arXiv:2301.05442v1 [physics.atom-ph] 13 Jan 2023

关联 B 样条基函数在氦主要相对论修正和量子电动力学修正中的应用

方浩[1,2], 张永辉[1], 张佩佩[1], 和施廷云[1], †

[1] *State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Innovation Academy for Precision Measurement Science and Technology, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, People's Republic of China and*

[2] *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, People's Republic of China*(日期：2023年1月16日)

B 样条函数已广泛应用于计算原子物理学。不同于传统的 B 样条基组（两个 B 样条函数的简单乘积），近期发展的关联 B 样条基函数（C-BSBF）显式包含电子间坐标 r_{12}，大幅提高了氦单重态的极化率 [S. J. Yang *et al*, 《物理评论A》95, 062505（2017年）] 和贝特对数 [S. J. Yang *et al*, 《物理评论A》100, 042509（2019年）] 的计算精度。本文报告了将 C-BSBF 扩展用于计算氦 $1\,^1S$、$2\,^1S$、$2\,^3S$和 $3\,^3S$态能级的主要相对论修正和量子电动力学修正。相对论动能项 p_1^4、接触势 $\delta^3(r_1)$、$\delta^3(r_{12})$和荒木-苏切尔修正 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$ 采用全局算符方法计算，其中涉及的 r_{12}^n 和 $r_{12}^n \ln r_{12}$ 通过拉普拉斯展开的推广形式计算。所得基态数值为$\delta E_{rel}/\alpha^2 = -1.951\ 754\ 7(2)$和 $\delta E_{QED}/\alpha^3$ =57.288 165(2)，与先前结果一致，这为使用 C-BSBF 计算更高阶的相对论效应和量子电动力学效应开辟了可能性。

PACS 编号:

I. 引言

氦原子光谱学的测量精度已达到万亿分之一量级 [1, 2], ，这使得人们能够检验量子电动力学（QED），并通过结合高精度原子结构计算 [8–11], 确定精细结构常数 α 和核电荷半径 [1–7] 。此外，从理论角度来看，作为最简单的多电子系统，氦传统上一直是检验不同原子结构描述方法的理想对象。

众所周知，有限基组变分计算是精确求解库仑三体束缚态问题（如氦原子）的最有效工具，其中显式包含电子间距的基函数尤为重要。例如，Pachucki等人采用带非线性参数的显式相关指数基组，完成了氦三重态的完整 α^7m 兰姆位移计算，使电离能的理论精度提高了一个数量级以上 [8]。研究人员采用Hylleraas变分法完成了 ^{7}Li$^+$ 中 $2\,^3P_J$ 态超精细结构的α^6m阶计算，使以往计算的精度提高了一个数量级 [12]。然而，为了避免基函数数量增加时稳定性下降，这些高精度计算还必须配合使用多精度软件包和变分优化非线性参数。

即使基组很大，B样条仍具有“足够完备”和线性独立的性质，因此已广泛应用于计算原子物理学 [13–22]。随着高分辨率原子光谱学的发展，人们对高精度能量计算提出了要求。然而，对于电子关联很强的系统，传统B样条基函数难以获得高精度计算结果。例如，Lin等人 [23] 使用B样条基组计算出氦原子的非相对论基态能量为 −2.903 582 0，虽然得到了四位有效数字，但代价是使用了大量组态。此外，使用分波 ℓ_{max}=15 得到的氦 $2\,^1S_0$ 态相对论能量也只有六位有效数字 [24]。因此，有必要将电子间坐标引入传统B样条基组。

最近，Tang等人开发了一种方法，使用 B 样条基组 [18], 计算氢原子中作为量子电动力学主要部分的贝特对数。该方法不仅能用相对较小的基组高精度计算低能态，还能计算高激发里德伯态。随后，Zhang 等人将该方法扩展到氦原子的S 态贝特对数计算 [22], ，其中电子关联较弱的三重态贝特对数可达到五到八位有效数字的精度；但由于基组未纳入电子关联效应，单重态的计算精度有限。因此，Yang等人开发了显式关联 B 样条基组方法，并成功将其用于计算氦原子单重态的能级、静态偶极极化率 [25], 和贝特对数 [26] 。非相对论基态能量已达到 −2.903 724 377 1(2) [25], ，比Lin等人的结果精确六个数量级

†电子邮箱：tyshi@wipm.ac.cn

等人 [23]。此外，他们分别获得了相对误差为 10^{-9} 的静态偶极极化率和相对误差为 10^{-7}的贝特对数，这表明关联 B 样条基函数（C-BSBF）能够很好地描述单重态的电子关联，并有效提高数值收敛速度。

本文将采用 C-BSBF 计算氦原子能级的主要相对论修正和量子电动力学修正。我们将使用全局算符方法提高相对论动能项 p_1^4、接触势 $\delta^3(r_1)$、 $\delta^3(r_{12})$ 及荒木-苏切尔修正 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$的数值收敛性，从而拓展 C-BSBF 的应用范围，并表明 C-BSBF 也可有效用于奇异算符期望值的数值计算。

本文结构如下。第二节介绍计算中采用的理论公式和方法。第三节计算氦的 $1\,^1S$、$2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$态的主要相对论修正和量子电动力学修正，并与现有文献中的结果进行比较。第四节给出结论。全文均采用原子单位（a.u.）。

II. 理论与方法

A. 相关 B 样条基组（C-BSBF）

具有无限质量原子核的双电子原子的非相对论哈密顿量形式为

$$H=\sum_{i=1}^{2}\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2}-\frac{Z}{r_i}\right)+\frac{1}{r_{12}}\,, \tag{1}$$

其中，$\mathbf{p}_i=-i\nabla_i$ 是第 i个电子的动量算符， r_i 是第 i 个电子相对于原子核的坐标， r_{12} 是电子间坐标，而氦原子的核电荷 $Z=2$ 。

双电子波函数按以下 C-BSBF 展开，其中显式包含电子间坐标r_{12} ，

$$\phi_{ij,c,\ell_1\ell_2}=\mathcal{A}\left[r_{12}^c B_i^k(r_1)\,B_j^k(r_2)\,\mathcal{Y}_{\ell_1\ell_2}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_1,\hat{\mathbf{r}}_2)\right]\,, \tag{2}$$

其中，算符 $\mathcal{A}$ 确保基函数在交换两个电子时具有反对称性， $B_i^k(r)$是 N 个阶数为 k 的 B 样条函数中的第 i个，并受限于球形腔 [14],; c 是 r_{12} 坐标的幂次，耦合球谐函数定义为

