arXiv:2302.06288v2 [physics.atom-ph] 5 Jun 2023

氢和类氢离子的束缚态与超精细分裂：有限核尺寸效应

Igor Kuzmenko[1,2], TetyanaKuzmenko[1], Y. Avishai[1,3], Y. B. Band[1,2,41] *Department of Physics, Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva 84105, Israel*[2] *Department of Chemistry, Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva 84105, Israel*[3] *Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan*[4] *The Ilse Katz Center for Nano-Science, Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva 84105, Israel*

我们利用狄拉克方程，研究有限核尺寸（FNS）效应、相对论性 QED 辐射修正和核反冲修正对原子氢及类氢离子的电子结合能与超精细分裂的影响。我们考虑了三种描述原子核内电荷分布和磁矩分布的模型。计算对象包括轻原子（H、He 和 K）以及重原子（Rb、Cs、Pb、Bi 和 U）。结果表明，对于轻核，基态能量的有限核尺寸修正小于电子-原子核约化质量修正，且与相对论性 QED 辐射修正相当；而对于重核，这种修正远大于上述两种修正。我们将计算结果与氢的 $1s$-$2s$ 跃迁频率实验进行了比较。对于轻核，基态超精细分裂的有限核尺寸修正与相对论性 QED 辐射修正的量级相当；而对于重核，前者更大。

I. 引言

氢是宇宙中最丰富的元素，而原子氢具有最简单的电子结构。如果将原子氢中的质子视为点电荷，则在非相对论框架（使用薛定谔方程）和相对论框架（使用狄拉克方程）下，波函数和束缚态能量均存在解析表达式 [1–5]。如果将原子核视为点电荷，类氢离子（HLI）也具有这一性质。此外，这些体系的基态超精细分裂也可以解析地求得（如果已知原子核的 g-因子） [6–8]。然而，原子核并非点状；即使质子也是一种具有有限半径的复合粒子，$r_p = 0.8414(19) \times 10^{-15}\,\mathrm{m} = 1.5900(36) \times 10^{-5}$ 玻尔[9]。本文考察有限核尺寸（FNS） r_N （以及核电荷分布）、核反冲修正和QED辐射修正对氢和类氢离子（H&HLI）的电子性质及超精细分裂的影响。

氢和类氢离子的束缚能有限核尺寸（FNS）修正（即有限核半径修正）已得到广泛研究，参见例如参考文献 [6– 8, 10–17, 20–23] 及其中引用的文献。理论研究通常采用含相对论修正（例如自旋轨道耦合）的薛定谔方程，这些修正通过 $1/c$ 展开得到 [4]。可以应用瑞利–薛定谔微扰理论，计算基态超精细分裂的核结构修正以及电子跃迁能量 [15]。然而，核电荷较大的氢和类氢离子的基态束缚能，ϵ，并不远小于 $m_e c^2$；其中 m_e 是电子质量，因此必须进行完全相对论计算。例如，对于铀类氢离子， $\epsilon \approx 0.2588\, m_e c^2$。因此，使用薛定谔方程（即使考虑自旋轨道相互作用）也不足以描述重核；必须使用狄拉克方程。此外，即使对于轻核，要获得高精度结果，也应进行相对论计算。在参考文献 [15], 中，作者求解薛¨定谔方程，并加入自旋轨道相互作用等相对论修正。他们假设核电荷在原子核内部均匀分布，并求得基态能量的修正 $(2/3)\, Z\epsilon_H r_N^2/a_0^2 \ll Z\epsilon_H$，其中以高斯单位制表示时$\epsilon_H = e^2/a_0$ 为哈特里能， r_N 为核电荷半径，而 a_0 为玻尔半径。然而，对于高 Z核，应采用相对论狄拉克方程。在参考文献 [16, 17], 中，作者求解了具有有限核尺寸、且核电荷分布于原子核表面的氢原子的狄拉克方程；他们将原子核内部波函数的位置依赖关系近似为多项式，并求得了基态和激发态的束缚能。需要指出的是，对于氢和轻核，使用狄拉克方程计算有限核尺寸修正的微扰理论是很好的近似。这种近似在非相对论极限下可得有限核尺寸修正的闭式表达式 [，见方程（69）]。然而，微扰理论不适用于高 Z 核。

H&HLI体系传统上用于对量子力学和核结构进行超高精度实验检验，因为不存在多电子效应带来的复杂性 [18, 19]。将我们的计算结果与这些实-验结果进行比较至关重要。此外，已有关于μ子氢原子的精确实验报告（μ子氢中，带负电的μ子取代了电子），例如参见 [8, 12]。

本文在相对论狄拉克方程框架下，计算了 H&HLI 中若干元素及其同位素的基态（$1S_{1/2}$）和激发态 S 能量的有限核尺寸修正，以及基态超精细能级分裂的有限核尺寸修正。我们采用三种不同的模型

来描述原子核内球对称的电荷和磁矩分布：模型 (a) 中，核电荷和核磁矩均匀分布在半径为 r_a 的球体表面。模型 (b) 中，核电荷和核磁矩均匀分布在半径为 r_b 的原子核内部。模型 (c) 中，我们采用所谓的双参数费米模型（TPFM）来描述核电荷密度和磁矩密度分布 [21, 22, 24], ，这些分布在原子核表面附近平滑衰减。由于缺少磁矩密度的相关参数，核电荷和核磁矩采用相同的分布。

我们还计算了 H&HLI 基态超精细分裂的有限核尺寸修正，其来源包括：(1) 原子核电荷分布的修正，以及 (2) 原子核磁矩分布的修正，即玻尔 - 魏斯科夫修正 [13, 14]。H&HLI 基态超精细分裂的测量属于精度最高的测量量之一 [6–8]。这些测量已被用于确定核半径和核 g 因子。为了将有限核尺寸修正的理论计算与实验测量进行比较，需要纳入相对论量子电动力学（QED）辐射修正 [20]。参考文献 [6– 8、13、14、20–22, 26] 对基态超精细分裂的有限核尺寸修正进行了分析。在参考文献 [8], 中，作者报告了对氢基态超精细分裂的测量，并用其估算质子半径。在参考文献 [7, 13, 14, 20, 21], 中，作者采用 QED 辐射修正，并计算了 H&HLI 基态超精细分裂的有限核尺寸修正。参考文献 [22, 26] 研究了高-ZHLI 的超精细分裂。

本文结构如下。第 II 节中，我们建立 H&HLI 的狄拉克方程，其中电子的势能由模型（a）和（b）确定。第 III 节研究 H&HLI 的电子束缚态。第 III A 节给出点状原子核的狄拉克方程解。第 III B 节给出模型（a）的狄拉克方程解析解，第 III C 节给出模型（b）的数值解。第 IV 节利用微扰理论计算模型（a）和（b）对基态能量的有限核尺寸效应。第 V 节讨论核电荷分布的 TPFM。第 VI 节计算基态超精细分裂。第 VII 节估算由核 g-因子、 δg_I 以及核半径 δr_N 的不确定度引起的超精细分裂不确定度；第 VIII 节将模型（a）、（b）和（c）的结果与实验进行比较。第 IX 节总结主要结果。附录中介绍若干技术细节。具体而言，附录A讨论核电荷均方根半径 r_N；附录 B 计算 $\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}$ 的矩阵元，其中 $\mathbf{e}_r$ 是从原子核指向电子的位置矢量 r 方向上的基矢，而 $\boldsymbol{\alpha}$ 是.....的矢量

狄拉克矩阵。附录 D 讨论核壳层闭合且外有一个核子的原子核的磁矩分布。

II. 有限核尺寸势的模型

H&HLI 的定态狄拉克方程为：

$$\Big[-i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + V(r) + \beta m_e c^2\Big]\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中， m_e 是电子质量， $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是 4×4 狄拉克矩阵， $V(r) = V_C(r) = -Ze^2/r$ 是库仑势，其中 Z 是核电荷。在模型 (a) 中，核电荷分布在半径为 r_a 的球体表面上，因此原子核内部的势为常数；而在模型 (b) 中，核电荷密度 $\varrho_b(r)$ 均匀分布在半径为 r_b的球体内部，

$$\varrho_b(r) = \frac{3Ze}{4\pi r_b^3}\,\Theta(r_b - r), \quad (2)$$

其中， $\Theta(\bullet)$ 是赫维赛德阶跃函数。因此，模型 (b) 的势在原子核内部呈二次形式。模型（a）和（b）的势的显式表达式为：

$$V_a(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r_a}, & r \le r_a, \\ -\dfrac{Ze^2}{r}, & r > r_a, \end{cases} \quad (3)$$

$$V_b(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{2r_b}\Big(3 - \dfrac{r^2}{r_b^2}\Big), & r \le r_b, \\ -\dfrac{Ze^2}{r}, & r > r_b, \end{cases} \quad (4)$$

核半径 r_a 和 r_b 用均方根（RMS）核电荷半径 r_N 表示为 [10, 27]:

$$r_a = r_N, \quad r_b = \sqrt{\frac{5}{3}}\,r_N. \quad (5)$$

详情请参见附录A。

有限核尺寸势与库仑势之间的差异就是排斥势

$$W_\nu(r) = V_\nu(r) - V_C(r) \quad \nu = a, b. \quad (6)$$

请注意，在两种模型中， $V_\nu(r) = V_C(r) + W_\nu(r)$ 的吸引力都弱于$V_C(r)$。我们还定义了差势 $W_{ba}(r) = V_b(r) - V_a(r)$,

$$W_{ba}(r) = \left\{ \begin{array}{cc} \dfrac{Ze^2}{r_a} - \dfrac{Ze^2}{2r_b}\Big(3 - \dfrac{r^2}{r_b^2}\Big), & r \le r_a, \\ \dfrac{Ze^2}{r} - \dfrac{Ze^2}{2r_b}\Big(3 - \dfrac{r^2}{r_b^2}\Big), & r_a < r \le r_b, \\ 0 & r > r_b, \end{array} \right\} \quad (7)$$

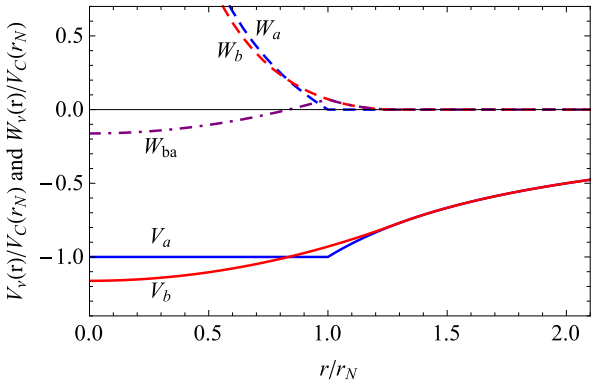


图 1。氢原子的势 $V_{\nu=a}(r)$ 和 $V_{\nu=b}(r)$ 随 r 的变化，由方程 (3) 和 (4) 定义（分别以蓝色和红色实线表示）。排斥势 $W_\nu(r)$、$= V_\nu(r)$、$- V_C(r)$（分别以蓝色和红色虚线表示），以及方程 (7) 中定义的差势 $W_{ab}(r)$（以紫色点划线表示）。注意，对于 $r > r_\nu$，$W_\nu(r) = 0$。这里，r_a 和 r_b 由方程 (5) 给出。

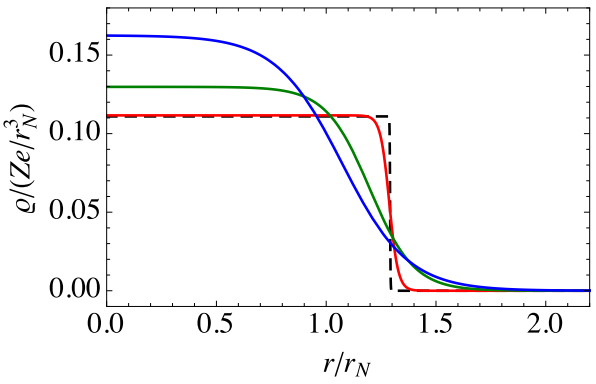


图 2。TPFM 的电荷密度 ϱ 随 r/r_N 的变化，参见方程 (80)]，图中展示了三种不同平滑参数对应的结果（彩色实线）以及模型 (b) 的电荷密度 [，参见方程 (2)]（黑色虚线）。ϱ 在整个空间上的积分等于 Ze。

这将在下面的微扰分析中派上用场。需要将$W_{ba}(r)$加到 $V_a(r)$上，才能得到 $V_b(r)$。图 1 绘出了方程（3）和（4）中给出的势 $V_a(r)$ 和 $V_b(r)$、排斥势$W_{a,\ b}(r)$，以及差势 $W_{ba}(r)$ 随 r的变化。

核半径 r_a、r_b 及其不确定度 δr_a、δr_b，用核均方根电荷半径 r_N 及其不确定度 δr_N 表示如下：

$$\begin{aligned} r_a \pm \delta r_a &= r_N \pm \delta r_N, \\ r_b \pm \delta r_b &= \sqrt{\frac{5}{3}}\,(r_N \pm \delta r_N). \end{aligned} \tag{8}$$

不确定度 δr_ν 会导致 $V_\nu(r)$ 的不确定度：

$$V_\nu(r) \pm \delta V_\nu(r) = V_\nu(r) \pm \left|\frac{\partial V_\nu(r)}{\partial r_\nu}\right| \delta r_\nu. \tag{9}$$

具体而言，

$$\delta V_a(r) = \frac{Ze^2 \delta r_a}{r_a^2}\Theta(r_a - r), \tag{10}$$

and

$$\delta V_b(r) = \frac{3Ze^2 \delta r_b}{2r_b^2}\left(1 - \frac{r^2}{r_b^2}\right)\Theta(r_b - r). \tag{11}$$

在第 V 节中，我们将介绍用于核电荷分布的 TPFM [21, 22, 24]，，并将其称为模型 (c) [，见方程 (80)]。在该模型中，r_N 附近的核电荷分布是平滑的。图2绘出了三种不同平滑参数下的电荷分布，以及模型 (b) 的电荷分布（见虚线）。TPFM 电荷分布的形状有时也称为伍兹-萨克森形状。TPFM 电荷分布产生的势也称为伍兹-萨克森势。它可以通过解析方法确定，进而可以数值求解狄拉克方程。

该模型的势可以通过解析方法确定，然后通过数值求解狄拉克方程，得到重核在此势下的狄拉克方程本征态的数值解。

III. 狄拉克方程束缚态

狄拉克四分量旋量波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 可写为以下形式 [29],

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g(r)\,\Omega_{jlm} \\ i f(r)\,\Omega_{jl'm} \end{pmatrix}, \tag{12}$$

其中，Ω_{jlm} 是归一化的球谐旋量，它是总电子角动量算符平方 J^2, 、电子轨道角动量算符平方 L^2, 、电子自旋角动量算符平方 S^2 以及总电子角动量算符的z投影 J_z 的本征函数。这些算符的本征值分别为 $j(j+1)$、$l(l+1)$、$_{3\,4}$和 m，其中 $l = j \pm \frac{1}{2}$ 和 $l' = 2j - l$。径向波函数 $g(r)$ 和 $f(r)$ 满足以下方程，

$$\begin{aligned} \hbar c\left[\big(rg(r)\big)' + \frac{\kappa}{r}\big(rg(r)\big)\right] &= \\ \big[m_e c^2 - V(r) + \varepsilon\big]\big(rf(r)\big), & \qquad (13a) \\ \hbar c\left[\big(rf(r)\big)' - \frac{\kappa}{r}\big(rf(r)\big)\right] &= \\ \big[m_e c^2 + V(r) - \varepsilon\big]\big(rg(r)\big), & \qquad (13b) \end{aligned}$$

