opez-Urrutia，《物理评论A》103，L040801（2021年）。[17] N. L. Figueroa, J. C. Berengut, V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, D. Budker 和 D. Antypas，《物理评论快报》128，073001（2022年）。[18]K. Ono, Y. Saito, T. Ishiyama, T. Higomoto, T. Takano, Y. Takasu, Y. Yamamoto, M. Tanaka 和 Y. Takahashi，《物理评论X》12，021033（2022年）。[19] V. Debierre, C. H. Keitel 和 Z. Harman，《物理快报B》807，135527（2020年）。[20] V. Debierre 和 N. S. Oreshkina，《物理评论A》104，032825（2021年）。[21] V. Debierre, C. H. Keitel 和 Z. Harman，arXiv:2202.01668 [物理学原子物理]（2022年），arXiv:2202.01668。[22] V. Debierre, N. S. Oreshkina, I. A. Valuev, Z. Harman 和 C. H. Keitel，rXiv:2207.04868[物理学原子物理]（2022年）。[23] V. M. Shabaev，《理论与数学物理》63，588（1985年），[Teor. Mat. Fiz. 63，394（1985年）]。[24] V. M. Shabaev，Sov. J. Nucl. Phys. 47，69（1988年），[Yad. Fiz. 47，107（1988年）]。[25] C. W. P. Palmer，《物理学杂志B：原子与分子物理》20，5987（1987年）。[26] V. M. Shabaev，《物理评论A》57，59（1998年）。[27] K. Pachucki 和 H. Grotch，《物理评论A》51，1854（1995年）。[28] A. S. Yelkhovsky，电子预印本 hep-th/9403095（1994年）；《实验与理论物理学杂志》110，431（1996年）。[29] G. S. Adkins, S. Morrison 和 J. Sapirstein，《物理评论A》76，042508（2007年）。[30] V. A. Yerokhin 和 V. M. Shabaev，《物理评论快报》115，233002（2015年）。[31] V. A. Yerokhin 和 V. M. Shabaev，《物理评论A》93，062514（2016年）。[32] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev 和 V. A. Yerokhin，《物理评论A》52，1884（1995年）。[33] V. M. Shabaev, A. N. Artemyev, T. Beier, G. Plunien, V. A. Yerokhin 和 G. Soff，《物理评论A》57，4235（1998年）。[34] A. V. Malyshev, R. V. Popov, V. M. Shabaev 和 N. A. Zubova，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》51，085001（2018年）。[35] I. P. Grant，《物理学进展》19，747（1970年）。[36] J. P. Desclaux，《计算物理通讯》9，31（1975年）。[37] V. F. Bratzev, G. B. Deyneka 和 I. I. Tupitsyn，《苏联科学院通报：物理辑》41，173（1977年），[《苏联科学院学报：物理辑》41，2655（1977年）]。

[38] P. Indelicato 和 E. Lindroth，《物理评论A》46，2426（1992年）。[39] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum 和 M. G. Kozlov，《物理评论A》54，3948（1996年）。[40] M. S. Safronova, W. R. Johnson 和 A. Derevianko，《物理评论A》60，4476（1999年）。[41] I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, J. R. Crespo L´opez-Urrutia, I. Dragani´c, R. Soria Orts 和 J. Ullrich，《物理评论A》68，022511（2003年）。[42] M. G. Kozlov, S. G. Porsev, M. S. Safronova 和 I. I. Tupitsyn，《计算物理通讯》195，199（2015年）。[43] V. A. Dzuba, J. C. Berengut, C. Harabati 和 V. V. Flambaum，《物理评论A》95，012503（2017年）。[44] D. A. Glazov, A. V. Malyshev, A. V. Volotka, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn 和 G. Plunien，《核仪器与方法物理研究B辑》408，46（2017年）。[45] T. Saue, R. Bast, A. S. P. Gomes, H. J. A. Jensen, L. Visscher, I. A. Aucar, R. Di Remigio, K. G. Dyall, E. Eliav, E. Fasshauer, T. Fleig, L. Halbert, E. D. Hedeg˚ard, B. Helmich-Paris, M. Ilia˘s, C. R. Jacob, S. Knecht, J. K. Laerdahl, M. L. Vidal, M. K. Nayak, M. Olejniczak, J. M. H. Olsen, M. Pernpointner, B. Senjean, A. Shee, A. Sunaga 和 J. N. P. van Stralen，《化学物理杂志》152，204104（2020年）。[46] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn 和 V. A. Yerokhin，《物理评论A》88，012513（2013年）。