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_{\ell_1\ell_2}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_1,\hat{\mathbf{r}}_2)=\sum_{m_1m_2}&\langle\ell_1\ell_2m_1m_2\mid LM\rangle\\&\times Y_{\ell_1m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1)\,Y_{\ell_2m_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\,,\end{aligned} \tag{3}$$

其中， $\langle\ell_1\ell_2m_1m_2\mid LM\rangle$ 为克莱布什-戈尔丹系数。在本次计算中，适当选取R_0 的腔半径；为避免使积分计算过于复杂， r_{12} 的幂次 c 限制为 0 或 1；轨道角动量 ℓ_1 和ℓ_2 均小于最大分波 ℓ_{max}。

B. 主要相对论和量子电动力学修正 ns

双电子原子的非相对论能量的主要相对论修正，由布雷特-泡利哈密顿量在非相对论波函数下的期望值给出 ψ,

$$\delta E_{rel}=\langle\psi|H_{BP}|\psi\rangle\,, \tag{4}$$

其中

$$\begin{aligned}H_{BP}=\alpha^2\Bigg\{&-\frac{1}{8}\left(p_1^4+p_2^4\right)+\pi\delta^3(r_{12})+\frac{Z\pi}{2}\left[\delta^3(r_1)\right.\\&\left.+\delta^3(r_2)\right]-\frac{1}{2r_{12}}\left(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{p}_2+\frac{\mathbf{r}_{12}\cdot(\mathbf{r}_{12}\cdot\mathbf{p}_1)\mathbf{p}_2}{r_{12}^2}\right)\Bigg\}\,,\end{aligned} \tag{5}$$

对于 S 态， [11, 27, 28], 其中 α =7。297 352 569 3(11)$\times10^{-3}$ [29] 是精细结构常数， $\delta^3(r_{12})$、$\delta^3(r_1)$ 和 $\delta^3(r_2)$ 表示狄拉克δ函数。公式（5）的最后一项是延迟项，因为该修正源于电子产生的电磁场的延迟 [30], 和$-\left[\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{p}_2+\mathbf{r}_{12}\cdot(\mathbf{r}_{12}\cdot\mathbf{p}_1)\mathbf{p}_2/r_{12}^2\right]/2r_{12}$ 被标记为 H_2。

主要量子电动力学修正可以表示为以下有效算符的期望值 [11,31, 32],

$$\begin{aligned}\delta E_{QED}=\alpha^3\Bigg\{&\frac{4Z}{3}\left[\frac{19}{30}-2\ln\alpha-\ln k_0\right]\langle\psi|\delta^3(r_1)\\&+\delta^3(r_2)|\psi\rangle+\left[\frac{164}{15}+\frac{14}{3}\ln\alpha\right]\langle\psi|\delta^3(r_{12})|\psi\rangle\\&-\frac{7}{6\pi}\langle\psi|r_{12}^{-3}|\psi\rangle\Bigg\}\,.\end{aligned} \tag{6}$$

这里 $\ln k_0$ 是贝特对数，而最后一项在

表 I: 氦的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$态的贝特对数。

态	Zhang[22]和 Yang[26]	Korobov[33]
$1\,^1S$	4.370 160 22(5)	4.370 160 223 070 3(3)
$2\,^1S$	4.366 412 71(1)	4.366 412 726 417(1)
$2\,^3S$	4.364 036 7(2)	4.364 036 820 476(1)
$3\,^3S$	4.368 666 7(1)	4.368 666 996 159(2)

式（ 6 [31, 34, ）通常称为荒木-苏切尔修正，其期望值定义为 35], $\langle\psi|r_{12}^{-3}|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\psi|r_{12}^{-3}|\psi\rangle=\lim_{a\to0}\langle r_{12}^{-3}\Theta(r_{12}-a)\\+4\pi(\gamma+\ln a)\delta^3(r_{12})\rangle\,,\end{aligned} \tag{7}$$

其中， $\Theta(x)$和 γ 分别为阶跃函数和欧拉常数。与相对论修正相比，主要量子电动力学修正中较难计算的是贝特对数和荒木-苏切尔修正。Zhang 等人[22] 使用传统的B样条函数以及Yang等人[26] 使用C-BSBF，基于Drake-Goldman 方法计算了氦原子的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$ 态的贝特对数，结果汇总于表I。表I最后一列列出的Korobov结果基于Schwartz的积分表示法，可作为基准。本研究采用Zhang 等人和Yang等人给出的贝特对数值，以使用B样条函数完整计算主要相对论修正和量子电动力学修正。

Drachman 提出了全局算符方法，用于计算双粒子接触势 $\delta^3(r_1)$ 和 $\delta^3(r_{12})$，与直接计算相比取得了显著改进 [36]。我们采用 Drachman 给出的含全局算符的等价形式，计算 $\delta^3(r_1)$ 和 $\delta^3(r_{12})$ 的期望值，

$$\begin{aligned}4\pi\left\langle\psi\left|\delta^3(r_i)\right|\psi\right\rangle =&4\langle\psi|r_i^{-1}(E_\psi-V)|\psi\rangle\\&-2\sum_{s=1}^{2}\langle\nabla_s\psi|r_i^{-1}|\nabla_s\psi\rangle\,,\end{aligned}\tag{8}$$

$$\begin{aligned}4\pi\left\langle\psi\left|\delta^3(r_{12})\right|\psi\right\rangle =&2\langle\psi|r_{12}^{-1}(E_\psi-V)|\psi\rangle\\&-\sum_{s=1}^{2}\langle\nabla_s\psi|r_{12}^{-1}|\nabla_s\psi\rangle\,,\end{aligned}\tag{9}$$

其中 E_ψ 是双电子波函数 ψ 对应的本征值，且 $V=-Z/r_1-Z/r_2+1/r_{12}$。若直接在 C-BSBF 中计算动能项 $p_1^4+p_2^4$ 在相对论修正中的期望值，将导致收敛缓慢。Pachucki 和 Komasa 也采用了类似的方法，将动能项和荒木-苏切尔修正转换为更规则的形式，因此获得了更好的数值收敛性 [37]。在本次计算中，我们仿照 Pachucki 和 Komasa，使用以下表达式计算 $\langle p_1^4+p_2^4\rangle$，

$$\sum_{i=1}^{2}\left\langle\psi\left|p_i^4\right|\psi\right\rangle=4\left\langle\psi\left|(E_\psi-V)^2\right|\psi\right\rangle-2\left\langle\nabla_1^2\psi|\nabla_2^2\psi\right\rangle\tag{10}$$