其中 $\kappa = -1$ 对于 s态。S 或 s？

A. 点状原子核的狄拉克方程（13）的解

点状原子核（即，对于 $r_N = 0$）的方程（13）解众所周知 [29]；对于 s态，

$$g(r) = \mathcal{N}\sqrt{m_e c^2 + \varepsilon}\left[Q_1(\rho) + Q_2(\rho)\right]\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \quad (14a)$$

$$f(r) = -\mathcal{N}\sqrt{m_e c^2 - \varepsilon}\left[Q_1(\rho) - Q_2(\rho)\right]\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \quad (14b)$$

其中，$\mathcal{N}$ 是由方程 $\int_0^\infty \left(|g(r)|^2 + |f(r)|^2\right)r^2 dr = 1$ 求得的归一化常数。这里定义以下量：

$$\rho = \frac{2\lambda r}{\hbar c}, \quad \lambda = \sqrt{m_e^2 c^4 - \varepsilon^2}, \quad \gamma = \sqrt{\kappa^2 - Z^2\alpha^2}, \quad (15)$$

其中，$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ 是精细结构常数（方程右端以高斯单位制表示）。函数 $Q_1(\rho)$ 和 $Q_2(\rho)$ 是 [29]

$$Q_1(\rho) = A_1 F\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right), \quad (16a)$$

$$Q_2(\rho) = A_2 F\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right), \quad (16b)$$

其中，$F(a, b, \rho)$ 是库默尔合流超几何函数。归一化常数 A_1 和 A_2 的关系如下：

$$A_2 = -\frac{\gamma\lambda - Z\alpha\varepsilon}{\kappa\lambda - Z\alpha m_e c^2} A_1. \quad (17)$$

在特殊情形下，

$$\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} = -n_r, \quad (18)$$

其中，n_r 是正整数，库默尔函数可化为拉盖尔多项式，

$$F(-n_r, 2\gamma + 1, \rho) = \frac{\Gamma(2\gamma + 1)\Gamma(n_r + 1)}{\Gamma(2\gamma + n_r + 1)} L_{n_r}^{(2\gamma)}(\rho),$$

为什么没有编号?

因此，公式（14）中的函数 $g(r)$ 和 $f(r)$ 在 $r \to \infty$ 时呈指数衰减。在特殊情况下，

$$\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} = 0, \quad \text{and} \quad \kappa < 0,$$

$A_2 = 0$ 和 $Q_1(\rho)$ 在 $r \to \infty$ 时呈指数衰减。否则，当

$$\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} \neq -n_r,$$

当 $\rho \to \infty$ 时，$Q_1(\rho)$ 和 $Q_2(\rho)$ 随 e^ρ 发散，因此方程 (14) 中的 $g(r)$ 和 $f(r)$ 随 $e^{\rho/2}$ 发散。

让我们回顾一下对点状原子核[29]的 H&HLI 系统计算得到的相对论能量$\varepsilon_n^{(0)}$

$$\varepsilon_n^{(0)} = m_e c^2 + hcR_\infty \frac{2\mathcal{G}(n)}{1 + \mu_{ep}}, \quad (19)$$

其中，对于任意 Z，$\mu_{ep} \equiv m_e/M(Z, A)$ 是电子与原子核质量比，$M(Z, A)$ 是由 Z 个质子和 $A - Z$ 个中子组成的原子核的质量，而 cR_∞ 是里德伯频率，它与高斯单位制下的哈特里能 ϵ_H, $cR_\infty = \frac{\epsilon_H}{2h}[= \frac{e^4 m_e}{4\pi\hbar^3}$ 相关。在公式（19）中，$n = 1$、2、3.....是主量子数，并且

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(n) &= \frac{1}{Z^2\alpha^2}\left[\frac{1}{\sqrt{1 + X_n^2}} - 1\right] \\ &= -\frac{1}{Z^2\alpha^2}\frac{X_n^2}{\sqrt{1 + X_n^2}\left[\sqrt{1 + X_n^2} + 1\right]}, \end{aligned} \quad (20)$$

其中 $X_n = \frac{Z\alpha}{\sqrt{1 - Z^2\alpha^2} + n - 1}$。我们发现，公式（20）右侧的第一种形式会导致显著的数值误差，因此在数值计算中，第二种形式更可取。正如文献 [30–33]，所指出的，在狄拉克方程中引入约化质量这一概念在某种程度上存在歧义。尽管如此，文献（参见 [30–33]）强调，为了获得接近实验结果的理论结果，有必要在狄拉克能量和狄拉克方程中以约化质量替代电子质量。公式（19）中的基态能量（$n = 1$）为

$$\varepsilon_1^{(0)}(Z, A) = m_e c^2 + mc^2(\sqrt{1 - Z^2\alpha^2} - 1), \quad (21)$$

其中 $m \equiv m(Z, A)$ 是电子-原子核约化质量，

$$m \equiv m(Z, A) = \frac{m_e}{1 + \mu_{ep}}, \quad (22)$$

方程 (14) 中的基态波函数为，

$$g(r) = \frac{2Z^{3/2}\sqrt{1 + \gamma}}{a_B^{3/2}\sqrt{\Gamma(2\gamma + 1)}}\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \quad (23a)$$

$$f(r) = -\frac{2Z^{3/2}\sqrt{1 - \gamma}}{a_B^{3/2}\sqrt{\Gamma(2\gamma + 1)}}\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \quad (23b)$$

其中 a_B 取为有效玻尔半径，包含约化质量效应，其在高斯单位制下的表达式为

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (24)$$

若干原子核的核半径 r_N 列于表 I 中。

方程 (19) 中的能量 $\varepsilon_1^{(0)}$ 和 $\varepsilon_2^{(0)}$ 在图3中绘制为 Z 的函数。对于 $Z\alpha < 1$，$\varepsilon_1^{(0)}$ 和 $\varepsilon_2^{(0)}$ 满足以下不等式，

$$0 < \varepsilon_1^{(0)} < \varepsilon_2^{(0)} < m_e c^2.$$

表 I. 均方根核电荷半径 r_N 及其不确定度 δr_N （以玻尔半径为单位 a_B）。质子和氘核的数据取自参考文献 [10]，其他同位素的数据取自参考文献 [27]。这里（以及下文） E^{-n} 是$\times 10^{-n}$的简写。

同位素（Z, A）	r_N	δr_N
H(1, 1)	$1.5900E^{-5}$	$3.6E^{-8}$
H(1, 2)	$4.02132E^{-5}$	$1.40E^{-8}$
H(1, 3)	$3.3242E^{-5}$	$6.86E^{-7}$
He(2, 3)	$3.7154E^{-5}$	$5.7E^{-8}$
氦(2, 4)	$3.1662E^{-5}$	$5.3E^{-8}$
钾(19, 39)	$6.4910E^{-5}$	$3.6E^{-8}$
钾(19, 40)	$6.4971E^{-5}$	$5.3E^{-8}$
钾(19, 41)	$6.5230E^{-5}$	$1.04E^{-7}$
铷(37, 85)	$7.9437E^{-5}$	$4.5E^{-8}$
铷(37, 87)	$7.9348E^{-5}$	$3.4E^{-8}$
铯(55, 133)	$9.0784E^{-5}$	$8.7E^{-8}$
铯(55, 135)	$9.0833E^{-5}$	$8.9E^{-8}$
铅(82, 204)	$1.03563E^{-4}$	$2.6E^{-8}$
铅(82, 206)	$1.03750E^{-4}$	$2.6E^{-8}$
铅(82, 207)	$1.03827E^{-4}$	$2.6E^{-8}$
铅(82, 208)	$1.03958E^{-4}$	$2.5E^{-8}$
铋(83, 209)	$1.04334E^{-4}$	$4.9E^{-8}$
铀(92, 235)	$1.10241E^{-4}$	$7.7E^{-8}$
铀(92, 236)	$1.10419E^{-4}$	$7.2E^{-8}$
铀(92, 238)	$1.10683E^{-4}$	$6.2E^{-8}$

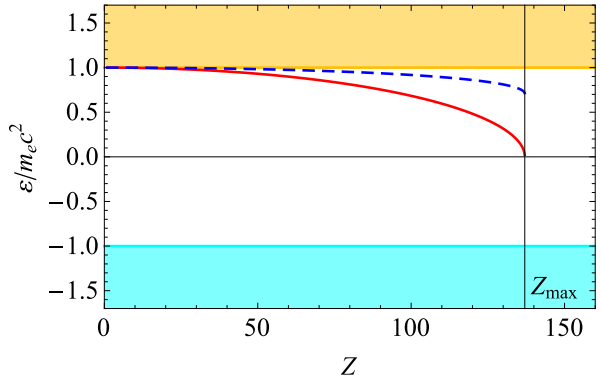


图3. 方程 (19) 中定义的 H&HLI同位素的 $1s$ 束缚态 $\varepsilon_1^{(0)}$ （红色实线）和激发 $2s$ 态 $\varepsilon_2^{(0)}$ （蓝色虚线）能量随质子数 Z的变化。金色和青绿色区域表示具有$|\varepsilon| > m_ec^2$的连续能谱。水平线表示 $\varepsilon = 0$，垂直线表示 $Z_{\max} = 137$。

对于 $Z = Z_{\max} = 137$， $\varepsilon_1^{(0)} = 0.02292\, m_ec^2$ 和 $\varepsilon_2^{(0)}$ =$0.71516\, m_ec^2$。对于 $Z > Z_{\max}$，方程 (15) 中的参数 γ 变为虚数，而方程 (23) 中的波函数在 $r \to 0$ [29] 时是奇异的。事实上，点状原子核的库仑势对应的狄拉克方程 (13) 仅在 $Z < 137$时有意义。

B. 模型 (a) 的狄拉克方程 (13) 的解

分别求解模型 (a) 势的方程 (13) 中关于 $r > r_N$ 和 $r < r_N$ 的方程，以获得相应的波函数 $f_\pm(r)$ 和 $g_\pm(r)$，其中乘法常数 $A_\pm$ 目前尚未确定。在 $r = r_N$ 处的匹配条件为，

$$A_-g_-(r_N) = A_+g_+(r_N), \quad A_-f_-(r_N) = A_+f_+(r_N). \tag{25}$$

当行列式为零时，方程组 (25) 有非平凡解。

$$\mathfrak{D}(\varepsilon) \equiv g_-(r_N)f_+(r_N) - g_+(r_N)f_-(r_N) = 0. \tag{26}$$

注意，上述条件是必要条件，但不足以保证 $g_- = g_+$ 和 $f_- = f_+$ 在 r_N。

1. Solution of Dirac equation (13) for $r > r_N$

方程 (13) 的解可以写成以下形式[29]

$$f_+(r) = \sqrt{\frac{m_ec^2 - \varepsilon}{m_ec^2}}\left[Q_1(\rho) + Q_2(\rho)\right]\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \tag{27a}$$

$$g_+(r) = \sqrt{\frac{m_ec^2 + \varepsilon}{m_ec^2}}\left[Q_2(\rho) - Q_1(\rho)\right]\rho^{\gamma-1}e^{-\rho/2}, \tag{27b}$$

其中， ρ、 λ 和 γ 由方程 (15) 给出。函数 $Q_1(\rho)$ 和 $Q_2(\rho)$ 满足以下方程，

$$\begin{aligned}\rho Q_1'(\rho) + \left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_1(\rho) \\ -\left(\kappa - \frac{Z\alpha m_ec^2}{\lambda}\right)Q_2(\rho) &= 0, \qquad (28a)\\ \rho Q_2'(\rho) + \left(\gamma + \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} - \rho\right)Q_2(\rho) \\ -\left(\kappa + \frac{Z\alpha m_ec^2}{\lambda}\right)Q_1(\rho) &= 0, \qquad (28b)\end{aligned}$$

其中，撇号表示相对于ρ的求导，而 $\kappa = -1$ 对于 s 态。*S 或 s？* 将$\kappa = -1$ 代入方程 (28a)，可将 Q_2 （ρ）表示为Q_1（ρ）和 Q_1'（ρ），如下所示，

$$\begin{aligned}Q_2(\rho) = -\frac{\lambda}{\lambda + Z\alpha m_ec^2}\Bigg[\rho Q_1'(\rho) \\ +\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_1(\rho)\Bigg].\end{aligned} \tag{29}$$

将此方程代入方程 (28b)，可得

$$\rho Q_1''(\rho) + (2\gamma + 1 - \rho)Q_1'(\rho) - \left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_1(\rho) = 0. \tag{30}$$

方程 (30) 中在 $\rho \to \infty$ 处为零的解为 [29]

$$Q_1(\rho) = AU\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda},\, 2\gamma+1,\, \rho\right), \tag{31}$$

其中 $U(a,b,\rho)$ 是合流超几何函数。

同样，将其代入方程 (28b) $\kappa = -1$，可将 $Q_1(\rho)$ 表示为 $Q_2(\rho)$ 和 $Q_2'(\rho)$ 的形式，

$$\begin{aligned} Q_1(\rho) \;=\; & -\frac{\lambda}{\lambda - Z\alpha m_e c^2}\left[\rho Q_2'(\rho)\right. \\ & \left. +\left(\gamma + \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} - \rho\right) Q_2(\rho)\right]. \end{aligned} \tag{32}$$

将方程 (32) 代入方程 (28a)，得到

$$\begin{aligned} & \rho Q_2''(\rho) + \big(2\gamma + 1 - \rho\big) Q_2'(\rho) \;- \\ & \left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right) Q_2(\rho) \;=\; 0. \end{aligned} \tag{33}$$

方程 (33) 在 $\rho \to \infty$ 处为零的解是 [29]

$$Q_2(\rho) = BU\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda},\, 2\gamma+1,\, \rho\right). \tag{34}$$

将方程 (31) 和 (34) 代入方程 (29)，得到

$$A = \frac{\lambda}{m_e c^2}, \quad B = \frac{\lambda - Z\alpha m_e c^2}{m_e c^2}. \tag{35}$$

或者，我们可以将方程（31）和（34）代入方程（32），得到方程（35）。最后，$r > r_N$ 的狄拉克方程（13）的解为，

$$\begin{aligned} f_+(r) \;=\; & \sqrt{\frac{m_e c^2 - \varepsilon}{m_e c^2}}\, \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \times \\ & \left[\frac{\lambda}{m_e c^2}\, U\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma+1, \rho\right) + \right. \\ & \left. \frac{\lambda - Z\alpha m_e c^2}{m_e c^2}\, U\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma+1, \rho\right)\right], \end{aligned} \tag{36a}$$

$$\begin{aligned} g_+(r) \;=\; & -\sqrt{\frac{m_e c^2 + \varepsilon}{m_e c^2}}\, \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \times \\ & \left[\frac{\lambda}{m_e c^2}\, U\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma+1, \rho\right) - \right. \\ & \left. \frac{\lambda - Z\alpha m_e c^2}{m_e c^2}\, U\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma+1, \rho\right)\right]. \end{aligned} \tag{36b}$$