[47] A. V. Malyshev, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin 和 V. A. Za- ytsev，《物理评论A》106，012806（2022年）。[48] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn 和 V. A. Yerokhin，《计算物理通讯》189，175（2015年）；223，69（2018年）。[49] I. I. Tupitsyn, M. G. Kozlov, M. S. Safronova, V. M. Shabaev 和 V. A. Dzuba，《物理评论快报》117，253001（2016年）。[50] L. F. Pa˘steka, E. Eliav, A. Borschevsky, U. Kaldor 和 P. Schwerdtfeger，《物理评论快报》118，023002（2017年）。[51] J. Machado, C. I. Szabo, J. P. Santos, P. Amaro, M. Guerra, A. Gumberidze, 卞国杰, J. M. Isac 和 P. Indelicato，《物理评论A》97，032517（2018年）。[52] R. Si, X. L. Guo, T. Brage, C. Y. Chen, R. Hutton 和 C. Froese Fischer，《物理评论A》98，012504（2018年）。[53] A. M¨uller, E. Lindroth, S. Bari, A. Borovik, Jr., P.-M. Hillenbrand, K. Holste, P. Indelicato, A. L. D. Kilcoyne, S. Klumpp, M. Martins, J. Viefhaus, P. Wilhelm 和 S. Schippers，《物理学

《物理评论A》98, 033416 (2018).[54] V. A. Zaytsev, I. A. Maltsev, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, 《物理评论A》100, 052504 (2019).[55] V. A. Yerokhin, M. Puchalski, and K. Pachucki, 《物理评论A》102, 042816 (2020).[56] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, and D. V. Mironova, 《物理评论A》101, 052502 (2020).[57] I. I. Tupitsyn, S. V. Bezborodov, A. V. Malyshev, D. V. Mironova, and V. M. Shabaev, 《光学与光谱学》128, 21 (2020).[58] M. Y. Kaygorodov, L. V. Skripnikov, I. I. Tupitsyn, E. Eliav, Y. S. Kozhedub, A. V. Maly- shev, A. V. Oleynichenko, V. M. Shabaev, A. V. Titov, and A. V. Zaitsevskii, 《物理评论A》104, 012819 (2021).[59] L. V. Skripnikov, 《化学物理杂志》154, 201101 (2021).[60] M. Y. Kaygorodov, D. P. Usov, E. Eliav, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, A. V. Oleyn- ichenko, V. M. Shabaev, L. V. Skripnikov, A. V. Titov, I. I. Tupitsyn, and A. V. Zaitsevskii, 《物理评论A》105, 062805 (2022).[61] H. H¨affner, T. Beier, N. Hermanspahn, H.-J. Kluge, W. Quint, S. Stahl, J. Verd´u, and G. Werth, 《物理评论快报》85, 5308 (2000).[62] J. Verd´u, S. Djeki´c, S. Stahl, T. Valenzuela, M. Vogel, G. Werth, T. Beier, H.-J. Kluge, and W. Quint, 《物理评论快报》92, 093002 (2004).[63] S. Sturm, A. Wagner, B. Schabinger, J. Zatorski, Z. Harman, W. Quint, G. Werth, C. H. Kei- tel, and K. Blaum, 《物理评论快报》107, 023002 (2011).[64] A. Wagner, S. Sturm, F. K¨ohler, D. A. Glazov, A. V. Volotka, G. Plunien, W. Quint, G. Werth, V. M. Shabaev, and K. Blaum, 《物理评论快报》110, 033003 (2013).[65] S. Sturm, A. Wagner, M. Kretzschmar, W. Quint, G. Werth, and K. Blaum, 《物理评论A》87, 030501(R) (2013).[66] D. A. Glazov, F. K¨ohler-Langes, A. V. Volotka, K. Blaum, F. Heiße, G. Plunien, W. Quint, S. Rau, V. M. Shabaev, S. Sturm, and G. Werth, 《物理评论快报》123, 173001 (2019).[67]I. Arapoglou, A. Egl, M. H¨ocker, T. Sailer, B. Tu, A. Weigel, R. Wolf, H. Cakir, V. A. Yerokhin, N. S. Oreshkina, V. A. Agababaev, A. V. Volotka, D. V. Zinenko, D. A. Glazov, Z. Harman, C. H. Keitel, S. Sturm, and K. Blaum, 《物理评论快报》122, 253001 (2019).