在公式 (10) 中将涉及对 $\langle\psi|r_{12}^{-2}|\psi\rangle$ 的积分，使用全局算符方法也可将其计算如下：

$$\begin{aligned}\left\langle\psi\left|r_{12}^{-2}\right|\psi\right\rangle =&2\langle\psi|\ln r_{12}(V-E_\psi)|\psi\rangle\\&+\sum_{i=1}^{2}\langle\nabla_i\psi|\ln r_{12}|\nabla_i\psi\rangle\,,\end{aligned}\tag{11}$$

因为我们发现 $\nabla_1^2\ln r_{12}=\nabla_2^2\ln r_{12}=r_{12}^{-2}$。公式 (10) 的完整展开式写为

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{2}\left\langle\psi\left|p_i^4\right|\psi\right\rangle=&4E_\psi^2-8E_\psi\left\langle\psi\left|-\frac{2Z}{r_1}+\frac{1}{r_{12}}\right|\psi\right\rangle\\&+4\left\langle\psi\left|\frac{2Z^2}{r_1^2}-\frac{2Z^2}{r_1r_2}-\frac{2Z}{r_1r_{12}}+\frac{1}{r_{12}^2}\right|\psi\right\rangle\\&-2\left\langle\nabla_1^2\psi|\nabla_2^2\psi\right\rangle\,.\end{aligned}\tag{12}$$

荒木-苏切尔修正也被转换为正则形式，以便于进行本文的数值计算，

$$\begin{aligned}\left\langle\psi\left|r_{12}^{-3}\right|\psi\right\rangle=&-\sum_{i=1}^{2}\left\langle\nabla_i\psi\left|r_{12}^{-1}\ln r_{12}\right|\nabla_i\psi\right\rangle\\&+\left\langle\psi\left|2\left(E_\psi-V\right)\frac{\ln r_{12}}{r_{12}}\right.\right.\\&\left.\left.+4\pi(1+\gamma)\delta^3\left(r_{12}\right)\right|\psi\right\rangle\,.\end{aligned}\tag{13}$$

其中，积分中将涉及 $r_{12}^n\ln r_{12}\,(n=-2,-1,0,1)$。除上述三项外，式 (5)–(6) 中出现的其他算符的期望值也将直接用 C-BSBF 计算。

C. r_{12}^n 和 $r_{12}^n\ln r_{12}$ 的拉普拉斯展开

在计算 Breit-Pauli算符和 Araki-Sucher修正时，需要对 r_{12}^n 和 $r_{12}^n\ln r_{12}$ 进行积分。采用球坐标处理这类积分至关重要，这要求将其径向维度与角向维度分离。Sack [38] 给出的拉普拉斯展开推广形式适用于 r_{12} 的任意幂次和函数，可用于计算涉及 r_{12} 不同幂次的积分。r_{12}^n 可展开为以下形式

$$r_{12}^n=\sum_{\ell=0}^{\infty}R_{n\ell}(r_1,r_2)P_\ell(\cos\theta_{12})\,,\tag{14}$$

其中，$\cos\theta_{12}$ 的勒让德多项式利用恒等式表示为 $P_\ell(\cos\theta_{12})=\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{m=\ell}Y_{\ell m}^*(\hat{r}_1)Y_{\ell m}(\hat{r}_2)$，径向函数 $R_{n\ell}(r_1,r_2)$由 Sack [38] 制定如下

$$\begin{aligned}R_{n\ell}(r_1,r_2)=&\frac{\left(-\frac{1}{2}n\right)_\ell}{\left(\frac{1}{2}\right)_\ell}r_>^n\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^\ell\\&\times\ {}_2F_1\left(l-\frac{1}{2}n,-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}n;l+\frac{3}{2};\frac{r_<^2}{r_>^2}\right)\,.\end{aligned}\tag{15}$$

在式（15）中，$r_<=\min(r_1,r_2)$、$r_>=\max(r_1,r_2)$，且超几何函数的形式为

$$ {}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;x) = 1 + \sum_1^\infty \frac{(\alpha)_s(\beta)_s}{(\gamma)_s s!} x^s \,, \tag{16} $$

其中，Pochhammer符号定义为

$$ (\alpha)_s = \begin{cases} 1 & if\ s = 0 \\ \alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+s-1) & if\ s > 0 \end{cases} . \tag{17} $$

如果 α或 β为零或负整数，超几何函数就是有限级数，这意味着对于所有正奇整数值的 n， $R_{n\ell}$ 的级数都会终止；而对于 $n = -1$，级数仅包含首项。对于正偶数 n，求和截断至$\ell = \frac{n}{2}$，因为因子 $(-\frac{1}{2}n)_\ell$确保当 $\ell > \frac{n}{2}$ 时， $R_{n\ell}$会消失。此外，单独的函数 $R_{n\ell}$在 $n \le -2$时发散，但只要满足 $n > -3$ [35, 39]，它们仍然可积。本文的计算涉及对 $\langle\psi|r_{12}^{-2}|\psi\rangle$ 和 $\langle\psi|r_{12}^{-3}|\psi\rangle$的积分。因此，给出 r_{12}^{-2}和 r_{12}^{-3}的适当径向展开，对于径向和角向积分的计算至关重要。将 $n = -2$、 $\ell = 0$和 $n = -2$、 $\ell = 1$分别代入式（15），并对级数求和后，得到以下用反双曲正切函数 $\tanh^{-1}(x)$表示的具体表达式:

$$ R_{-2,0}(r_1,r_2) = \frac{\tanh^{-1}(x)}{x r_>^2} \,, \tag{18} $$

$$ R_{-2,1}(r_1,r_2) = \frac{3}{2x^2 r_>^2} \times \left[\left(x^2+1\right)\tanh^{-1}(x) - 1\right] \,, \tag{19} $$

其中 $x = r_</r_>$；则递推关系

$$ \frac{r_1^2+r_2^2}{r_1 r_2} R_{n,\ell} - \frac{\ell+2+\frac{1}{2}n}{\ell+\frac{3}{2}} R_{n,\ell+1} - \frac{\ell-1-\frac{1}{2}n}{\ell-\frac{1}{2}} R_{n,\ell-1} = 0 \,, \tag{20} $$

可用于计算其他 ℓ 值对应的径向函数。对于 $n = -3$, 超几何函数的展开系数会相互抵消，超几何函数则化简为 x^n 的级数求和。超几何函数可表示为与 ℓ 无关的解析函数，相应地，$R_{-3,\ l}$ 的径向展开可写为 [40]

$$ R_{-3,l}(r_1,r_2) = \frac{(2\ell+1)x^\ell}{(1-x^2)\, r_>^3} \,. \tag{21} $$

接下来，我们将给出 r_{12} 与不同次幂及 $\ln r_{12}$ 的乘积的显式公式。对式（14）求导后， $r_{12}^n \ln r_{12}$ 的展开式可表示为

$$ r_{12}^n \ln r_{12} = \sum_\ell R_{n\,\ln,\ell}(r_1,r_2) P_\ell(\cos\theta_{12}) \,, \tag{22} $$