2. Dirac equation (13) solution for $r < r_N$

原子核内势为常数时的解析解众所周知 [2]。方程（13a）允许我们用（$rg_-(r)$）和（$rg_-(r)$）′来表示（$rf_-(r)$），

$$\begin{aligned} \big(rf_-(r)\big) \;=\; & \frac{\hbar c}{m_e c^2 - V(r_N) + \varepsilon} \times \\ & \left[\big(rg_-(r)\big)' - \frac{1}{r}\big(rg_-(r)\big)\right]. \end{aligned} \tag{37}$$

将方程 (37) 代入方程 (13b)，得到

$$\big(rg_-(r)\big)'' + k^2(\varepsilon)\big(rg_-(r)\big) = 0, \tag{38}$$

其中

$$k(\varepsilon) = \frac{1}{\hbar c}\sqrt{(\varepsilon - V(r_N))^2 - m_e^2 c^4}. \tag{39}$$

方程（38）在 $r = 0$ 处的非奇异解为，

$$g_-(r) = C\,\frac{\sin(k(\varepsilon)r)}{k(\varepsilon)r}, \tag{40}$$

其中，C 是一个归一化常数。

方程（13b）允许我们用 $(rf_-(r))$ 和 $(rf_-(r))'$ 表示 $(rg_-(r))$，

$$\begin{aligned} \big(rg_-(r)\big) \;=\; & \frac{\hbar c}{m_e c^2 + V(r_N) - \varepsilon} \times \\ & \left[\big(rf_-(r)\big)' + \frac{1}{r}\big(rf_-(r)\big)\right]. \end{aligned} \tag{41}$$

将方程（41）代入方程（13a），得到

$$\big(rf_-(r)\big)'' + \left(k^2(\varepsilon) - \frac{2}{r^2}\right)\big(rf_-(r)\big) = 0. \tag{42}$$

方程（42）在 $r = 0$ 处的非奇异解为，

$$f_-(r) = D\,\frac{k(\varepsilon)r\cos(k(\varepsilon)r) - \sin(k(\varepsilon)r)}{k^2(\varepsilon)r^2}, \tag{43}$$

其中 D 是归一化常数。

将方程 (40) 和 (43) 代入方程 (37)，得到

$$\frac{D}{C} = \sqrt{\frac{\varepsilon - V(r_N) - m_e c^2}{\varepsilon - V(r_N) + m_e c^2}}. \tag{44}$$

或者，我们可以将方程 (40) 和 (43) 代入方程 (41)，得到方程 (44)。最后，$r < r_N$ 的狄拉克方程 (13) 的解为，

$$\begin{aligned} f_-(r) \;=\; & \sqrt{\frac{\varepsilon - V(r_N) - m_e c^2}{m_e c^2}} \times \\ & \frac{k(\varepsilon)r\cos(k(\varepsilon)r) - \sin(k(\varepsilon)r)}{k^2(\varepsilon)r^2}, \end{aligned} \tag{45a}$$

$$g_-(r) \;=\; \sqrt{\frac{\varepsilon - V(r_N) + m_e c^2}{m_e c^2}}\,\frac{\sin(k(\varepsilon)r)}{k(\varepsilon)r}. \tag{45b}$$

n	1	2	3
ϵ_n	0.499734640577	0.1249340759790	0.0555260711867
$\epsilon_n^{(0)}$	0.499734640745	0.1249340760015	0.0555260711927

表 II. 根据方程（26）计算的模型 (a) 的氢原子束缚能 $\epsilon_n(r_N)$（单位：哈特里），以及方程（19）中 $r_N = 0$ （即点状质子）的氢原子狄拉克能量 $\epsilon_n^{(0)}$。 r_N 见表 I。

3. *Boundary conditions at $r = r_N$*

函数 $f_\pm(r)$ 和 $g_\pm(r)$ 满足方程 (26) 在 $r = r_N$ 处指定的边界条件。显然，方程 (36) 和 (45) 中的 $f_\pm(r_N)$ 和 $g_\pm(r_N)$，以及方程 (26) 中的 $\mathfrak{D}$，都取决于 ε。求解方程 $\mathfrak{D}(\varepsilon) = 0$ 可得 ε，从而得到氢原子的能量。这些能量列于表 II。图 4(a) 绘出了函数

$$\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon) = \mathfrak{L}(\varepsilon)\mathfrak{D}(\varepsilon), \tag{46}$$

与 ε 相比，对于 $Z = 1$， $r_N = 0.8414 \times 10^{-13}$ cm（质子均方根半径 [10]）和 $|\varepsilon| < 0.9\, m_e c^2$，其中 $\mathfrak{D}(\varepsilon)$由方程（26）给出，而

$$\mathfrak{L}(\varepsilon) = \frac{m_e^2 c^4 - \varepsilon^2}{m_e^2 c^4}.$$

$\mathfrak{L}(\varepsilon)$在 $|\varepsilon| < m_e c^2$时为正。 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$和 $\mathfrak{L}(\varepsilon)$均为无量纲。方程（36）和（45）中的波函数均为无量纲，接下来将通过乘以方程（47）给出的因子 $\mathcal{N}_n$ 进行归一化，其中 $\mathcal{N}_n$ 的量纲为 $[\mathcal{N}_n] = $ 长度$^{-3/2}$]。 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$为正，并且在区间 $-m_e c^2 < \varepsilon < 0.99\, m_e c^2$内不存在束缚态。图 4(b) 显示了 ε接近并低于 $m_e c^2$时的 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$。当 ε 非常接近方程（19）给出的氢原子狄拉克能量 $\varepsilon_n^{(0)}$且 $Z = A = 1$时， $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon) = 0$；下标 (0) 表示点电荷原子核极限。

由方程 (26) 和 $\epsilon_n^{(0)} = m_e c^2 - \varepsilon_n^{(0)}$ 数值计算得到的束缚能 $\epsilon_n(r_N)$（其中 $n = 1$、2、3 以及 r_N 是 ^{1}H 的核半径），列于表 II 中。可以看出， $|\epsilon_1(r_N) - \epsilon_1^{(0)}| \approx 1.680 \times 10^{-10}$ 哈特里，显然远小于 $\epsilon_1^{(0)}$。排斥势 $W_a(r) = [V_C(r_N) - V_C(r)]\Theta(r_N - r)$ [（见方程 (6)）] 将狄拉克能量 $\varepsilon_n(r_N)$ 推高。注意以下不等式：

$$\left|\epsilon_{n+1}(r_N) - \epsilon_{n+1}^{(0)}\right| \ll \left|\epsilon_n(r_N) - \epsilon_n^{(0)}\right|,$$

其中 $n = 1$、2、3、.....

4. *Wave functions*

现在我们考虑波函数g_n 和 f_n的归一化。这里， $g_n(r)$由方程（36b）给出，适用于 $r >$

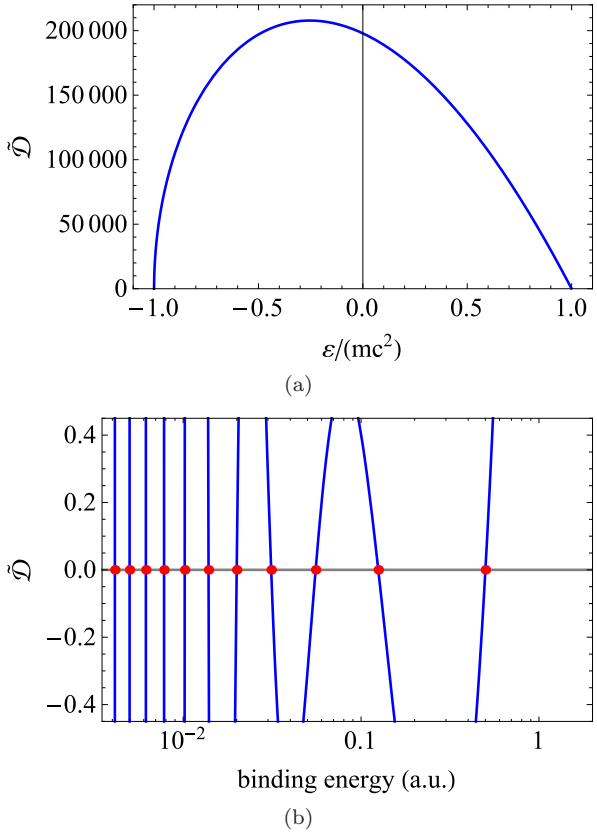


图4. (a) 方程 (46) 中定义的函数 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$ 随能量 ε 的变化，适用于 $|\varepsilon| < 0.999\, m_e c^2$。(b) 方程 (46) 中 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$ 随结合能 $\epsilon = mc^2 - \varepsilon$ 变化的对数线性图（蓝色曲线），其中 ε 接近 mc^2 （范围涵盖最低的 11 个 s ^{1}氢态）。红点表示质子半径为零的氢原子的狄拉克结合能 $\epsilon_n^{(0)}$（即狄拉克能量）。这里 $\tilde{\mathfrak{D}}(\varepsilon)$ 是无量纲量，(b) 中的结合能以哈特里为单位。

r_N 而对于 $r < r_N$，则由方程（45b）给出； $f_n(r)$对于 $r > r_N$ 由公式（36a）给出，对于 $r < r_N$则由公式（45a）给出。归一化常数 $\mathcal{N}_n$ 的选取使得

$$\mathcal{N}_n^2 \int_0^\infty [g_n^2(r) + f_n^2(r)] r^2 dr = 1. \tag{47}$$

图5绘出了 $\mathcal{N}_1(g_1(r)\ f_1(r))$ 对于 $1s$ 态的变化。函数 $(g_1(r)\ f_1(r))$ 及其导数 $(g_1'(r)\ f_1'(r))$ 在 $r = r_N$处连续，其中 r_N =1.658 $\times 10^{-5} a_B$。 $g_1(r)$ 没有节点，在 $r = 0$处达到最大值，并在 $r \to \infty$时趋于零。 $f_1(r)$ 在 $r = 0$处为零，并且对于有限的 r为负；它达到最小值，并在 $r \to \infty$时趋于零。

图6为 $2s$ 归一化波函数 $\mathcal{N}_2(g_2(r)\ f_2(r))$的对数线性图。函数$(g_2(r)\ f_2(r))$及其导数$(g_2'(r)\ f_2'(r))$在 $r = r_N$处连续。 $g_2(r)$在 $r = 0$处达到最大值，并有一个节点。它在 $r \gg a_B$处为零。 $f_2(r)$有两个节点：一个位于$r = 0$处，另一个位于有限的 r处；当 $r \to \infty$时它趋于零。

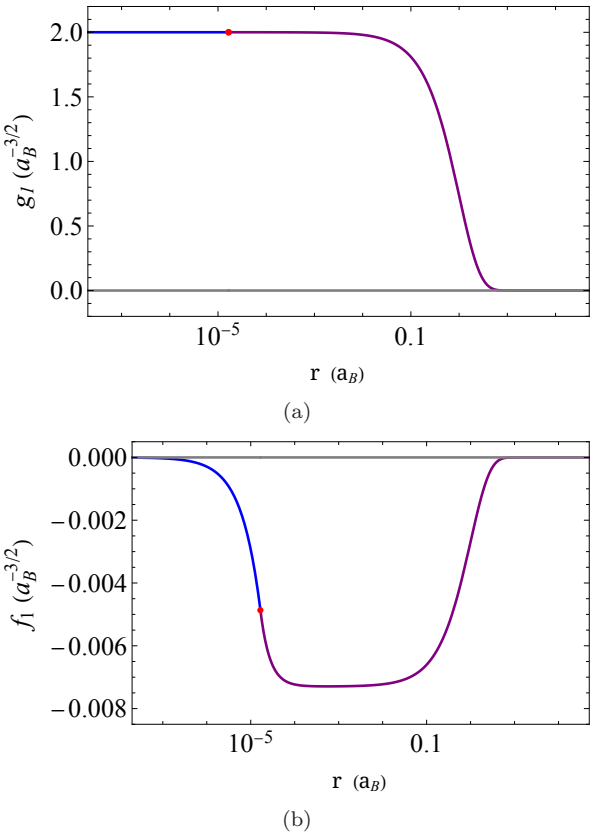


图5。 $\mathcal{N}g_1(r)$和 $\mathcal{N}f_1(r)$的对数线性图，分别对应氢原子的 $1s$ 态，能量为 ε_1（单位：哈特里）。这里， $g_1(r)$对于 $r > r_N$（紫色）由公式（36b）给出，对于$r < r_N$（蓝色）由公式（45b）给出。 $f_1(r)$对于 $r > r_N$（紫色）由公式（36a）给出，对于 $r < r_N$（蓝色）由公式（45a）给出。归一化常数 $\mathcal{N}$由公式（47）确定。红点表示 $g_1(r_N)$和 $f_1(r_N)$。

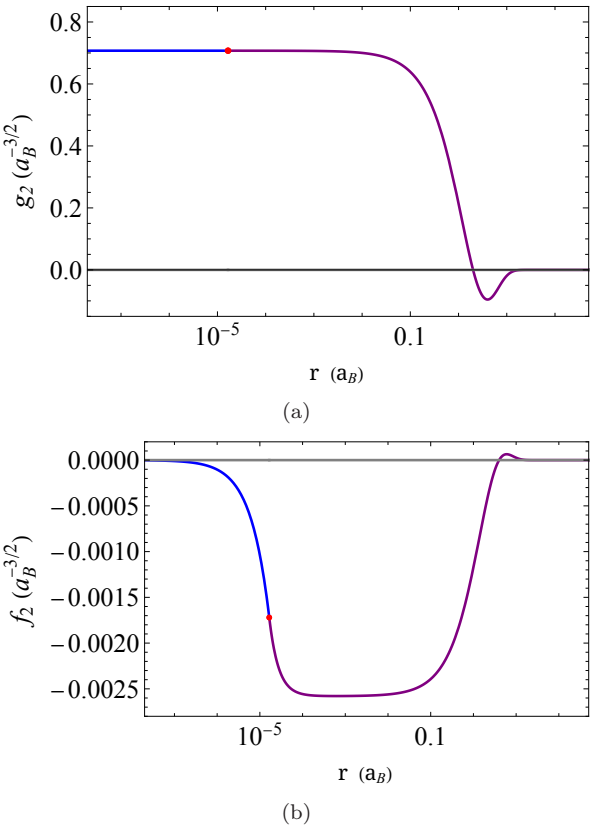


图 6。氢原子 $2s$ 态在能量为 ε_2（哈特里）的情况下，(a) $\mathcal{N}_2 g_2(r)$ 和 (b) $\mathcal{N}_2 f_2(r)$ 的对数线性图。对于 $r > r_N$（紫色），$g_2(r)$ 由公式（36b）给出；对于 $r < r_N$（蓝色），则由公式（45b）给出。对于 $r > r_N$（紫色），$f_2(r)$ 由公式（36a）给出；对于 $r < r_N$（蓝色），则由公式（45a）给出。归一化常数 $\mathcal{N}_2$ 由公式（47）求得。红点表示 $r = r_N$处的波函数。