[68] V. M. Shabaev, 《物理评论A》64, 052104 (2001).[69] V. M. Shabaev and V. A. Yerokhin, 《物理评论快报》88, 091801 (2002).[70] V. M. Shabaev, D. A. Glazov, A. V. Malyshev, and I. I. Tupitsyn, 《物理评论快报》119, 263001 (2017).[71] A. V. Malyshev, V. M. Shabaev, D. A. Glazov, and I. I. Tupitsyn, 《JETP快报》106, 765 (2017).[72] V. M. Shabaev, D. A. Glazov, A. V. Malyshev, and I. I. Tupitsyn, 《物理评论A》98, 032512 (2018).[73] I. A. Aleksandrov, D. A. Glazov, A. V. Malyshev, V. M. Shabaev, and I. I. Tupitsyn, 《物理评论A》98, 062521 (2018).[74] A. V. Malyshev, D. A. Glazov, and V. M. Shabaev, 《物理评论A》101, 012513 (2020).[75] A. V. Malyshev, D. A. Glazov, I. A. Aleksandrov, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, 《光学与光谱学》128, 297 (2020).[76] D. S. Hughes and C. Eckart, 《物理评论》36, 694 (1930).[77] V. A. Korol and M. G. Kozlov, 《物理评论A》76, 022103 (2007).[78] Y. S. Kozhedub, A. V. Volotka, A. N. Artemyev, D. A. Glazov, G. Plunien, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and Th. St¨ohlker, 《物理评论A》81, 042513 (2010).[79] E. Gaidamauskas, C. Naz´e, P. Rynkun, G. Gaigalas, P. J¨onsson, and M. Godefroid, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》44, 175003 (2011).[80] C. Naz´e, S. Verdebout, P. Rynkun, G. Gaigalas, M. Godefroid, and P. J¨onsson, 《原子数据与核数据表》100, 1197 (2014).[81] N. A. Zubova, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, A. V. Volotka, G. Plunien, C. Brandau, and Th. St¨ohlker, 《物理评论A》90, 062512 (2014).[82] C. Naz´e, J. G. Li, and M. Godefroid, 《物理评论A》91, 032511 (2015).[83] C. F. Fischer, M. Godefroid, T. Brage, P. J¨onsson, and G. Gaigalas, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》49, 182004 (2016).[84] N. A. Zubova, A. V. Malyshev, I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, Y. S. Kozhedub, G. Plunien, C. Brandau, and Th. St¨ohlker, 《物理评论A》93, 052502 (2016).[85] L. Filippin, J. Biero´n, G. Gaigalas, M. Godefroid, and P. J¨onsson, 《物理评论A》96, 042502 (2017).