其中， $R_{n\,\ln,\ell}(r_1,r_2)$ 表示 $r_{12}^n \ln\ r_{12}$ 的径向函数，而 $R_{n\,\ln,\ell}(r_1,r_2) = \frac{\partial R_{n\ell}(r_1,r_2)}{\partial n}$。类似地，~~对式（20）~~求导可得以下关于 $R_{n\,\ln,\ell}(r_1,r_2)$ 的递推关系，

$$ \frac{1}{2\ell+3} R_{n,\ell+1} - \frac{1}{2\ell-1} R_{n,\ell-1} = \frac{r_1^2+r_2^2}{r_1 r_2} R_{n\,\ln,\ell} - \frac{2\ell+4+n}{2\ell+3} R_{n\,\ln,\ell+1} - \frac{2\ell-2-n}{2\ell-1} R_{n\,\ln,\ell-1} \,. \tag{23} $$

因此，我们可以在本文中计算含有$r_{12}^n \ln r_{12}\,(n \ge -2)$算符的积分。例如，对于 $n = -2$、 $\ell = 0$和 $n = -2$， $\ell = 1$,

$$ R_{-2\,\ln,0} = \frac{\tanh^{-1}(x)\ln(r_>^2 - r_<^2)}{2r_>^2 x} \,, \tag{24} $$

$$ R_{-2\,\ln,1} = \frac{3\left[\ln(r_>^2 - r_<^2) - 1\right]}{4r_>^2 x^2} \times \left[\left(x^2+1\right)\tanh^{-1}(x) - x\right] \,, \tag{25} $$

对于其他 $\ell > 1$ 值，根据式 (23) 的递推关系，可以得到 $R_{-2\,\ln,\ \ell}$ 的估算值。

III. 结果与讨论

指数网格 [14] 上的 C-BSBF 通过限制在球形腔内的B样条生成。对于 $1\,^1S$ 态，腔半径为 $R_0 = 20$ a.u.；对于 $2\,^1S$ 态，腔半径为 $R_0 = 40$ a.u.；而对于 $2\,^3S$态和 $3\,^3S$态，腔半径均为 $R_0 = 70$ a.u. Yang等人[25] 采用关联B样条计算氦原子能级，其非相对论基态能量为 −2.903 724 377 1(2) a.u.。他们针对每个单独的态优化了节点分布，本文给出的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和$3\,^3S$ 态能量值列于表 II 中。基态的优化结果为−2.903 724 377 034 0(2) a.u.，其有效数字有十三位与 Drake 的结果一致。 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$ 态也达到了十四位有效数字，与 Drake 的结果一致。

表 II: 氦的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$ 和 $3\,^3S$ 态的能量。

态	本文工作	参考文献[41]
$1\,^1S$	−2.903 724 377 034 0(2)	−2.903 724 377 034 119 5
$2\,^1S$	−2.145 974 046 054 4(2)	−2.145 974 046 054 419(6)
$2\,^3S$	−2.175 229 378 236 7(2)	−2.175 229 378 236 791 30
$3\,^3S$	−2.068 689 067 472 4(2)	−2.068 689 067 472 457 19

从式 (12) 可以看出，计算$\langle p_1^4\rangle$ 涉及许多算符，可分为两类处理。一类是一般的

表 III：计算氦的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、$2\,^3S$ 和 $3\,^3S$ 态的相对论动能项所需的其他算符的期望值。

Operater	$1\,^1S$	$2\,^1S$	$2\,^3S$	$3\,^3S$
$\langle 1/r_1\rangle$	1.688 316 800 717 1(2)	1.135 407 686 126 1(2)	1.154 664 152 972 0(1)	1.063 674 075 760 7(2)
	1.688 316 800 717[a]	1.135 407 686 125 609(6)[b]	1.154 664 152 972 107 60(20)[b]	1.063 674 075 760 76(10)[b]
	1.688 316 800 635[c]	1.135 407 686[c]	1.154 664 152[c]	1.063 674 075 7[c]
$\langle 1/r_1^2\rangle$	6.017 408 867 0(3)	4.146 939 019 80(6)	4.170 445 551 31(2)	4.042 948 747 4(3)
	6.017 408 867 0(1)[a]	4.146 939 019 0(12)[b]	4.170 445 551 336 2(4)[b]	4.042 948 747 477(4)[b]
$\langle 1/r_1r_2\rangle$	2.708 655 474 480(4)	0.561 861 467 461(2)	0.560 729 635 682 9(3)	0.240 684 804 629 3(2)
	2.708 655 474 480[a]	0.561 861 467 459 6(7)[b]	0.560 729 635 682 926 40(20)[b]	0.240 684 804 629 353(11)[b]
$\langle 1/r_{12}\rangle$	0.945 818 448 799 95(5)	0.249 682 652 394 3(6)	0.268 197 855 414 82(5)	0.117 318 168 097 65(4)
	0.945 818 448 800[a]	0.249 682 652 393 566 7(19)[b]	0.268 197 855 414 847 80(20)[b]	0.117 318 168 097 636(6)[b]
	0.945 818 448 705 9[c]	0.249 682 652 3[c]	0.268 197 855 3[c]	0.117 318 168 0[c]
$\langle 1/r_1r_{12}\rangle$	1.920 943 921 900 0(5)	0.340 633 845 861 2(8)	0.322 696 221 719 8(2)	0.131 426 560 051 19(5)
	1.920 943 921 900[a]	0.340 633 845 861 0(19)[b]	0.322 696 221 719 854 32(8)[b]	0.131 426 560 051 184(5)[b]

[a] Drake [41]。
[b]Drake [42]。 [c] Yu 等人 [43]。

算符，它们的计算相对简单，包括 $1/r_1$、 $1/r_1^2$、 $1/r_1r_2$、 $1/r_{12}$ 和 $1/r_1r_{12}$。我们直接在表 III 中给出了最终的收敛值；我们的结果至少有十位有效数字与 Drake 的结果一致。这也证明了 C-BSBF 得到的波函数具有很高的精度。