5. $1s$ and $2s$ state energies for various isotopes

现在，我们针对模型 (a)（原子核内势为常数）求解行列式方程 (26)，并求出各种同位素的基态 $1s$ 和第一激发态 $2s$ 的能量有限核尺寸修正。

表III和表IV显示了有限核尺寸修正

$$\varepsilon_{n,a} = \varepsilon_n - \varepsilon_n^{(0)}, \quad n = 1, 2. \tag{48}$$

这里， ε_1 和 ε_2 使用公式（26）进行数值计算，而 $\varepsilon_1^{(0)}$ 和 $\varepsilon_2^{(0)}$ 由公式（19）以解析形式给出。$\varepsilon_{1,\,a}$ 和$\varepsilon_{2,\,a}$ 是核半径 $r_a = r_N$的函数，其中 r_N 列于表 I中。r_N 的不确定度会导致$\delta\varepsilon_{n,\,a}$ 在$\varepsilon_{n,\,a}$中的不确定度，这可以估算为，

$$\delta\varepsilon_{n,a} = \left|\frac{\partial\varepsilon_{n,a}}{\partial r_N}\right| \delta r_N. \tag{49}$$

基态能量的有限核尺寸修正$\varepsilon_{1,\,a}$ 及其不确定度 $\delta\varepsilon_{1,\,a}$ 列于表 III；激发态能量的有限核尺寸修正$\varepsilon_{2,\,a}$ 及其不确定度 $\delta\varepsilon_{2,\,a}$ 列于表 IV。修正$\varepsilon_{1,\,a}$ 和 $\varepsilon_{2,\,a}$ 满足不等式 $\varepsilon_{1,\,a} \gg \varepsilon_{2,\,a} > 0$。请注意，对于具有给定 Z 的原子同位素， $\varepsilon_{1,\,a}$和 $\varepsilon_{2,\,a}$ 并不总是随 A 增大。这是因为表 I 中某些同位素的核半径 r_N 并不随 A 单调变化（参见氦和铷的 r_N）。方程 (6) 中的排斥势 $W_a(r)$ 随核半径 r_N 增大，而 r_N 随 Z 增大，见表 I；因此，表 III 中的能量修正 ε_a 随 Z 增大。

表 IV 展示了计算得到的有限核尺寸修正$\varepsilon_{2,\,a}$以及 $\varepsilon_{2,\,b}$。氢 $1s$-$2s$ 跃迁频率的有限核尺寸修正 $\Delta\omega_{1s}^{(a)}{}_{,\,2s}$ 以及 $\Delta\omega_{1s}^{(b)}{}_{,\,2s}$ 定义为，

$$\Delta\omega_{1s,2s}^{(a)} = \frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_{2,a} - \varepsilon_{1,a}\right), \quad \Delta\omega_{1s,2s}^{(b)} = \frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_{2,b} - \varepsilon_{1,b}\right). \tag{50}$$

请注意，参考文献 [38] 报道的精确测量原子跃迁同位素位移的方法，可用于通过实验探测本文计算的同位素位移。

点状原子核情况下的公式（19），以及采用模型（a）和（b）的核电荷分布进行的数值计算，均通过以下方式考虑反冲效应：

表 III. 有限核尺寸修正 $\varepsilon_{1,\ a}$ 和 $\varepsilon_{1,\ b}$（单位：哈特里）对 H&HLI 基态 $1s$ 能量的影响。括号中的数字表示不确定度 $\delta\varepsilon_{1,\ a}$ 以及 $\delta\varepsilon_{1,\ b}$ 由表 I r_N 中核半径的不确定度导致的基态能量计算不确定度 [（见公式（49）和（59））]。参考文献 [34]说明了误差的简洁表示法。

同位素 (Z, A)	$\varepsilon_{1,a}(\delta\varepsilon_{1,a})$	$\varepsilon_{1,b}(\delta\varepsilon_{1,b})$
H(1, 1)	$1.6837(76)E^{-10}$	$1.6837(76)E^{-10}$
H(1, 2)	$1.07773(75)E^{-9}$	$1.07773(75)E^{-9}$
H(1, 3)	$7.37(30)E^{-10}$	$7.37(30)E^{-10}$
He(2, 3)	$1.4746(45)E^{-8}$	$1.4746(45)E^{-8}$
氦(2, 4)	$1.0711(36)E^{-8}$	$1.0711(36)E^{-8}$
钾(19, 39)	$4.1987(46)E^{-4}$	$4.1974(46)E^{-4}$
钾(19, 40)	$4.2064(68)E^{-4}$	$4.2051(68)E^{-4}$
钾(19, 41)	$4.240(13)E^{-4}$	$4.238(13)E^{-4}$
铷(37, 85)	$1.2547(14)E^{-2}$	$1.2534(14)E^{-2}$
铷(37, 87)	$1.2520(12)E^{-2}$	$12507(12)E^{-2}$
铯(55, 133)	0.13135(23)	0.13107(23)
铯(55, 135)	0.13148(23)	0.13120(23)
铅(82, 204)	2.4687(10)	2.4586(10)
铅(82, 206)	2.4758(10)	2.4657(10)
铅(82, 207)	2.4787(10)	2.4686(10)
铅(82, 208)	2.48367(93)	2.47351(93)
铋(83, 209)	2.7559(20)	2.7444(20)
铀(92, 235)	7.3062(75)	7.2718(75)
铀(92, 236)	7.3234(69)	7.2889(69)
铀(92, 238)	7.3490(60)	7.3143(60)

表 IV. H&HLI 中激发态 $2s$ 的能量有限核尺寸修正 $\varepsilon_{2,\ a}$ 和 $\varepsilon_{2,\ b}$（单位：哈特里）。括号中的数字表示不确定度 $\delta\varepsilon_{2,\ a}$ 以及 $\delta\varepsilon_{2,\ b}$ 由于核半径不确定度而导致的计算基态能量的不确定度。核半径见表 I [，参见公式 (49) 和 (59)]。

同位素（Z, A）	$\varepsilon_{2,a}(\delta\varepsilon_{2,a})$	$\varepsilon_{2,b}(\delta\varepsilon_{2,b})$
H(1, 1)	$2.1047(95)E^{-11}$	$2.1047(95)E^{-11}$
H(1, 2)	$1.34722(94)E^{-10}$	$1.34722(94)E^{-10}$
H(1, 3)	$9.21(38)E^{-11}$	$9.21(38)E^{-11}$
He(2, 3)	$1.8436(56)E^{-9}$	$1.8436(56)E^{-9}$
He(2, 4)	$1.3391(45)E^{-9}$	$1.3391(45)E^{-9}$
钾(19, 39)	$5.3381(58)E^{-5}$	$5.3365(58)E^{-5}$
钾(19, 40)	$5.3480(86)E^{-5}$	$5.3463(86)E^{-5}$
钾(19, 41)	$5.390(17)E^{-5}$	$5389(17)E^{-5}$
铷(37, 85)	$1.6732(18)E^{-3}$	$1.6714(18)E^{-3}$
铷(37, 87)	$1.6696(16)E^{-3}$	$1.6678(16)E^{-3}$
铯(55, 133)	$1.8969(33)E^{-2}$	$1.8928(33)E^{-2}$
铯(55, 135)	$1.8988(34)E^{-2}$	$1.8947(34)E^{-2}$
铅(82, 204)	0.42868(17)	0.42692(17)
铅(82, 206)	0.42991(17)	0.42814(17)
铅(82, 207)	0.43041(17)	0.42864(17)
铅(82, 208)	0.43127(16)	0.42950(16)
铋(83, 209)	0.48259(36)	0.48057(36)
铀(92, 235)	1.3880(14)	1.3814(14)
铀(92, 236)	1.3912(13)	1.3846(13)
铀(92, 238)	1.3961(11)	1.3895(11)

将电子质量 m_e 替换为约化质量$m \equiv m(Z, A)$，其定义见方程（22）。这个朴素的表达式可作为计算电子能级反冲修正的起点。参考文献 [33],基于量子电动力学推导出了具有约化质量依赖性的 s-态能量的显式表达式。

$$\varepsilon_n^{(\mathrm{Dirac})} = m_e c^2 + Z^2 hcR_\infty \times \Big[\frac{2\mathcal{G}(n)}{1+\mu_{ep}} - \frac{\mu_{ep}\, Z^2\alpha^2\, \mathcal{G}^2(n)}{\big(1+\mu_{ep}\big)^3}\Big]. \quad (51)$$

无量纲函数 $\mathcal{G}(n)$ 由公式（20）给出。方程（51）右侧的前两项给出了方程（19）中的 s 态能量，但该方程中的最后一项与 $\mathcal{G}^2(n)$ 成正比，同时也与 $\mu_{ep}(Z\alpha)^4$ 成正比。核质量趋于无穷大时，此项消失，因此方程（19）中没有这一项。对于氢，这一能量修正项为

$$hcR_\infty \frac{\mu_e\, \alpha^2\, \mathcal{G}^2(n)}{\big(1+\mu_{ep}\big)^3} \approx \frac{7.2\times 10^{-9}}{n^2}\ \epsilon_H.$$

方程（51）中的狄拉克能量可以像参考文献 [33] 的方程（3.4）那样，按 $Z^2\alpha^2$ 展开为幂级数:

$$\tilde{\varepsilon}_n^{(\mathrm{Dirac})} = m_e c^2 - \frac{hcR_\infty}{1+\mu_{ep}}\Big\{\frac{Z^2}{n^2} + \frac{Z^4\alpha^2}{n^3}\Big(1 - \frac{3}{4n} + \frac{\mu_{ep}}{(1+\mu_{ep})^2}\,\frac{1}{4n}\Big)\Big\}. \quad (52)$$

方程（52）是方程（51）关于 α^2 的幂级数展开，保留至 α^4 （请注意，R_∞ 中包含一个 α^2 因子）。使用（52）得到的 $1s$ 能量与使用（51）得到的能量相差约 1 兆赫。

C. 模型 (b) 的狄拉克方程 (13) 解

这里，我们求出核电荷在半径为 r_b 的球体内均匀分布时 H&HLI 的波函数和束缚能，其中半径定义于方程 (5) 中。方程 (4) 中的势 $V_b(r)$ 在原子核内呈谐振形式。在这种情况下，尚无解析解。我们将方程 (13) 改写为含有 $\kappa = -1$ 的形式:

$$\frac{\hbar c\, r^2 g'_-(r)}{mc^2 - V_b(r) + \varepsilon} = r^2 f_{b,-}(r), \quad (53a)$$

$$\big(r^2 f_{b,-}(r)\big)' = \frac{mc^2 + V_b(r) - \varepsilon}{\hbar c}\, r^2 g_{b,-}(r). \quad (53b)$$

对方程 (53a) 求导并使用方程 (53b)，可得关于 $g_{b,-}(r)$ 的以下二阶微分方程:

$$\frac{1}{r^2}\,\frac{d}{dr}\left(\frac{r^2}{mc^2 - V_b(r) + \varepsilon}\,\frac{dg_{b,-}(r)}{dr}\right) = \frac{1}{\hbar^2 c^2}\big[mc^2 + V_b(r) - \varepsilon\big] g_{b,-}(r). \quad (54)$$

我们对方程 (54) 进行数值求解，求得 $g_{b,-}(r)$ 在 $r < r_b$时的径向波函数。为此，我们需要知道原子的结合能（目前尚未知）。为了求出能量和波函数，我们采用下文所述的迭代法。径向波函数 $f_{b,-}(r)$ 可由以下方程求得:

$$f_{b,-}(r) = \frac{\hbar c\, g'_{b,-}(r)}{mc^2 - V_b(r) + \varepsilon}. \tag{55}$$

基态波函数满足 $r = 0$ 处的边界条件,

$$f_{b,-}(0) = 0, \quad g_{b,-}(0) = 1. \tag{56}$$

径向波函数 $g_+(r)$ 和 $f_+(r)$（ $r > r_b$）由方程 (36) 给出,而径向波函数 $g_b(r)$ $f_b(r)$ 满足 $r = r_b$ 处的边界条件,

$$A_- g_{b,-}(r_b) = A_+ g_+(r_b), \quad A_- f_{b,-}(r_b) = A_+ f_+(r_b). \tag{57}$$

这里 $A_\pm$ 是（未知的）归一化常数。当行列式 $\mathfrak{D}(\varepsilon)$ 为零时，方程组 (57) 存在非平凡解，其中

$$\mathfrak{D}(\varepsilon) = g_{b,-}(r_b) f_+(r_b) - g_+(r_b) f_-(r_b). \tag{58}$$

附录 C 说明了如何使用方程 (58) 的迭代方法求基态和激发态的 s 态能量。

模型 (b) 中 ns 态能量 ε_n 的不确定度 $\delta\varepsilon_{n,\ b}$, $_b$ 估算为,

$$\delta\varepsilon_{n,b} = \int_0^{r_b} \delta V_b(r) \Big[\big|g_{n,-}(r)\big|^2 + \big|f_{n,-}(r)\big|^2 \Big] r^2 dr, \tag{59}$$

其中 $\delta V_b(r)$ 由方程 (11) 给出，而 $n = 1$ 对于基态成立。

基态能量的有限核尺寸修正 $\varepsilon_{1,\ b}$ 及其不确定度$\delta\varepsilon_{1,\ b}$ 列于表 III；激发态能量的有限核尺寸修正$\varepsilon_{2,\ b}$ 及其不确定度 $\delta\varepsilon_{2,\ b}$ 列于表 IV。注意，对于轻同位素，即 H、He 和 K, $\varepsilon_{n,\ a}$ 和$\varepsilon_{n,\ b}$ $[n = 1, 2]$ 及其不确定度 $\delta\varepsilon_{n,\ a}$ 和 $\delta\varepsilon_{n,\ b}$满足以下关系

$$\delta\varepsilon_{n,a} \approx \delta\varepsilon_{n,b} > \varepsilon_{n,a} - \varepsilon_{n,b},$$

而对于重同位素,

$$\delta\varepsilon_{n,a} \approx \delta\varepsilon_{n,b} < \varepsilon_{n,a} - \varepsilon_{n,b}.$$

因此，比较重 HLI（如铷、铯、铅、铋和铀）的计算值与测量值的基态束缚能，可用于确定核电荷分布。氢原子和轻 HLI（如氦和钾）的基态能量在模型（a）和（b）中几乎相同，因此，测量基态束缚能并不是确定核电荷分布的准确方法。

本小节提出的数值求解方法可推广到原子核内部其他电荷分布的情形，例如下文方程（80）中介绍的 TPFM 电荷分布 [21, 22] 。

我们对模型 (a) 的有限核尺寸修正进行了解析计算，对模型 (b) 则进行了数值计算。结果列于表 III，其中包括 H&HLI 的基态 $1s$ ，以及表 IV 中的第一激发态 $2s$ 。作为比较，我们将在下文第 IV 节使用微扰理论计算有限核尺寸修正。我们将证明，对于 H 和轻 HLI，微扰理论对有限核尺寸修正给出了良好的近似，参见表 VII 和表 III。对于重 HLI，表 VII 中的微扰理论结果与表 III 中的结果不同，即微扰理论的近似较差。参考文献 [10] 和 [11]（2018 CODATA 和 2002 CODATA）以及许多其他论文使用微扰理论计算氢和轻 HLI 的有限核尺寸修正。这些文献将有限核尺寸修正展开为关于 r_N 的幂级数。相比之下，我们通过数值方法计算微扰理论。