[86] I. I. Tupitsyn, N. A. Zubova, V. M. Shabaev, G. Plunien 和 Th. St¨ohlker, 《物理评论A》98, 022517 (2018年)。[87] S. Gamrath, P. Palmeri, P. Quinet, S. Bouazza 和 M. Godefroid, 《定量光谱学与辐射传输》218, 38 (2018年)。[88] N. A. Zubova, I. S. Anisimova, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, G. Plunien, C. Brandau 和 T. St¨ohlker, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》52, 185001 (2019年)。[89] J. Ekman, P. J¨onsson, M. Godefroid, C. Naz´e, G. Gaigalas 和 J. Biero´n, 《计算物理通讯》235, 433 (2019年)。[90] N. A. Zubova, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, R. V. Popov, I. M. Save- lyev, I. I. Tupitsyn 和 V. M. Shabaev, 《光学与光谱学》128, 1090 (2020年)。[91] R. A. M¨uller, V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev 和 A. Surzhykov, 《物理评论A》104, L020802 (2021年)。[92] R. Si, S. Schiffmann, K. Wang, C. Y. Chen 和 M. Godefroid, 《物理评论A》104, 012802 (2021年)。[93] J. S. Schelfhout 和 J. J. McFerran, 《物理评论A》104, 022806 (2021年)。[94] J. S. Schelfhout 和 J. J. McFerran, 《物理评论A》105, 022805 (2022年)。[95] W. H. Furry, 《物理评论》81, 115 (1951年)。[96] V. M. Shabaev, 《物理报告》356, 119 (2002年)。[97] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev 和 V. A. Yerokhin, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》28, 5201 (1995年)。[98] V. M. Shabaev, A. N. Artemyev, T. Beier, G. Plunien, V. A. Yerokhin 和 G. Soff, Phys. Scr. T80, 493 (1999年)。[99] I. A. Aleksandrov, A. A. Shchepetnov, D. A. Glazov 和 V. M. Shabaev, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》48, 144004 (2015年)。[100] H. Grotch 和 D. R. Yennie, 《现代物理评论》41, 350 (1969年)。[101] E. Borie 和 G. A. Rinker, 《现代物理评论》54, 67 (1982年)。[102] K. Pachucki 和 V. A. Yerokhin, arXiv:2208.13381 [physics.atom-ph] (2022年)。[103] A. Veitia 和 K. Pachucki, 《物理评论A》69, 042501 (2004年)。[104] A. V. Malyshev, I. S. Anisimova, D. V. Mironova, V. M. Shabaev 和 G. Plunien, 《物理评论A》100, 012510 (2019年)。

[105] A. V. Malyshev, I. S. Anisimova, D. A. Glazov, M. Y. Kaygorodov, D. V. Mironova, G. Plu- nien 和 V. M. Shabaev, 《物理评论A》101, 052506 (2020年)。[106] P. J. Mohr, B. N. Taylor 和 D. B. Newell, 《现代物理评论》84, 1527 (2012)。[107]J. Sapirstein 和 D. R. Yennie, 《类氢束缚态理论》, 载于《量子电动力学》, T. Kinoshita 编, 第560页, 世界科学出版社, 新加坡, 1990年。[108] K. Pachucki 和 S. G. Karshenboim, 《物理学杂志B: 原子、分子与光学物理》28, L221 (1995年)。[109] V. M. Shabaev, 《物理学杂志B: 原子、分子与光学物理》26, 4703 (1993)。[110] M. H. Chen 和 K. T. Cheng, 《物理评论A》55, 166 (1997)。[111] K. T. Cheng, M. H. Chen 和 W. R. Johnson, 《物理评论A》77, 052504 (2008)。[112] V. A. Yerokhin 和 A. Surzhykov, 《物理评论A》86, 042507 (2012)。[113] M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, I. I. Tupitsyn, A. V. Malyshev, D. A. Glazov, G. Plunien 和 V. M. Shabaev, 《物理评论A》99, 032505 (2019年)。[114] P. J. Mohr, 《物理年鉴（纽约）》88, 26 (1974); 88, 52 (1974)。[115] N. J. Snyderman, 《物理年鉴（纽约）》211, 43 (1991)。[116] P. J. Mohr, G. Plunien 和 G. Soff, 《物理报告》293, 227 (1998)。[117] V. A. Yerokhin 和 V. M. Shabaev, 《物理评论A》60, 800 (1999)。[118] I. Angeli 和 K. P. Marinova, 《原子数据与核数据表》99, 69 (2013年)。[119] V. A. Yerokhin 和 V. M. Shabaev, 《物理与化学参考数据杂志》44, 033103 (2015年)。[120] W. R. Johnson, S. A. Blundell 和 J. Sapirstein, 《物理评论A》37, 307 (1988)。[121] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien 和 G. Soff, 《物理评论快报》93, 130405 (2004年)。[122] J. Sapirstein 和 K. T. Cheng, 《物理评论A》66, 042501 (2002年)。[123] W. Kohn 和 L. J. Sham, 《物理评论》140, A1133 (1965)。[124] J. C. Slater, 《物理评论》81, 385 (1951年)。[125] R. Latter, 《物理评论》99, 510 (1955)。[126] V. M. Shabaev, 《物理评论A》50, 4521 (1994)。.[127] S. Salomonson 和 P. Oster, 《物理评论A》40, 5548 (1989)。