另一类是 $1/r_{12}^2$ 算符以及 $\nabla_1^2\nabla_2^2$ ，它们更难计算。随着 B样条数量 N的增加，$\langle 1/r_{12}^2\rangle$、 $\langle\nabla_1^2\nabla_2^2\rangle$ 和 $\langle p_1^4\rangle$ 的数值结果列于表 IV 的最后三列。在 C-BSBF 下，采用全局算符方法可获得 $\langle 1/r_{12}^2\rangle$ 的良好收敛值。对于基态，所得结果为 1.464 770 923 3(5)，具有 11 位有效数字，与采用显式相关指数基组 [10] 和 Hylleraas 基组 [41]得到的参考值符合良好。对于氦原子的 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$ 态，我们对 $1/r_{12}^2$的期望值至少具有 8 位收敛数字，与现有文献中的结果 [9, 10, 42]均符合良好。对于 $\langle\nabla_1^2\nabla_2^2\rangle$ 算符，未能找到合适的处理方法使其更快收敛，因此采用了直接计算方法。因此， $\langle\nabla_1^2\nabla_2^2\rangle$ 的收敛精度相对较低，这也是限制 $\langle p_1^4\rangle$数值精度的主要原因。C-BSBF 得到的 $1\,^1S$ 态 $\langle p_1^4\rangle$ 结果具有 9 位数字，与 Drake 的 Hylleraas 结果 [41, 42]一致。目前三重态的数值收敛性比单重态好一至两位有效数字，我们的结果与 Hylleraas 结果 [42]也都符合良好。

我们还使用传统的 B样条基组计算了 $\langle 1/r_{12}^2\rangle$ 和 $\langle\nabla_1^2\nabla_2^2\rangle$ ，基态的结果分别为 1.463 697 和 7.079。由于这些奇异算符只有一到三位有效数字，难以用于原子能级的高精度计算。值得注意的是，主要原因在于，若不考虑电子关联效应，传统的 B样条基组难以高精度描述波函数的局部性质。

表 V 列出了来自H_{BP} 的其他三个分量的期望值，以及主要量子电动力学修正中的奇异电子-电子 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$ 。三重态的 $\delta^3(r_{12})$期望值为零，因此未列于表 V 中。Yu 等人 [43]采用相同的 C-BSBF，通过直接计算给出了 r_{12} 的幂次为$c=5$时 $\delta^3(r_1)$的数值结果，这些结果也列于表 V 中。直接计算 $\delta^3(r_1)$高度依赖波函数在原点处的取值，而全局算符方法可进一步提高计算精度。采用全局算符方法得到的基态 $\delta^3(r_1)$结果为 1.810 429 32(2)，可见 $\delta^3(r_1)$的数值精度可达到八至十二位有效数字。可以看出，除电子关联相对敏感的基态外，我们使用 $c=1$ 得到的计算精度与他们的 [43], 完全相当。他们还尝试通过提高 r_{12}的幂次来改善直接计算 $\delta^3(r_1)$的精度，但要有效提高数值收敛性，仍有必要采用全局算符方法。例如，我们得到的 $\langle\delta^3(r_{12})\rangle$在 $1\,^1S$ 态下的结果为 0.106 345 370 66(4)，比 Yu 等人 [43] 的 0.106 346 068 精确五个数量级，并且与 Drake 的 Hylleraas 值 0.106 345 370 636 3(12) [42] 也高度一致。本文给出的延迟项 H_2 至少有

表 IV：随着 B 样条数量 N 增加，氦的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$ 和 $3\,^3S$ 态的相对论动能项的收敛情况。第二列和第三列还列出了 $1/r_{12}^2$ 和 $\nabla_1^2\nabla_2^2$ 的期望值。分波为 $\ell_{max}=4$。

N	$\langle 1/r_{12}^2\rangle$	$\langle \nabla_1^2\nabla_2^2\rangle$	$\langle p_1^4\rangle$
		$1\,^1S$	
50	1.464 770 923 579	7.133 709 835	54.088 067 177
60	1.464 770 923 463	7.133 709 771	54.088 067 242
70	1.464 770 923 406	7.133 709 763	54.088 067 251
外推值	1.464 770 923 3(5)	7.133 709 7(2)	54.088 067 2(2)
参考文献 [10]	1.464 771	7.133 710	
参考文献 [41]	1.464 770 923 350(1)		54.088 067 230(2)
		$2\,^1S$	
50	0.143 724 814 027	1.428 212 689 1	41.118 675 563 8
60	0.143 724 814 013	1.428 212 706 4	41.118 675 546 0
70	0.143 724 814 008	1.428 212 705 8	41.118 675 546 6
外推。	0.143 724 814 00(5)	1.428 212 70(4)	41.118 675 54(4)
参考文献 [10]	0.143 725	1.428 213	
参考文献 [42]	0.143 724 814 00(7)		41.118 675 544(19)
		$2\,^3S$	
50	0.088 906 004 870	0.488 197 568 41	41.835 540 798 28
60	0.088 906 004 913	0.488 197 569 31	41.835 540 797 46
70	0.088 906 004 921	0.488 197 569 91	41.835 540 796 85
外推值	0.088 906 004 9(2)	0.488 197 570(4)	41.835 540 796(4)
参考文献[9]	0.088 906	0.488 198	
参考文献 [42]	0.088 906 004 932 625(5)		41.835 540 797 348(6)
		$3\,^3S$	
50	0.023 097 669 645	0.329 220 596 46	40.475 439 870 27
60	0.023 097 669 653	0.329 220 596 68	40.475 439 868 42
70	0.023 097 669 655	0.329 220 596 89	40.475 439 868 25
外推值	0.023 097 669 65(3)	0.329 220 597(2)	40.475 439 868(5)
参考文献 [42]	0.023 097 669 656 893(13)		40.475 439 868 127 2(3)

七位收敛数字，并与 Drake 的 [42]一致。采用 C-BSBF 和全局算符方法计算了奇异电子-电子 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$ 的期望值，并将其与使用不同基函数得到的既有结果进行了比较。对于基态，C-BSBF 得到的结果为 0.989 272(2)，精度达到小数点后五位；其数值精度与显式关联高斯（ECG）函数 [44] 和指数基函数 [45], 分别得到的 0.989 273 5 和 0.989 272 4(13) 相当。Drake 分别采用 Hylleraas 基组和指数基组 [42] ，将参考值提高了三位有效数字。若采用更高的 r_{12}幂次，预计我们的基态结果可以恢复 Drake 结果中更多位数字。对于 $2\,^1S$ 和$2\,^3S$ 态，我们的结果与采用 Hylleraas 基组和指数基组 [28]得到的既有结果一致。我们对 $3\,^3S$ 态得到的结果$\langle 1/r_{12}^3\rangle$=0008 922 57(2)有五位收敛数字。

奇异的电子-电子 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$ 期望值也使用传统的 B 样条基组进行计算，基态结果为 1.197($N=70$, $\ell_{max}=4$)。可以看出，传统 B 样条在计算 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$时完全不准确，而这种具有发散性的算符需要比 $1/r_{12}^2$ 和 $\nabla_1^2\nabla_2^2$更准确地描述波函数 [44]的局部性质。因此，包含电子关联的 B 样条基组至关重要。