D. 2018 CODATA中的有限核尺寸修正

有限核尺寸和核极化率修正按 α 的幂次排列，遵循参考文献 [10]:

$$\varepsilon_n^{(2018)} = \sum_{i=4}^{\infty} \varepsilon_n^{(i)}, \tag{60}$$

其中， n 是主量子数，指标 i 表示展开式中 $Z\alpha$ 的幂次。对 s 态能量的首项（最低阶）贡献为

$$\varepsilon_n^{(4)} = \frac{2}{3} m_e c^2 \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left(\frac{m}{m_e}\right)^3 \left(\frac{r_N}{\lambda\!\!\!^{-}_C}\right)^2, \tag{61}$$

其中，$\lambda\!\!\!^{-}_C = \hbar/(m_e c)$ 是约化康普顿波长。 $\lambda\!\!\!^{-}_C$ 的数值见参考文献 [10]，为 $\lambda\!\!\!^{-}_C = 3.8615926796(12) \times 10^{-12}$ m。公式（61）是 H&HLI 的 s 态能量有限核尺寸修正的非相对论近似。参考文献 [10] 给出了相对论修正 $\varepsilon_n^{(i)}$，但 $i \geq 5$ 仅适用于氢原子和氘原子，不适用于氚原子或类氢离子。

对于氢及重轻类氢离子，基态 $n = 1$ 和第一激发态 $n = 2$ 的能量有限核尺寸修正 $\varepsilon_n^{(4)}$及其由核均方根电荷半径不确定度导致的不确定度 $\delta\varepsilon_n^{(4)}$ 分别列于表V和表 VI。这些表还列出了 $\Delta\varepsilon_{n,\ a}^{(4)}$ 和$\Delta\varepsilon_{n\ b}^{(4)}$, 其中

$$\Delta\varepsilon_{n,\nu}^{(4)} = \varepsilon_n^{(4)} - \varepsilon_{n,\nu}, \tag{62}$$

以及 $\nu = a, b$ 对于核电荷分布的模型（a）和（b）。现在，我们将在表 III 中比较 $\varepsilon_1^{(4)} \approx \varepsilon_1^{(2018)}$ 与 $\varepsilon_{1,\ a}$ 以及 $\varepsilon_{1,\ b}$ ，并将 $\varepsilon_2^{(4)} \approx \varepsilon_2^{(2018)}$ 与

表V. H&HLI 基态能量的有限核尺寸修正 $\varepsilon_1^{(4)}$（单位：哈特里）。括号中的数字表示由于表 I 中核半径的不确定度 r_N 导致的计算得到的基态能量不确定度 $\delta\varepsilon_1^{(4)}$。$\Delta\varepsilon_{1,\,\nu}$ 与 $\nu = a, b$ 见公式（62）。

同位素（Z, A）	$\varepsilon_1^{(4)}$ ($\delta\varepsilon_1^{(4)}$)	$\Delta\varepsilon_{1,a}^{(4)}$	$\Delta\varepsilon_{1,b}^{(4)}$
H(1, 1)	$1.6827(76)E^{-10}$	$10E^{-13}$	$10E^{-13}$
H(1, 2)	$1.07719(75)E^{-9}$	$5.4E^{-13}$	$5.4E^{-13}$
H(1, 3)	$7.36(30)E^{-10}$	$4E^{-13}$	$4E^{-13}$
He(2, 3)	$1.4716(45)E^{-8}$	$3.0E^{-11}$	$3.0E^{-11}$
He(2, 4)	$1.0689(36)E^{-8}$	$2.2E^{-11}$	$2.2E^{-11}$
钾(19, 39)	$3.6604(40)E^{-4}$	$5.383E^{-5}$	$5.370E^{-5}$
钾(19, 40)	$36673(60)E^{-4}$	$5.392E^{-5}$	$5.379E^{-5}$
钾(19, 41)	$3.697(12)E^{-4}$	$5.43E^{-5}$	$5.42E^{-5}$
铷(37, 85)	$7.884(9)E^{-3}$	$4.663E^{-3}$	$4.650E^{-3}$
铷(37, 87)	$7.866(8)E^{-3}$	$4.653E^{-3}$	$4.640E^{-3}$
铯(55, 133)	$5.028(10)E^{-2}$	$8.108E^{-2}$	$8.079E^{-2}$
铯(55, 135)	$5.033(10)E^{-2}$	$8.115E^{-2}$	$8.087E^{-2}$
铅(82, 204)	0.32327(17)	2.1455	2.1354
铅(82, 206)	0.32444(17)	2.1514	2.1412
铅(82, 207)	0.32493(17)	2.1538	2.1437
铅(82, 208)	0.32574(16)	2.15793	2.14777
铋(83, 209)	0.34440(32)	2.4115	2.4000
铀(92, 235)	0.58042(82)	6.7258	6.6913
铀(92, 236)	0.58229(76)	6.7411	6.7066
铀(92, 238)	0.58509(66)	6.7639	6.7293

表VI。 H&HLI 第一激发 $2s$ 态能量的有限核尺寸修正 $\varepsilon_2^{(4)}$（单位：哈特里）。方括号中的数字表示 $\delta\varepsilon_2^{(4)}$ 由于表 I 中核半径 r_N 的不确定度而导致的计算得到的基态能量不确定度。$\Delta\varepsilon_{2,\,\nu}$ 其中 $\nu = a$、b 见公式（62）。

同位素 (Z, A)	$\varepsilon_2^{(4)}$ ($\delta\varepsilon_2^{(4)}$)	$\Delta\varepsilon_{2\,a,}^{(4)}$	$\Delta\varepsilon_{2\,b,}^{(4)}$
H(1, 1)	$2.1034(75)E^{-11}$	$1.3E^{-14}$	$1.3E^{-14}$
H(1, 2)	$1.34648(94)E^{-10}$	$7.4E^{-14}$	$7.4E^{-14}$
H(1, 3)	$9.20(38)E^{-11}$	$5E^{-14}$	$5E^{-14}$
He(2, 3)	$1.8396(56)E^{-9}$	$4.1E^{-12}$	$4.1E^{-12}$
氦(2, 4)	$1.3361(45)E^{-9}$	$3.0E^{-12}$	$3.0E^{-12}$
钾(19, 39)	$4.5755(51)E^{-5}$	$7.626E^{-6}$	$7.610E^{-6}$
钾(19, 40)	$4.5841(75)E^{-5}$	$7.639E^{-6}$	$7.623E^{-6}$
钾(19, 41)	$4.621(15)E^{-5}$	$7.70E^{-6}$	$7.68E^{-6}$
铷(37, 85)	$9.855(11)E^{-4}$	$6.877E^{-4}$	$6.859E^{-4}$
铷(37, 87)	$9.833(10)E^{-4}$	$6.863E^{-4}$	$6.846E^{-4}$
铯(55, 133)	$6.285(12)E^{-3}$	$1.2684E^{-2}$	$1.2643E^{-2}$
铯(55, 135)	$6292(12)E^{-3}$	$1.2696E^{-2}$	$1.2655E^{-2}$
铅(82, 204)	$4.0409(21)E^{-2}$	0.38827	0.38651
铅(82, 206)	$4.0555(21)E^{-2}$	0.38935	0.38758
铅(82, 207)	$4.0616(21)E^{-2}$	0.38980	0.38803
铅(82, 208)	$4.0718(19)E^{-2}$	0.39055	0.38878
铋(83, 209)	$4.3050(41)E^{-2}$	0.43954	0.43752
铀(92, 235)	$7.255(10)E^{-2}$	1.3154	1.3088
铀(92, 236)	$7.2787(95)E^{-2}$	1.3184	1.3118
铀(92, 238)	$7.3136(82)E^{-2}$	1.3229	1.3163

$\varepsilon_{2,\,a}$ 以及 $\varepsilon_{2,\,b}$ 在表 IV 中针对 H&HLI 的结果。此外，对于氢和轻类氢离子，我们将 $\Delta\varepsilon_{n,\,\nu}^{(4)}$ 与表 III 和 IV 中有限核尺寸修正的不确定度 $\delta\varepsilon_{n,\,\nu}$ 进行比较。对于 ^{A}氢原子和氦离子，$\Delta\varepsilon_{n,\,\nu}^{(4)} < \delta\varepsilon_{n,\,\nu}$，因此方程 (61) 中的非相对论近似对于 $1s$态能量的有限核尺寸修正（$n = 1$）以及 $2s$ 态能量的有限核尺寸修正（$n = 2$）是一个良好的近似。对于较重类氢离子，$\Delta\varepsilon_{n,\,\nu}^{(4)} > \delta\varepsilon_{n,\,\nu}$，非相对论近似则不再成立。

IV. 有限核尺寸导致的微扰理论修正

本节对模型（a）和（b）应用微扰理论，并求出 H&HLI 的基态能量修正（假设势 $W_\nu(r)$ 和 $W_{ba}(r)$ 较小）。

具体而言，我们将重点研究基态电子态 $n = 1$，因此下文通常省略能量和波函数上的下标 n。由于谐势的狄拉克方程尚无解析解，我们采用微扰理论计算模型 (b) 的有限核尺寸修正，同时也对狄拉克方程进行数值求解（见上一节）。

弱$W_\nu(r)$模型（a）和（b）的微扰理论详见第 IV A 节。它从哈密顿量，$H_\nu = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + V_\nu(r) + \beta mc^2$，改写为，

$$H_\nu = H_0 + V_\nu(r) - V_C(r) \equiv H_0 + W_\nu(r), \qquad (63)$$

其中，$H_0 = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + V_C(r) + \beta mc^2$ 是点状原子核的狄拉克哈密顿量，具有 $V_C(r) = -Ze^2/r$。

仅针对模型 (b) 且弱$W_{ba}(r)$的微扰理论详见第 IVB 节。它从如下形式的哈密顿量 H_b 开始，

$$H_b = H_a + W_{ba}(r), \qquad (64)$$

其中 H_a 由方程（63）给出，而 $W_{ba}(r) = V_b(r) - V_a(r)$ 由方程（7）给出。

A. 使用 $W_\nu(r)$的微扰理论

能量的一阶修正为：

$$\varepsilon_{n,\nu}^{(1)} = \mathcal{N}^2 \int_0^{r_\nu} W_\nu(r)\left[g^2(r) + f^2(r)\right] r^2 dr, \qquad (65)$$

其中 $f(r)$ 和 $g(r)$ 定义见方程 (23)。请注意，$f(r)$ 和 $g(r)$ 在 $r = 0$ 处的奇点是可积的

[29] 和 $W_\nu(r)$ 由方程 (6) 给出。具体而言，

$$\varepsilon^{(1)}_{n,\nu} = \frac{\hbar^3 c^3 \mathcal{N}^2}{8\lambda^3} \int_0^{\rho_\nu} W_\nu\left(\frac{\hbar c\rho}{2\lambda}\right)\Big\{m_e c^2\left[Q_1^2(\rho)+Q_2^2(\rho)\right] +2\varepsilon\, Q_1(\rho)Q_2(\rho)\Big\}\rho^{2\gamma}e^{-\rho}d\rho, \tag{66}$$

其中

$$\mathcal{N}^{-2} = \frac{\hbar^3 c^3}{8\lambda^3} \int_0^{\infty} \Big\{m_e c^2\left[Q_1^2(\rho)+Q_2^2(\rho)\right] +2\varepsilon\, Q_1(\rho)Q_2(\rho)\Big\}\rho^{2\gamma}e^{-\rho}d\rho, \tag{67}$$

无量纲核半径为

$$\rho_\nu = \frac{2\lambda r_\nu}{\hbar c} = \frac{2Z r_\nu}{a_B}. \tag{68}$$

利用方程（15）得到了方程（68）中的第二个等号。表 I 列出了若干元素和同位素的核半径 r_N。现在恢复 n 对 $\varepsilon^{(1)}_n$、ν 的依赖关系。基态能量的有限核尺寸修正 $\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 列于表 VII。$\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 对 A 和 Z 的依赖关系遵循核半径 $r_N(A,\ Z)$ 的变化规律；由于 r_N 随 Z 增大，$\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 也随之增大。$\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 对 A 的依赖关系则较为复杂。对于表 I 中的大多数元素，r_N 随 A 增大，$\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 也随之增大；[例如，参见 $\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$ 和 $\varepsilon^{(1)}_{1\,b}$ 中钾、铯、铅和铀同位素的数据]。然而，对于某些元素，r_N 随 A 减小，$\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 也随之减小；[例如，参见 $\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$ 和 $\varepsilon^{(1)}_{1\,b}$ 中氦和铷同位素的数据]。此外，对于某些元素，r_N 不是 A 的单调函数，因此 $\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$ 也不是 A 的单调函数。例如，氢同位素 ^{A}H 的核半径 $r_N(^A\mathrm{H})$ 满足以下不等式：

$$r_N\big(^1\mathrm{H}\big) < r_N\big(^3\mathrm{H}\big) < r_N\big(^2\mathrm{H}\big).$$

因此 $\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$，(^{A}氢) 满足

$$\varepsilon^{(1)}_{1,\nu}\big(^1\mathrm{H}\big) < \varepsilon^{(1)}_{1,\nu}\big(^3\mathrm{H}\big) < \varepsilon^{(1)}_{1,\nu}\big(^2\mathrm{H}\big).$$

比较表 VII 中的 $\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$，与表 III 中的 ε_a 可知，对于轻同位素，微扰理论的预测与非微扰数值计算结果非常接近；但对于重同位素，$\varepsilon_{1,\ a}$ 与 $\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$，之间的差异很大（见表 III 中 $\varepsilon_{1,\ a}$ 的值与表 VII 中 $\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$，的值之间的差异）。

在非相对论近似下，有限核尺寸修正 $\varepsilon^{(1)}_{n,\ \nu}$的微扰理论可写成简单的方程 [10, 11]

$$\varepsilon^{(1)}_{n,\nu} \approx \frac{2m_e c^2}{3}\,\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}\,\frac{m^3}{m_e^3}\,\frac{r_N^2}{\lambda\!\!\!^{-2}_C}. \tag{69}$$

我们验证了，这对于氢来说是一个极佳的近似。方程 (69) 中的微扰理论结果

表 VII. 方程 (66) 中由有限核尺寸引起的一阶微扰理论修正，对于 $\varepsilon^{(1)}_{1\,\nu}$，$\nu$ [其中 $\nu = a, b$]。核半径 r_a 和 r_b 见方程 (5)，均方根核电荷半径 r_N 列于表 I。

同位素 (Z, A)	$\varepsilon^{(1)}_{1\,a}$，(哈特里)	$\varepsilon^{(1)}_{1\,b}$，(哈特里)
氢 (1, 1)	$1.683743E^{-10}$	$1.683736E^{-10}$
氢 (1, 2)	$1.077785E^{-9}$	$1.077778E^{-9}$
氢 (1, 3)	$7.36714E^{-10}$	$7.36710E^{-10}$
氦 (2, 3)	$1.47484E^{-8}$	$1.47482E^{-8}$
氦 (2, 4)	$1.07128E^{-8}$	$1.07126E^{-8}$
钾 (19, 39)	$4.24722E^{-4}$	$4.24232E^{-4}$
钾 (19, 40)	$4.25506E^{-4}$	$4.25015E^{-4}$
钾 (19, 41)	$4.28869E^{-4}$	$4.28374E^{-4}$
铷（37，85）	$1.31164E^{-2}$	$1.30612E^{-2}$
铷（37，87）	$1.30882E^{-2}$	$1.30331E^{-2}$
铯（55，133）	0.145819	0.144503
铯（55，135）	0.145964	0.144646
铅（82，204）	3.25838	3.19659
铅（82，206）	3.26777	3.20580
铅 (82, 207)	3.27167	3.20962
铅 (82, 208)	3.27822	3.21605
铋(83, 209)	3.67177	3.60062
铀 (92, 235)	10.7543	10.5056
铀 (92, 236)	10.7799	10.5305
U（92，238）	10.8180	10.5677

由方程 (66) 采用以下近似得到：$Q_1(\rho) \approx Q_1(0)$、$Q_2(\rho) \approx Q_2(0)$ 以及 $\gamma \approx 1$。第一和第二个近似基于不等式 $0 < \rho < \rho_\nu \ll 1$ [（见方程 (66)）]，该不等式对氢及所有 HLI 均成立。第三个近似基于不等式 $Z\alpha \ll 1$，该不等式对氢和轻类氢离子成立。对于重类氢离子，$Z\alpha$ 不是小参数，因此方程 (69) 应作修改。所有 HLI 基态能量的有限核尺寸修正为

$$\varepsilon^{(1)}_{1,a} \approx \frac{2m_e c^2}{\gamma(2\gamma+1)}\,\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}\,\frac{m^3}{m_e^3}\,\frac{r_N^{2\gamma}}{\lambda\!\!\!^{-2\gamma}_C}, \tag{70a}$$

$$\varepsilon^{(1)}_{1,b} \approx \frac{5^\gamma\, 3^{1-\gamma}\, 2\, m_e c^2}{\gamma(2\gamma+1)(2\gamma+3)}\,\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}\,\frac{m^3}{m_e^3}\,\frac{r_N^{2\gamma}}{\lambda\!\!\!^{-2\gamma}_C}. \tag{70b}$$

请注意，方程（69）中氢和轻 HLI 的 $1s$ 态能量的有限核尺寸修正仅取决于核均方根电荷半径 r_N，而与核电荷分布的细节无关。然而，对于具有较高 Z 的重类氢离子，s 态能量的有限核尺寸修正会受到核电荷分布细节的影响，方程（70a）和（70b）针对模型（a）和（b）给出的有限核尺寸修正也不同。因此，为了更好地与 s 态的实验能量以及 $1s$-$2s$ 和 $1s$-$3s$ 跃迁频率进行比较，开发并采用更准确的核电荷分布模型至关重要。

B. 使用 $W_{ba}(r)$的微扰理论

一阶修正 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ 为:

$$\varepsilon_{ba}^{(1)} = \frac{4\pi A_-^2}{\mathcal{N}_a}\int_0^{r_a} W_{ba}(r)\Big[g_-^2(r)+f_-^2(r)\Big]r^2dr + \frac{4\pi A_+^2}{\mathcal{N}_a}\int_{r_a}^{r_b} W_{ba}(r)\Big[g_+^2(r)+f_+^2(r)\Big]r^2dr, \quad (71)$$

其中， $g_\pm(r)$和 $f_\pm(r)$是模型 (a)的径向波函数。函数 $g_+(r)$和 $f_+(r)$由方程 (36)给出，而 $g_-(r)$和 $f_-(r)$由方程 (45)给出。常数 $A_\pm$ 由方程 (25)确定，归一化常数 $\mathcal{N}_a$ 为,

$$\mathcal{N}_a = 4\pi A_-^2\int_0^{r_a}\Big[g_-^2(r)+f_-^2(r)\Big]r^2dr + 4\pi A_+^2\int_{r_a}^{\infty}\Big[g_+^2(r)+f_+^2(r)\Big]r^2dr. \quad (72)$$

为了计算 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ ，利用方程中给出的电子密度 $\varrho_a(r)$ (71) 将其改写会很有帮助:

$$\varrho_a(r) = \begin{cases} \dfrac{4\pi A_-^2}{\mathcal{N}}\Big[g_-^2(r)+f_-^2(r)\Big], & r<r_a, \\ \dfrac{4\pi A_+^2}{\mathcal{N}}\Big[g_+^2(r)+f_+^2(r)\Big], & r>r_a, \end{cases} \quad (73)$$

因此，方程 (71)可写为

$$\varepsilon_{ba}^{(1)} = \int_0^{r_b} W_{ba}(r)\varrho_a(r)r^2dr. \quad (74)$$

方程 (12)中的两分量波函数在 $r=r_a$处连续，即

$$A_-\left(g_-(r_a),\, f_-(r_a)\right) = A_+\left(g_+(r_a),\, f_+(r_a)\right),$$

因此，方程 (73)中的电子密度 $\varrho_a(r)$也连续。此外， $\varrho_a(r)$在区间 $0<r<r_b$内光滑，即对于任意 $r\in(0,r_b)$，以下不等式均成立： $\left|\varrho(r)-\varrho(r_a)\right| \ll \varrho(r_a)$。注意，尽管人们可能会认为方程 (74)可以近似为

$$\varepsilon_{ba}^{(1)} \approx \varrho(r_a)\int_0^{r_b} W_{ba}(r)r^2dr, \quad (75)$$

r_b可以很容易地验证$\int W_{ba}(r)r^2dr=0$，因此方程（75）中的0近似并不成立。

表 VIII. H&HLI体系基态的微扰理论修正 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ [（以哈特里为单位）] [，见方程（76）]。无量纲参数 δ_{ba} 定义见方程（77）。能量修正$\varepsilon_{1,\ ba}$ 及其不确定度$\delta\varepsilon_{1,\ ba}$ （由核均方根电荷半径的不确定度 [引起，以哈特里为单位] ）是通过方程（78）和（79）进行非微扰计算得到的。

同位素（Z, A)	$\varepsilon_{ba}^{(1)}$	δ_{ba}	$\varepsilon_{1,\ ba}\ (\delta\varepsilon_{1,\ ba})$
氢（1, 1）	$-2.39058E^{-16}$	$-4.78371E^{-16}$	$-3.26\ (15)\ E^{-16}$
氢（1, 2）	$-2.37631E^{-15}$	$-4.75385E^{-15}$	$-2.48\ (3)\ E^{-15}$
氢(1, 3)	$-1.91704E^{-15}$	$-3.83472E^{-15}$	$-1.57(11)E^{-15}$
氦(2, 3)	$-8.14903E^{-14}$	$-4.07504E^{-14}$	$-8.59(4)E^{-14}$
氦(2, 4)	$-5.4718E^{-14}$	$-2.73613E^{-14}$	$-5.80(3)E^{-14}$
钾(19, 39)	$-1.20571E^{-7}$	$-6.64768E^{-10}$	$-1.2837(15)E^{-7}$
钾(19, 40)	$-1.20812E^{-7}$	$-6.66093E^{-10}$	$-1.286(2)E^{-7}$
钾(19, 41)	$-1.21844E^{-7}$	$-6.71783E^{-10}$	$-1.297(4)E^{-7}$
铷(37, 85)	$-1.24451E^{-5}$	$-1.78437E^{-8}$	$-1.3283(15)E^{-5}$
铷(37, 87)	$-1.24169E^{-5}$	$-1.78034E^{-8}$	$-1.3254(13)E^{-5}$
铯(55, 133)	$-2.65761E^{-4}$	$-1.68324E^{-7}$	$-2.842(5)E^{-4}$
铯(55, 135)	$-2.66035E^{-4}$	$-1.68497E^{-7}$	$-2.845(5)E^{-4}$
铅(82, 204)	$-9.41203E^{-3}$	$-2.52128E^{-6}$	$-1.0096(4)E^{-2}$
铅(82, 206)	$-9.43977E^{-3}$	$-2.52871E^{-6}$	$-1.0125(4)E^{-2}$
铅(82, 207)	$-9.45126E^{-3}$	$-2.53179E^{-6}$	$-1.0138(4)E^{-2}$
铅(82, 208)	$-947062E^{-3}$	$-2.53698E^{-6}$	$-1.0159(4)E^{-2}$
铋(83, 209)	$-1.06803E^{-2}$	$-2.78397E^{-6}$	$-1.1458(9)E^{-2}$
铀（92, 235）	$-3.20879E^{-2}$	$-6.60084E^{-6}$	$-3.447(4)E^{-2}$
铀（92, 236）	$-3.21652E^{-2}$	$-6.61674E^{-6}$	$-3.455(3)E^{-2}$
U（92, 238）	$-3.22805E^{-2}$	$-6.64045E^{-6}$	$-3.467(3)E^{-2}$

方程 (74) 中的修正 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ 可写为

$$\varepsilon_{ba}^{(1)} = \int_0^{r_b} W_{ba}(r)\left[\varrho(r)-\varrho(0)\right]r^2dr. \quad (76)$$

模型 (b) 的基态能量修正见方程 (76)，并列于表 VIII 中；表中还列出了基态结合能的无量纲修正,

$$\delta_{ba} = \frac{\varepsilon_{ba}^{(1)}}{mc^2-\varepsilon_1^{(0)}}, \quad (77)$$

其中， $\varepsilon_1^{(0)}$ 见方程 (21)。作为比较，表 VIII 给出了$\varepsilon_{1,\ ba}$ 及其不确定度 $\delta\varepsilon_{1,\ ba}$ ，这些量是通过对方程进行非微扰计算得到的,

$$\varepsilon_{1,ba} = \varepsilon_{1,b}-\varepsilon_{1,a}, \quad (78)$$

$$\delta\varepsilon_{1,ba} = \left|\frac{\partial\varepsilon_{1,ba}}{\partial r_N}\right|\delta r_N = \left|\delta\varepsilon_{1,b}-\delta\varepsilon_{1,a}\right|, \quad (79)$$

其中，$\delta\varepsilon_{1,a}$ 和 $\delta\varepsilon_{1,b}$ 由下式给出

$$\delta\varepsilon_{1,a} = \left|\frac{\partial\varepsilon_{1,a}}{\partial r_N}\right|\delta r_N, \quad \delta\varepsilon_{1,b} = \left|\frac{\partial\varepsilon_{1,b}}{\partial r_N}\right|\delta r_N.$$

$\varepsilon_{1,a}$、 $\delta\varepsilon_{1,a}$ 和 $\varepsilon_{1,b}$、 $\delta\varepsilon_{1,b}$ 列于表 III。请注意，对于所有同位素，一阶微扰修正 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ 都接近非微扰修正$\varepsilon_{1,ba}$ 。换言之，我们得出结论：一阶微扰修正 $\varepsilon_{ba}^{(1)}$ 对轻同位素和重同位素都能给出准确结果。

总之，对于轻核，微扰理论所得结果与非微扰数值计算在 $\varepsilon_{1,a}$ 和 $\varepsilon_{1\,a}^{(1)}$, 之差方面非常接近；但对于重同位素，两者差异较大（见表 III 中使用模型 (a) 解析计算得到的重同位素 $\varepsilon_{1,a}$ 数值与表 VII 中使用模型 (a) 通过微扰理论计算得到的 $\varepsilon_{1\,a}^{(1)}$, 数值之间的显著差异）。

V. 核电荷分布的双参数费米模型

在模型 (c) 中，假定原子核内的电荷分布为 TPF M [24]。参考文献 [21, 22,25] 研究了使用 TPFM 对核电荷分布进行参数化时，氢和类氢离子基态超精细分裂的有限核尺寸修正。至少对于较重的原子核，TPFM 比模型 (a) 或 (b) 更符合实际；但对于轻核，其实际适用程度尚不明确。TPFM 电荷分布为,

$$\varrho_F(r) = \frac{Ze}{8\pi a_F^3 \left|\mathrm{Li}_3(-e^{c_F/a_F})\right|}\left[\exp\left(\frac{r-c_F}{a_F}\right)+1\right]^{-1}, \tag{80}$$

其中 $\mathrm{Li}_n(\bullet)$ 是 [47] 阶n多对数函数。这里， c_F 是半密度核半径， a_F 是分布厚度参数。电荷密度归一化如下:

$$4\pi\int_0^\infty \varrho_F(r) r^2 dr = Ze.$$

核电荷半径为 $r_N = \sqrt{\langle r^2\rangle_N}$ ，由下式给出:

$$\begin{aligned} r_N^2 \equiv \langle r^2\rangle_N &= \frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \varrho_F(r) r^4 dr \\ &= 12 a_F^2 \frac{\mathrm{Li}_5(-e^{c_F/a_F})}{\mathrm{Li}_3(-e^{c_F/a_F})}. \end{aligned} \tag{81}$$

注意，多对数函数的自变量中包含一个自变量为 c_F/a_F 的指数函数。我们利用公式 (81) 得到 c_F 作为 r_N 和 a_F 的函数。由 r_N 和 a_F 中的不确定度 δr_N 和 δa_F 导致的 c_F 的不确定度 δc_F 为,

$$\delta c_F = \sqrt{\left(\frac{\partial c_F}{\partial r_N}\delta r_N\right)^2 + \left(\frac{\partial c_F}{\partial a_F}\delta a_F\right)^2}. \tag{82}$$

表 IX. 若干重同位素的半密度核半径 c_F （单位为玻尔）、分布厚度参数 a_F （单位为玻尔），以及 c_F 和 a_F 中的不确定度 δc_F 和 δa_F。 a_F 和 δa_F 取自参考文献 [24]， c_F 根据公式 (81) 计算，δc_F 根据公式 (82) 计算， r_N 和 δr_N 则列于表 I 中。

同位素（Z， A）	c_F （δc_F）	a_F （δa_F）
铅（82， 206）	$1.2449(29)E^{-4}$	$1.030(15)E^{-5}$
铅 (82, 207)	$1.2456(36)E^{-4}$	$1.032(19)E^{-5}$
铋 (83, 209)	$1.278(12)E^{-4}$	$8.84(74)E^{-6}$
U（92， 238）	$1.3194(61)E^{-4}$	$1.143(30)E^{-5}$

许多原子核的核电荷半径 r_N 及其不确定度 δr_N发表于参考文献 [24],，而参数 a_F 及其不确定度 δa_F 在 a_F 中的数值发表于参考文献 [27]。随着 $a_F \to 0$，原子核内部的电荷分布变为,

$$\lim_{a_F\to 0}\varrho_F(r) = \frac{3Ze}{4\pi r_b^3}\Theta(r_b - r), \quad \text{and } r_b = \lim_{a_F\to 0} c_F.$$