最终的相对论修正列于表VI上半部分。我们将结果与使用显式相关指数基组 [11] 和Hylleraas 基组 [42]得到的结果进行了比较。我们的相对论修正结果与此前最精确的计算结果完全一致 [11, 42] ，有效数字可达八至十位。表VI下半部分汇总了S 态能级的主要量子电动力学修正，其中分别以利用B样条 [22, 26], 得到的贝特对数值和Korobov的贝特对数值 [33] 作为基准。可以看出，我们的计算结果与Yerokhin等人[11], 列出的有效数字吻合良好；其中，使用Korobov的贝特对数值计算的单重态结果与B样条得到的结果几乎完全相同，这主要是因为 δ^3（r_1）和 $1/r_{12}^3$的精度相对较低，而三重态精度的提高则是贝特对数精度有限所致。

表 V：氦的 $1\,^1S$、$2\,^1S$、$2\,^3S$ 和 $3\,^3S$ 态的 $\delta^3(r_1)$、$\delta^3(r_{12})$、H_2 和 $1/r_{12}^3$ 的期望值。并与现有文献中的结果进行了比较。分波为 $\ell_{max}=4$。

N	$\langle\delta^3(r_1)\rangle$	$\langle\delta^3(r_{12})\rangle$	$\langle H_2\rangle$	$\langle 1/r_{12}^3\rangle$
		$1\,^1S$		
50	1.810 429 325 97	0.106 345 370 649 3	−0.139 094 671 8	0.989 271 57
60	1.810 429 323 14	0.106 345 370 658 3	−0.139 094 675 1	0.989 271 98
70	1.810 429 321 51	0.106 345 370 646 3	−0.139 094 677 3	0.989 272 26
外推值	1.810 429 32(2)	0.106 345 370 66(4)	−0.139 094 67(2)	0.989 272(2)
参考文献[43]	1.810 429 318 371 521 8	0.106 346 068		
参考文献[42]	1.810 429 318 499 0(6)	0.106 345 370 636 3(12)	−0.139 094 690 539 20(20)	0.989 273 544 768(13)
参考文献[44]				0.989 273 5
参考文献[45]				0.989 272 4(13)
		$2\,^1S$		
50	1.309 460 780 907	0.008 648 433 612 1	−0.009 253 044 67	0.067 946 402
60	1.309 460 780 719	0.008 648 433 588 4	−0.009 253 044 78	0.067 946 439
70	1.309 460 780 607	0.008 648 433 587 3	−0.009 253 044 97	0.067 946 465
外推值	1.309 460 780 5(8)	0.008 648 433 58(5)	−0.009 253 045(2)	0.067 946 4(2)
参考文献[43]	1.309 460 780 3	0.008 648 6		
参考文献[42]	1.309 460 780 1(4)	0.008 648 433 6(14)	−0.009 253 046 05(4)	
参考文献[46]				0.067 946 32
		$2\,^3S$		
50	1.320 355 082 933 78		−0.001 628 430 082 9	0.038 861 479 8
60	1.320 355 082 931 58		−0.001 628 430 067 4	0.038 861 479 6
70	1.320 355 082 931 10		−0.001.628 430 064 8	0.038 861 481 0
外推。	1.320 355 082 930(6)		−0.001 628 430 06(4)	0.038 861 46(3)
参考文献[43]	1.320 355 082 9			
参考文献[42]	1.320 355 082 934 92(9)		−0.001 628 430 061 553(3)	
参考文献[46]				0.038 861 485 631 95
		$3\,^3S$		
50	1.285 060 253 969 23		−0.000 504 504 232 33	0.008 922 569 5
60	1.285 060 253 936 06		−0.000 504 504 228 95	0.008 922 569 6
70	1.285 060 253 938 13		−0.000 504 504 228 33	0.008 922 569 9
外推。	1.285 060 253 93(7)		−0.000 504 504 228(9)	0.008 922 57(2)
参考文献[43]	1.285 060 253 9			
参考文献[42]	1.285 060 253 932 1(13)		−0.000 504 504 227 201(9)	

对于其他态，主要量子电动力学修正的总体计算精度主要由贝特对数的贡献决定；对于基态，则主要由荒木-苏赫项和 δ^3（r_1）的贡献决定。可以看出，主要量子电动力学修正结果至少可达到七位有效数字，这已达到本文主要相对论修正贡献的精度水平。此外，随着基组函数中 r_{12} 的幂次 c 增加，单重态的数值精度有望提高。

IV. 总结与展望

在本研究中，我们使用 C-BSBF 计算了氦原子能级的主要相对论修正和量子电动力学修正。相对论动能项 p_1^4、接触势 $\delta^3(r_1)$ 的期望值，$\delta^3(r_{12})$以及荒木-苏切尔修正 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$较难直接计算，因此采用全局算符方法处理，以改善数值收敛性；此外，还引入双电子距离函数，以处理Sack提出的拉普拉斯展开法 [38]。结合对贝特对数 [26], 的高精度计算，C-BSBF能够实现对氦原子能级的主要相对论修正和量子电动力学修正的高精度计算。需要强调的是，C-BSBF中的相关因子 r_{12} 对于计算p_1^4、$\delta^3(r_{12})$和 $\langle 1/r_{12}^3\rangle$至关重要；若缺少该因子，这些算符的收敛速度会非常慢。基于其近似线性无关性以及对电子相关的充分考虑，C-BSBF能够实现稳定的数值收敛。从表VII可以看出，C-BSBF能够将 $2\,^3S-2\,^1S$ 跃迁频率（精确至 $m\alpha^5$阶修正）的精度确定在千赫兹水平，这与

表VI：氦的 $1\,^1S$、 $2\,^1S$、 $2\,^3S$和 $3\,^3S$态的主要相对论修正和量子电动力学修正， δE_{rel}和 δE_{QED}。同时列出了现有文献中的相应对比数据。

	$1\,^1S$	$2\,^1S$	$2\,^3S$	$3\,^3S$
主要相对论修正				
$\delta E_{rel}/\alpha^2$	−1.951 754 7(2)	−2.034 167 33(2)	−2.164 477 971(2)	−2.045 092 764(2)
参考文献 [42]	−1.951 754 767	−2.034 167 342	−2.164 477 972	−2.045 092 764
主要量子电动力学修正				
$\delta E_{QED}/\alpha^3$（采用 B样条 的 BL）	57.288 165(2)	42.523 605 2(2)	43.010 017(2)	41.839 303 4(7)
$\delta E_{QED}/\alpha^3$（Korobov 给出的 BL）	57.288 165(1)	42.523 605 10(8)	43.010 017 06(2)	41.839 301 459(9)
参考文献 [11]	57.288 165 2	42.523 605 1	43.010 016 8	