图2显示了三种宽度参数取值下，电荷密度分布随r/r_N 的变化情况： a_F =0.02 r_N、 0.1 r_N、 0.15 r_N（分别为红色、绿色和蓝色）。显然，随着 $a_F \to 0$，电荷分布趋近于上文给出的极限。此外，当 $a_F \to 0$时， $c_F \to \sqrt{5/3}\,r_N$。图2中的黑色虚线表示该极限下的电荷密度。

TPFM电荷分布给出以下势（为简便起见，在此方程中我们用 c 和 a 分别代替 a_F 和c_F）：

$$\begin{aligned} V_F(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{4\pi}{r}\int_r^\infty \varrho_F(r')\, r'(r'-r)\, dr' = \\ Ze^2\left[\frac{\mathrm{Li}_3\left(-e^{\frac{c}{a}-\frac{r}{a}}\right)}{r\,\mathrm{Li}_3\left(-e^{\frac{c}{a}}\right)} + \frac{\mathrm{Li}_2\left(-e^{\frac{c}{a}-\frac{r}{a}}\right)}{2a\,\mathrm{Li}_3\left(-e^{\frac{c}{a}}\right)} - \frac{1}{r}\right]. \end{aligned} \tag{83}$$

我们对重核 ^{206}铅、 ^{207}铅、 ^{209}铋和 ^{238}铀数值求解狄拉克方程 (13)，以获得径向波函数 $g_n(r)$ 和 $f_n(r)$，以及采用势 (83) 得到的本征能量 ε_n ，其中 c_F 和 a_F 列于表 I X。 ns 态的能量 ε_n 的不确定度 $\delta\varepsilon_n$ 可估算如下:

$$\delta\varepsilon_n = \sqrt{\left(\delta\varepsilon_n^{(r)}\right)^2 + \left(\delta\varepsilon_n^{(a)}\right)^2}, \tag{84}$$

其中， $\delta\varepsilon_n^{(r)}$是由于 r_N的不确定度而导致的 ε_n 不确定度， $\delta\varepsilon_n^{(a)}$是由于 a_F的不确定度而导致的 ε_n 不确定度。 $\delta\varepsilon_n^{(r)}$ 和 $\delta\varepsilon_n^{(a)}$可以近似

表 X。 方程（85）中各态能量的有限核尺寸修正 $\varepsilon_{n,\ c}$ 以及方程（84）中 ε_n 的不确定度 $\delta\varepsilon_n$。

同位素 (Z,A)	$\varepsilon_{1,\ c}$ $(\delta\varepsilon_1)$	$\varepsilon_{2,\ c}$ $(\delta\varepsilon_2)$
铅（82, 206）	2.4605(10)	0.42724(17)
铅（82, 207）	2.4634(10)	0.42774(17)
铋（83, 209）	2.740(29)	0.4798(50)
U（92, 238）	7.2952(60)	1.3858(11)

为：

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon_n^{(r)} &\approx \frac{1}{2}\Big|\varepsilon_n\Big(c_F(r_N+\delta r_N,a_F),a_F\Big)\\ &\quad -\varepsilon_n\Big(c_F(r_N-\delta r_N,a_F),a_F\Big)\Big|,\\ \delta\varepsilon_n^{(a)} &\approx \frac{1}{2}\Big|\varepsilon_n\Big(c_F(r_N,a_F+\delta a_F),a_F+\delta a_F\Big)\\ &\quad -\varepsilon_n\Big(c_F(r_N,a_F-\delta a_F),a_F-\delta a_F\Big)\Big|,\end{aligned}$$

其中，$\varepsilon_n(c_F(r_N\pm\delta r_N,a_F)\ a_F)$是核均方根电荷半径为 $r_N\pm\delta r_N$时的 ns 态能量，而$\varepsilon_n(c_F(r_N,a_F\pm\delta a_F)\ a_F\pm\delta a_F)$是分布厚度参数为 $a_F\pm\delta a_F$时的 ns 态能量。有限核尺寸能量修正$\varepsilon_{n,\ c}$ 为

$$\varepsilon_{n,c}=\varepsilon_n-\varepsilon_n^{(0)},\tag{85}$$

其中，$\varepsilon_n^{(0)}$是点状原子核的 ns 态能量。重同位素的$\varepsilon_{n、\ c}$ 和 $\delta\varepsilon_n$ 列于表 X。比较表 III 和表 IV 中的$\varepsilon_{n、\ c}$与$\varepsilon_{n、\ a}$ 以及$\varepsilon_{n、\ b}$，可以看出$\varepsilon_{n、\ a}>\varepsilon_{n、\ b}>\varepsilon_{n、\ c}>0$ 和$\varepsilon_{n、\ a}-\varepsilon_{n、\ b}>\varepsilon_{n、\ b}-\varepsilon_{n、\ c}$。对于 ^{206}铅、 ^{207}铅和 ^{238}铀，模型（a）、（b）和（c）中 ε_n 的 $\delta\varepsilon_n$ 不确定度相同。这是因为 $\delta\varepsilon_n^{(a)}\ll\varepsilon_n^{(r)}$，见方程（84）。对于^{209}铋， $\delta\varepsilon_n^{(a)}$ 和 $\varepsilon_n^{(r)}$处于同一数量级，而模型（c）的 $\delta\varepsilon_n$ 不确定度大于模型（a）和（b）的不确定度。

VI. G 基态超精细分裂 TING

在狄拉克方程形式中，电子（位于空间点 r）与原子核（位于原点）的磁矩之间的超精细相互作用可用矢量势 A(r) 表示。相互作用哈密顿量为

$$H_{\rm mag}=[c]\,e\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}),\tag{86}$$

其中，该因子 $[c]$ 在国际单位制中存在，而在高斯单位制中为 1；A(r) 是由原子核磁矩产生的矢量势，其磁矩密度为 $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}')$,

$$\mathbf{A}_\nu(\mathbf{r})=\Big[\frac{\mu_0}{4\pi}\Big]\int\frac{\boldsymbol{\mu}_\nu(\mathbf{r}')\times(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\,d^3\mathbf{r}',\tag{87}$$

其中积分遍及整个空间。下标 ν 表示磁矩分布的模型：$\nu=0$、 a、 b、 c 分别为点状、均匀表面、均匀体积和 TPFM。这里，该因子 $\left[\frac{\mu_0}{4\pi}\right]$ 在国际单位制中存在，而在高斯单位制中为 1。我们仅考虑各向同性模型，此时磁矩密度 $\boldsymbol{\mu}(r')$ 仅取决于距原子核质心的距离 $r'=|\mathbf{r}'|$。对于点状分布， $\nu=0$,

$$\boldsymbol{\mu}_0(r)=g_I\mu_N\mathbf{I}\,\delta^3(\mathbf{r}),\tag{88}$$

其中， μ_N 为核磁子， $\mu_N=e\hbar/(2m_pc)$采用高斯单位制， m_p 为质子质量， g_I 为核g因子，I 为核自旋算符，δ^3(r) 为三维狄拉克δ函数。对于 $\nu=a$,

$$\boldsymbol{\mu}_a(r)=\frac{g_I\mu_N}{4\pi r_a^2}\,\mathbf{I}\,\delta(r-r_a),\tag{89}$$

其中， $\delta(\bullet)$为狄拉克 δ 函数。对于 $\nu=b$,

$$\boldsymbol{\mu}_b(r)=\frac{3g_I\mu_N}{4\pi r_b^3}\,\mathbf{I}\,\Theta(r_b-r).\tag{90}$$

对于费米模型， $\nu=c$,

$$\boldsymbol{\mu}_c(r)=\frac{\vartheta_0}{e^{(r-c_F)/a_F}+1}\,g_I\mu_N\mathbf{I}.\tag{91}$$

因子 ϑ_0 由归一化条件确定,

$$4\pi\vartheta_0\int_0^\infty\frac{r^2dr}{e^{(r-c_F)/a_F}+1}=1.$$

由此可得,

$$\vartheta_0=-\frac{1}{8\pi a_F^3\mathrm{Li}_3(-e^{c_F/a_F})}.$$

将 $\boldsymbol{\mu}_\nu(r')$ 代入方程 (87)，得到：

$$\mathbf{A}_\nu(\mathbf{r})=\Big[\frac{\mu_0}{4\pi}\Big]\,\frac{g_I\mu_N}{r^2}\,\big[\mathbf{I}\times\mathbf{e}_r\big]\,\mathcal{M}_\nu(r),\tag{92}$$

其中

$$\mathcal{M}_0(r)=1,\tag{93}$$

$$\mathcal{M}_a(r)=\Theta(r-r_a),\tag{94}$$

$$\mathcal{M}_b(r)=\frac{r^3}{r_b^3}\,\Theta(r_b-r)+\Theta(r-r_b).\tag{95}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_c(r) &= 4\pi\vartheta_0\int_0^r\frac{r'^2dr'}{e^{(r'-c_F)/a_F}+1}\\ &= \frac{1}{\mathrm{Li}_3\big(-e^{c_F/a_F}\big)}\left[\frac{r^2}{2a^2}\ln\big(1+e^{(c_F-r)/a_F}\big)\right.\\ &\quad +\mathrm{Li}_3\big(-e^{c_F/a_F}\big)-\mathrm{Li}_3\big(-e^{(c_F-r)/a_F}\big)\\ &\quad \left.-\frac{r}{a_F}\mathrm{Li}_2\big(-e^{(c_F-r)/a_F}\big)\right].\end{aligned}\tag{96}$$

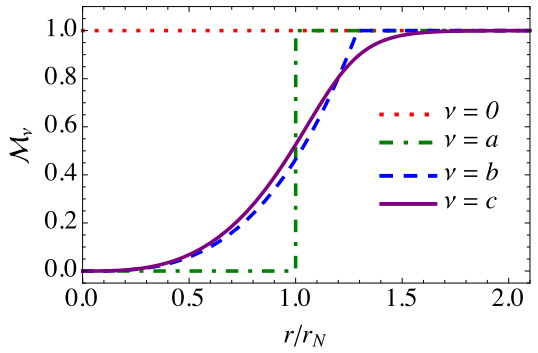


图 7。 $\mathcal{M}_\nu(r)$ 与 r 对于不同磁矩分布模型下的 ^{207}铅原子的关系：点状原子核、 $\nu = 0$ （红色点线），在半径为 r_a的球体表面均匀分布、$\nu = a$ （绿色点划线），在半径为 r_b的球体内部均匀分布、$\nu = b$ （蓝色虚线），以及方程（96）中的 TPFM， $\nu = c$ （紫色实线）。

函数 $\mathcal{M}_\nu(r)$ 随 r 的变化关系针对四种磁矩分布模型绘于图 7 中。将方程 (92) 代入方程 (86)，得到

$$H^{(\nu)}_{\rm hf} = \left[\frac{\mu_0 c}{4\pi}\right] \frac{e g_I \mu_N}{r^2}\, \mathcal{M}_\nu(r) \Big(\mathbf{I}\cdot\big[\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}\big]\Big). \tag{97}$$

假设基态的超精细分裂远小于 $2p$态的激发能，我们可以将自身限制在一阶微扰理论内，

$$\epsilon^{(\nu)}_{\rm hf}(F) = \big\langle \Psi^{(\nu)}_{F,m_F} \big| H^{(\nu)}_{\rm hf} \big| \Psi^{(\nu)}_{F,m_F} \big\rangle, \tag{98}$$

其中，基态波函数$|\Psi_{F,\ m_F}\rangle$ 为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \big| \Psi^{(\nu)}_{F,m_F} \big\rangle \ &= \ \sum_{m_J, m_F} \big\langle \frac{1}{2}, m_J;\, I, m_I \big| F, m_F \big\rangle \\ &\times \big\langle \mathbf{r} \big| \nu;\, \frac{1}{2}, m_J;\, I, m_I \big\rangle, \end{aligned} \tag{99}$$

$\lrcorner\nu;\ {}_{12},\ m_J;\ I,\ m_I\rangle$是具有总电子角动量矢量 J（$J = 1/2$）及其投影$m_J = \pm\frac{1}{2}$、核自旋 I 及其投影 m_I的原子角动量态矢，并且

$$\big\langle \mathbf{r} \big| \nu;\, \frac{1}{2}, m_J;\, I, m_I \big\rangle = \chi_{I,m_I}\, \psi^{(\nu)}_{m_J}(\mathbf{r}),$$

χ_{I,m_I} 是核自旋波函数，而 $\psi^{(\nu)}_{m_J}(\mathbf{r})$ 是空间波函数，

$$\psi^{(\nu)}_{m_J}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g_\nu(r)\Omega_{\frac{1}{2}0m_J} \\ i f_\nu(r)\Omega_{\frac{1}{2}1m_J} \end{pmatrix}. \tag{100}$$

对于 $\nu = 0$，径向波函数 $g_0(r)$ 和 $f_0(r)$ 由方程 (23) 给出。对于 $\nu = a$，径向波函数$g_a(r)$ 和 $f_a(r)$

$$\begin{aligned} g_a(r) \ &= \ g_+(r)\Theta(r - r_a) + g_-(r)\Theta(r_a - r), && \text{(101a)} \\ f_a(r) \ &= \ f_+(r)\Theta(r - r_a) + f_-(r)\Theta(r_a - r), && \text{(101b)} \end{aligned}$$

其中 $g_+(r)$ 和 $f_+(r)$ 由方程 (27) 给出，而 $g_-(r)$ 和 $f_-(r)$ 由方程 (45) 给出。对于 $\nu = b$，波函数（$g_b(r)$ $f_b(r)$）按照第 IIIC 节所述通过数值计算得到；对于 $\nu = c$，则必须使用狄拉克方程对包含双参数费米核模型分布的势进行数值计算，以求得波函数。

将方程 (99) 代入方程 (98)，可得 $\epsilon^{(\nu)}{}_{\rm hf}(F)$,

$$\epsilon^{(\nu)}_{\rm hf}(F) = \frac{\Delta_\nu}{2}\big[F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)\big], \tag{102}$$

其中 $S = 1/2$。超精细分裂 $\Delta_\nu = \epsilon^{(\nu)}{}_{\rm hf}(I + 1/2) - \epsilon^{(\nu)}{}_{\rm hf}(I - 1/2)$ 为

$$\begin{aligned} \Delta_\nu \ &= \ -\left[\frac{\mu_0 c}{4\pi}\right]\left(I + \frac{1}{2}\right)\frac{8 e g_I \mu_N}{3} \\ &\times \int_0^\infty \mathcal{M}_\nu(r) g_\nu(r) f_\nu(r) dr. \end{aligned} \tag{103}$$

参考文献 [21] 中给出的 H&HLI 基态超精细分裂表达式等价于

$$\begin{aligned} \Delta \ &= \ \frac{4mc^2}{3}\,\frac{\alpha(Z\alpha)^3}{\gamma(2\gamma-1)}\, g_I\, \frac{m_e}{m_p}\left(I + \frac{1}{2}\right) \\ &\times \Big[(1-\xi)(1-\eta) + \zeta_{\rm QED}\Big]. \end{aligned} \tag{104}$$

请注意方程 (104) 中使用了电子约化质量 m，如参考文献 [30–33] 中所述。接下来我们将方程 (104) 写成以下形式

$$\Delta = \Delta_0 \Big[(1-\xi)(1-\eta) + \zeta_{\rm QED}\Big], \tag{105}$$

其中

$$\Delta_0 = \frac{4mc^2}{3}\,\alpha(Z\alpha)^3\, g_I\, \frac{m_e}{m_p}\left(I + \frac{1}{2}\right)\frac{1}{\gamma(2\gamma-1)}. \tag{106}$$