Pachucki等人的结果一致，达到与最新实验相近的水平 [1]。若采用更高次幂的 r_{12}，预计我们的结果还能进一步改进。计算采用双精度，无需多精度。这种方法为计算原子能级提供了一种新途径。

表VII：氦原子沿领先相对论修正和量子电动力学修正的 2^3S-2^1S 跃迁频率，单位为千赫兹。

	$\Delta E(2^3S-2^1S)$	参考文献[47]
NR	192 490 838 748(2)	192 490 838 756
$m\alpha^4$	45 657 862(8)	45 657 859
$m\alpha^5$	−1 243 669(6)	−1 243 671
实验值 [1]	192 510 702 148.72(20)	

最近，Mitroy 和 Tang 提议利用消零波长检验量子电动力学理论，这为检验基本原子结构理论开辟了一条新途径 [48]。氦原子的 413纳米零极化波长2^3S_1 在 Baldwin团队最新实验结果与 Drake 基于 Hylleraas 基组、采用非相对论量子电动力学方法得到的理论值之间存在差异 [49], 其中的计算仅估算了贝特对数的电场依赖性 [50]。预计实验精度将进一步提高，从而能够以更高精度检验量子电动力学理论。对贝特对数的电场依赖性进行从头计算，对于进一步提高 413 nm 零光移波长的理论预测精度、使其达到 ppb 量级十分重要。本研究中 C-BSBF 在奇异算符计算中的成功应用表明，C-BSBF 有望用于计算贝特对数的电场依赖性，从而提高 413 nm 零光移波长的理论计算精度。除此之外，未来还可将 C-BSBF 扩展用于氦原子的布雷特–泡利算符二阶微扰 [51] 以及贝特对数的相对论修正 [52] 。

V. 致谢

本工作得到中国国家自然科学基金（项目编号：12274423和12274417）以及中国科学院基础研究青年科学家项目（项目编号：YSBR-055）的资助。

[1] R. Rengelink、Y. van der Werf、R. Notermans、R. Jan-nin、K. Eikema、M. Hoogerland和W. Vassen, *Precision spectroscopy of helium in a magic wavelength optical dipole trap* **14**, 1132 2018 ，《自然·物理》（）。[2] X. Zheng、Y. R. Sun、J. J. Chen、W. Jiang、K. Pachucki和S. M. Hu, *Measurement of the frequency of the* 2^3S-2^3P *transition of* ^{4} **119**, 263002 氦，《物理评论快报》（2017年）。[3] G. Clausen、P. Jansen、S. Scheidegger、J. A. Agner、H. Schmutz和F. Merkt, *Ionization energy of the metastable* $2\,^1{}_0$ *state of* ^{4} *from rydberg-series extrap-* S He, 《物理评论快报》（）。[4] K. Kato、T. D. G. Skinner和E. A. Hessels, *olation* **127**, 093001 2021 *Ultrahigh-precision measurement of the* $n_1=2$ *triplet P fine structure of atomic helium using frequency-offset separated oscillatory fields* **121**, 143002 2018 ，《物理评论快报》（）。[5] X. Zheng、Y. R. Sun、J. J. Chen、W. Jiang、K. Pachucki, 以及 S. M. Hu, *Laser spectroscopy of the fine-structure splitting in the* 2^3P_J *levels of* ^{4} 氦，《物理评论快报》118，063001 2017( )。[6] P. Cancio Pastor、L. Consolino、G. Giusfredi、P. De Na-tale、M. Inguscio、V. A. Yerokhin 和 K. Pachucki, *Fre-quency metrology of helium around 1083nm and mination of the nuclear charge radius* ，《物理评论快报》108，143001 (2012)。[7] D. Shiner、R. Dixson 和 V. Vedantham, *Three-nucleon charge radius: A precise laser determination using* ^{3} 氦，《物理评论快报》74，3553 (1995)。[8] V. Patk´ *Complete* o˘s、V. A. Yerokhin 和 K. Pachucki, *α*^{7}*m lamb shift of helium triplet states* ，《物理评论A》103，042809 2021( )。[9] V. Patk´o˘s、V. A. Yerokhin 和 K. Pachucki, *Higher-order recoil corrections for triplet states of the helium atom* **94**, 052508 2016 ，《物理评论A} ( )。

[10] V. Patk´o˘s、V. A. Yerokhin 和 K. Pachucki, *Higher-order recoil corrections for singlet states of the helium atom* **95**, 012508 2017 , 《物理评论A》 ( )。[11] V. A. Yerokhin 和 K. Pachucki, *Theoretical energies of low-lying states of light helium-like ions* , 《物理评论A》81，022507 (2010)。[12] X. Q. Qi、P. P. Zhang、Z. C. Yan、G. W. F. Drake、Z. X. Zhong、T. Y. Shi、S. L. Chen、Y. Huang、H. Guan 和 K. L. Gao, *Precision calculation of hyperfine structure and the zemach radii of* ^{6}, $^7Li^+$ *ions*, 《物理评论快报》125, 183002 (2020)。[13] W. R. Johnson 和 J. Sapirstein, *Computation of second-order many-body corrections in relativistic atomic systems* **57**, 1126 1986 , 《物理评论快报》 ( )。[14] H. Bachau、E. Cormier、P. Decleva、J. E. Hansen 和 F. Mart´ın, *Applications of B−splines in atomic and molecular physics* **64**, , 《物理学进展报告》 ( )。[15] C. Froese Fischer, *B-splines in variational atomic structure calculations* , 《原子、分子与光物理学进展》55，235 (2008)。[16] X. B. Bian、L. Y. Peng 和 T. Y. Shi, *Ionization dynamics of linear molecular ion* $_3{}^{2+}$ *in dc and low-frequency laser fields* **78**, 053408 2008 , 《物理评论A》 ( )。[17] Y. X. Zhang、Q. Liu 和 T. Y. Shi, *Accurate one-center method for hydrogen molecular ion calculation using B-splines in strong magnetic fields* , 《J. Phys. B》45，085101 (2012)。[18] Y. B. Tang、Z. X. Zhong、C. B. Li、H. X. Qiao 和 T. Y. Shi, *Bethe logarithm calculation using the B-spline method* **87**, 022510 2013 , 《物理评论A》 ( )。[19] S. L. Hu、Z. X. Zhao 和 T. Y. Shi, *B-spline one-center method for molecular Hartree–Fock calculations* , 《国际量子化学》114，441 (2014)。[20] Y. H. Zhang、L. Y. Tang、X. Z. Zhang 和 T. Y. Shi, *Tune-out wavelength around 413 nm for the helium* 2^3S_1 *state including relativistic and finite-nuclear-mass corrections* **93**, 052516 2016 , 《物理评论A》 ( )。[21] Y. B. Tang、B. Q. Lou 和 T. Y. Shi, *Relativistic multireference coupled-cluster theory based on a B-spline basis: Application to atomic francium* , 《物理评论A》96，022513 2017( )。[22] Y. H. Zhang、L. J. Shen、C. M. Xiao、J. Y. Zhang 和 T. Y. Shi, *Calculations of bethe logarithm for hydrogen and helium using B-splines in different gauges* , 《J. Phys. B》53，135003 (2020)，arXiv:1903.08802(2019)。[23] Y. C. Lin、C. Y. Lin 和 Y. K. Ho, *Spectral data of helium atoms with screened coulomb potentials using the B-spline approach* **85**, 042516 2012 , 《物理评论A》 ( )。[24] F. F. Wu、S. J. Yang、Y. H. Zhang、J. Y. Zhang、H. X. Qiao、T. Y. Shi 和 L. Y. Tang, *Relativistic full-configuration-interaction calculations of magic wavelengths for the* $2\ ^3S_1 \to 2\ ^3S_0$ *transition of helium isotopes* **98**, 040501 2018 , 《物理评论A》 ( )。[25] S. J. Yang、X. S. Mei、T. Y. Shi 和 H. X. Qiao, *Application of the Hylleraas-B-spline basis set: Static dipole polarizabilities of helium* **95**, 062505 2017 , 《物理评论A》 ( )。[26] S. J. Yang、Y. B. Tang、Y. H. Zhao、T. Y. Shi 和 H. X. Qiao, *Application of the Hylleraas-B-spline basis set: Nonrelativistic bethe logarithm of helium* , 《物理评论A》100，042509 (2019)。[27] A. P. Stone, *Nuclear and relativistic effects in atomic spectra* **77**, 786 1961 , 《Proc. Phys. Soc.》 ( )。[28] G. W. F. Drake, *High precision variational calculations for the* $1s^2\ ^1S$ *state of* H^- *and the* $1s^2\ ^1S$ $1s2s\ ^1S$ *and* $1s2s\ ^3S$ *states of helium* 与方法物理研究，B辑》31，7（1988年）。[29] E. Tiesinga、P. J. Mohr、D. B. Newell 和 B. N. Taylor, *CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018* **50**, 033105 , 《物理与化学参考数据》（2021年）。[30] H. A. Bethe 和 E. E. Salpeter, *Quantum mechanics ofone- and two-electron atoms*（施普林格科学与商业媒体，2012年）。[31] H. Araki, *Quantum-Electrodynamical Corrections to Energy-Levels of Helium* **17**, 619 , 《理论物理进展》（1957年）。[32] J. Sucher, *Energy levels of the two-electron atom to order* α^3 *ry; ionization energy of helium* **109**, 1010 , 《物理评论》（1958年）。[33] V. I. Korobov, *Bethe logarithm for the helium atom*, 《物理评论A》100，012517（2019年）。[34] M. Stanke、J. Jurkowski 和 L. Adamowicz, *Algorithms for calculating the leading quantum electrodynamics* $P\ 1/r^3$ *correction with all-electron molecular explicitly correlated gaussians* **50**, 065101 2017 , J. Phys. B ( )。[35] A. M. Frolov, *Highly accurate three-body wavefunctions for the* $2^3S\ L = 0$ *states in two-electron ions* , J. Phys. B 38，3233（2005年）。[36] R. Drachman, *A new global operator for two-particle delta functions* **14**, 2733 1981 , J. Phys. B ( )。[37] K. Pachucki 和 J. Komasa, *Relativistic and QED corrections for the beryllium atom* **92**, 213001 , 《物理评论快报》（2004年）。[38] R. A. Sack, *Generalization of laplace's expansion to arbitrary powers and functions of the distance between two points* **5**, 245 1964 , 《数学物理杂志》 ( )。[39] Z. C. Yan 和 G. W. F. Drake, *On the evaluation of two-electron integrals in hylleraas coordinates* , 《化学物理快报》259，96（1996年）。[40] M. L. Lewis 和 V. W. Hughes, *Higher-order relativistic contributions to the zeeman effect in helium* , 《物理评论A》8，2845（1973年）。[41] G. W. Drake, *Springer handbook of atomic, molecular, and optical physics*（施普林格科学与商业媒体，2006年）。[42] G. W. F. Drake, 《氦原子希勒拉斯坐标下薛定谔方程求解笔记》, 网址 http://drake.sharcnet.ca/wiki/index.php/Downloada

能_资源。

[43] Y. W. Yu、C. D. Zhou 和 H. X. Qiao, *Geometric structure parameters of ground and singly excited states of helium* **76**, 1 2022 , Eur. Phys. J. D ( )。[44] K. Pachucki、W. Cencek 和 J. Komasa, *On the acceleration of the convergence of singular operators in gaussian basis sets* **122**, 184101 2005 , J. Chem. Phys. ( )。[45] K. Pachucki 和 J. Sapirstein, *Recoil corrections to the lamb shift in helium* **33**, 455 2000 , J. Phys. B ( )。[46] G. W. F. Drake 和 Z. C. Yan, *Energies and relativistic corrections for the rydberg states of helium: Variational results and asymptotic analysis* **46**, 2378 , 《物理评论A》（1992年）。[47] K. Pachucki、V. Patk´o˘s 和 V. A. Yerokhin, *Testing fundamental interactions on the helium atom* , 《物理评论A》95，062510 (2017年)。[48] J. Mitroy 和 L. Y. Tang, *Tune-out wavelengths for metastable helium* **88**, 052515 2013 , 《物理评论A》 ( )。[49] B. M. Henson、J. A. Ross、K. F. Thomas、C. N. Kuhn,

D. K. Shin、S. S. Hodgman、Y. H. Zhang、L. Y. Tang、G. W. F. Drake、A. T. Bondy 等，*Measurement of a helium tune-out frequency: an independent test of quantum electrodynamics* **376**, 199 2022，Science（）。

[50] G. Lach、B. Jeziorski 和 K. Szalewicz，*Radiative corrections to the polarizability of helium*，《物理评论快报》92，233001（2004年）。

[51] K. Pachucki，*$\alpha^4\mathcal{R}$ corrections to singlet states of helium*，《物理评论A》74，022512（2006年）。

[52] V. A Yerokhin、V. Patk´os 和 K. Pachucki，*Relativisticstates of He corrections to the bethe logarithm for the 2 3 and 2 1* **98**, 032503 2018，《物理评论A》（）。