Δ_0 是众所周知的未修正相对论超精细分裂 [21]。这里，ξ 和 η 分别是由电荷分布和磁矩分布（玻尔-魏斯科夫修正）引起的超精细分裂有限核尺寸修正 [见方程 (109)、(113) 和 (117)，以及下文对模型 (a)、(b) 和 (c) 的说明]，，而量 $\zeta_{\rm QED}$ 是超精细分裂的 QED 辐射修正。参考文献 [21], 讨论了相对论 QED 辐射修正，并定义了一个量 $\chi_{\rm QED}$。我们倾向于用量 $\zeta_{\rm QED} \equiv \gamma(2\gamma-1)\chi_{\rm QED}$ 来表示 QED 辐射修正，因为 $\zeta_{\rm QED}$ 可以直接与 ξ 和 η进行比较，这一点从方程 (104) 中可以清楚看出。请注意，我们在此并未计算 QED 辐射修正，而是采用文献中报道的数值。

下面，我们计算磁矩分布的四种模型 $\nu = 0, a, b, c$对应的超精细分裂。我们应当指出，核磁

表 XI. 使用方程（106）[计算得到的点状原子核的核 g因子 g_I、核自旋 I 和基态超精细分裂 Δ_0（单位为哈特里],）。 ^{1}H、 ^{2}H、 ^{3}H 和 ^{3}He 原子核的核 g 因子取自 2018 CODATA，即参考文献 [10],；^{39}K、 ^{40}K、 ^{41}K、 ^{85}Rb、 ^{87}Rb、 ^{133}Cs 的核因子取自参考文献 [56],； ^{135}Cs 和 ^{235}U 的核因子取自参考文献 [58],； ^{207}Pb 和 ^{209}Bi 的核因子取自参考文献 [57]。

同位素 (Z, A)	g_I	I	Δ_0
氢 (1, 1)	5.5856946893(16)	$1/2$	$2.1589180648(6)E^{-7}$
氢 (1, 2)	0.8574382338(22)	1	$4.972458067(13)E^{-8}$
氢 (1, 3)	5.957924931(12)	$1/2$	$2.3036226460(46)E^{-7}$
氦 (2, 3)	$-4.255250615(50)$	$1/2$	$1.316544463(15)E^{-8}$
钾 (19, 39)	0.26061413(22)	$3/2$	$1.4234088(12)E^{-4}$
钾 (19, 40)	$-0.324063(62)$	4	$-3.98239(77)E^{-4}$
钾 (19, 41)	0.14304731(15)	$3/2$	$7.812889(8)E^{-5}$
铷 (37, 85)	0.5391679(11)	$5/2$	$3.554396(7)E^{-3}$
铷 (37, 87)	1.8272315(18)	$3/2$	$8.030529(8)E^{-3}$
铯 (55, 133)	0.732356746(95)	$7/2$	$2.4735911(32)E^{-2}$
铯 (55, 135)	0.78069(6)	$7/2$	$2.63683(19)E^{-2}$
铅 (82, 207)	1.16438(4)	$1/2$	$5.1434(2)E^{-2}$
铋 (83, 209)	0.91347(4)	$9/2$	$2.14590(10)E^{-1}$
U (92, 235)	$-0.109(9)$	$7/2$	$-3.66(29)E^{-2}$

磁矩分布可能与核电荷分布大不相同。这对于核壳层外有一个核子的原子核尤其如此。附录 D 讨论了这种情况。在我们的计算中，核电荷和核磁矩采用了相同的分布。

A. 点状电荷与磁矩

表 XI 列出了若干同位素的 Δ_0 数值。对于某些离子，g_I 为负值，超精细相互作用因此呈铁磁性，故 $\Delta_0 < 0$。图 8 绘出了未经修正的超精细分裂的绝对值随 A变化的曲线。

B. 模型 (a) 的电荷与磁矩分布

将方程（94）和（101）代入方程（103），并取$\nu = a$，可得

$$\Delta_a = -\frac{4mc^2}{3}\alpha(Z\alpha)^3 g_I \frac{m_e}{m_p}\Big(I+\frac{1}{2}\Big) \times a_B^2 \int_{r_a}^{\infty} g_+(r) f_+(r) dr. \tag{107}$$

与方程（105）中一样，将 Δ_a 写成如下形式较为方便

$$\Delta_a = \Delta_0\big(1-\xi_a\big)\big(1-\eta_a\big), \tag{108}$$

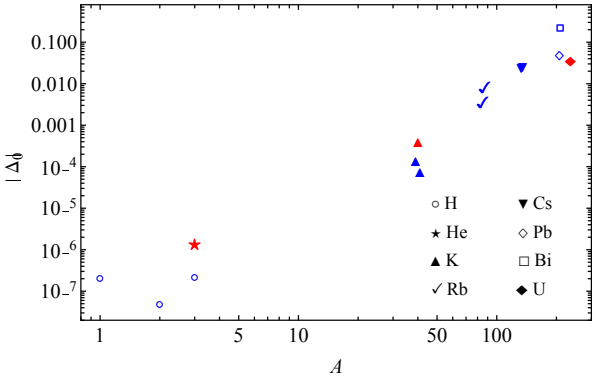


图 8. 方程（106）中点状原子核的超精细分裂 $|\Delta_0|$ 的绝对值（以哈特里为单位）随 A的变化。超精细分裂 Δ_0 为正值（ g_I为正）时以蓝色符号标示，为负值（ g_I为负）时以红色标示。

其中， Δ_0 由公式（106）给出。修正项 ξ_a 和 η_a 是在模型 (a) 中计算的。具体而言，

$$\xi_a = \frac{\mathcal{G}_0 - \mathcal{G}_a}{\mathcal{G}_0}, \quad \eta_a = \frac{\mathcal{G}_-^{(a)}}{\mathcal{G}_a}, \tag{109}$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0 &= \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^{\infty} g_0(r) f_0(r) dr \\ &= -\frac{1}{\gamma(2\gamma-1)}, \end{aligned} \tag{110a}$$

$$\mathcal{G}_-^{(a)} = \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^{r_a} g_{a,-}(r) f_{a,-}(r) dr, \tag{110b}$$

$$\mathcal{G}_a = \mathcal{G}_-^{(a)} + \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_{r_a}^{\infty} g_+(r) f_+(r) dr. \tag{110c}$$

修正 ξ_a 和 ξ_b 列于表 XII 中， η_a 和 η_b 列于表 XIII 中。括号中的数字表示不确定度。例如， ξ_a 对于氢同位素 ^{1} 为

$$\xi_a = 1.1092(2)E^{-3} \equiv (1.1092 \pm 0.0002)\times 10^{-3}.$$

对于所有同位素， $|\xi_a - \xi_b|$ 都大于 ξ_a 和 ξ_b的不确定度，而 $|\eta_a - \eta_b|$ 远大于 η_a 和 η_b的不确定度。因此，基态超精细分裂对核电荷和磁矩分布非常敏感。

表 XII. 模型 (a) [式（109）], 和 (b) [式（113）]的超精细分裂修正 ξ_a 和 ξ_b。

同位素（Z, A)	ξ_a	ξ_b
氢 (1, 1)	$1.1092(2)E^{-3}$	$1.1106(2)E^{-3}$
氢 (1, 2)	$5.9912(2)E^{-4}$	$6.0261(2)E^{-4}$
氢（1, 3）	$4.087(9)E^{-4}$	$4.116(10)E^{-4}$
氦（2, 3）	$5.126(2)E^{-4}$	$5.0786(10)E^{-4}$
钾 (19, 39)	$2.8513(15)E^{-3}$	$2.7643(7)E^{-3}$
钾 (19, 40)	$2.853(2)E^{-3}$	$2.7661(10)E^{-3}$
钾 (19, 41)	$2.864(4)E^{-3}$	$2.776(2)E^{-3}$
铷 (37, 85)	$9.173(5)E^{-3}$	$8.911(2)E^{-3}$
铷 (37, 87)	$9.163(4)E^{-3}$	$8.902(2)E^{-3}$
铯 (55, 133)	$2.4526(19)E^{-2}$	$2.3913(9)E^{-2}$
铯 (55, 135)	$2.454(2)E^{-2}$	$2.3924(9)E^{-2}$
铅 (82, 207)	0.107053(17)	0.105226(7)
铋 (83, 209)	0.11338(3)	0.111483(13)
铀 (92, 235)	0.19317(6)	0.19062(3)

表 XIII. 模型（a） [式（109）], 和（b） [式（113）]的超精细分裂修正 η_a 和 η_b。

同位素（Z, A)	η_a	η_b
氢（1, 1）	$1.060(11)E^{-5}$	$1.847(19)E^{-5}$
氢 (1, 2)	$2.6812(9)E^{-5}$	$4.6729(16)E^{-5}$
氢 (1, 3)	$2.22(5)E^{-5}$	$3.86(8)E^{-5}$
氦 (2, 3)	$4.961(8)E^{-5}$	$8.646(13)E^{-5}$
钾 (19, 39)	$9.083(5)E^{-4}$	$1.5807(9)E^{-3}$
钾 (19, 40)	$9.092(7)E^{-4}$	$1.5822(13)E^{-3}$
钾 (19, 41)	$9.127(14)E^{-4}$	$1.588(2)E^{-3}$
铷 (37, 85)	$2.6911(14)E^{-3}$	$4.665(3)E^{-3}$
铷 (37, 87)	$2.6883(12)E^{-3}$	$4.660(2)E^{-3}$
铯 (55, 133)	$6.179(5)E^{-3}$	$1.0645(9)E^{-2}$
铯 (55, 135)	$6.182(5)E^{-3}$	$1.0650(9)E^{-2}$
铅 (82, 207)	$1.8471(3)E^{-2}$	$3.1386(6)E^{-2}$
铋 (83, 209)	$1.9209(6)E^{-2}$	$3.2619(11)E^{-2}$
铀 (92, 235)	$2.7368(11)E^{-2}$	$4.620(2)E^{-2}$

C. 模型 (b) 的原子核内部电荷和磁矩分布

将方程 (95) 和 (101) 代入方程 (103)，并取$\nu = b$，得到

$$\begin{aligned}\Delta_b &= -\frac{4mc^2}{3}\alpha(Z\alpha)^3 g_I \frac{m_e}{m_p}\Big(I+\frac{1}{2}\Big)\\ &\times\Big\{a_B^2\int_0^{r_b}\frac{r^3}{r_b^3}g_{b,-}(r)f_{b,-}(r)dr\\ &+a_B^2\int_{r_b}^{\infty}g_+(r)f_+(r)dr\Big\}. \qquad (111)\end{aligned}$$

我们将 Δ_b 写成如下形式

$$\Delta_b = \Delta_0\big(1-\xi_b\big)\big(1-\eta_b\big), \qquad (112)$$

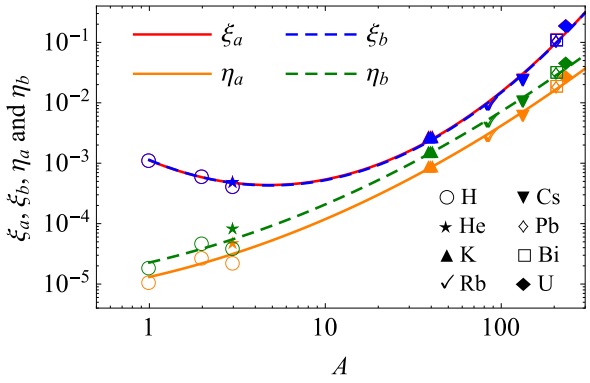


图 9. 核电荷和磁矩的有限核尺寸分布对基态超精细分裂产生的修正，随原子质量数 A变化。红色和橙色修正 ξ_a 和 η_a [ ] 109 ξ_b 定义于方程（ ）中；蓝色和绿色修正 η_b [] 定义于式（113） [蓝色]。拟合 ξ_a、η_a 和 ξ_b、 η_b 数据的实线旨在引导视线（见正文）。重绘图。

其中 Δ_0 由公式（106）定义，

$$\xi_b = \frac{\mathcal{G}_0-\mathcal{G}_b}{\mathcal{G}_0}, \quad \eta_b = \frac{\mathcal{G}_-^{(b)}-\mathcal{F}_-^{(b)}}{\mathcal{G}_b}, \qquad (113)$$

$\mathcal{G}_0$ 见式（110a），并且

$$\mathcal{F}_-^{(b)} = \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^{r_b}\frac{r^3}{r_b^3}g_{b,-}(r)f_{b,-}(r)dr, \qquad (114a)$$

$$\mathcal{G}_-^{(b)} = \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^{r_b}g_{b,-}(r)f_{b,-}(r)dr, \qquad (114b)$$

$$\mathcal{G}_b = \mathcal{G}_-^{(b)} + \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_{r_b}^{\infty}g_+(r)f_+(r)dr. \qquad (114c)$$

D. 模型（a）和（b）中的超精细分裂有限核尺寸修正

超精细分裂的有限核尺寸修正 ξ_a, ξ_b,η_a 和 η_b 列于表 XII 和表 XIII，并在图 9 中绘制为 A 的函数。数值分析表明，$\ln\xi_a$、$\ln\eta_a$、$\ln\xi_b$和$\ln\eta_b$可以很好地拟合为

$$\begin{aligned}\ln\xi_a(A) &= -6.79743 - 1.20214\ln A\\ &\quad +0.384078\ln^2 A, \qquad (115a)\\ \ln\eta_a(A) &= -11.2423 + 0.661711\ln A\\ &\quad +0.128055\ln^2 A, \qquad (115b)\\ \ln\xi_b(A) &= -6.78386 - 1.22495\ln A\\ &\quad +0.38719\ln^2 A, \qquad (115c)\\ \ln\eta_b(A) &= -10.6924 + 0.673483\ln A\\ &\quad +0.125229\ln^2 A. \qquad (115d)\end{aligned}$$

参考文献 [22] 计算了重 HLI 基态超精细分裂的有限核尺寸修正。表 XII 中铅 ^{207} 和铋 ^{209} 的修正 ξ_a 与参考文献 [22] 中计算的数值相差不大：ξ（铅）$=$ 0.1049，ξ（铋）$=0.1111$；表 XIII 中铋 ^{209} 的 η_a 与文献 [22] $\epsilon = 0.0118$ 报告的数值相差不大，而铅 ^{207} 的 η_b 与参考文献 [22] 中的 $\epsilon = 0.0419$ 相差也不太远。

在假设方程 (7) 中的 $W_{ba}(r)$较小的情况下[，即 $W_{ba}(r)$ 远弱于方程 (6) 中的 $W_a(r)$或 $W_b(r)$，见图 1]，，我们表明，对于模型（a）和（b），修正 ξ 几乎相同；而模型（a）和（b）对由磁矩分布引起的修正 η_ν 则给出了截然不同的数值。

E. 模型 (c) 中原子核内的电荷和磁矩分布

对于 TPFM 模型 (c)，

$$\Delta_c = \Delta_0\big(1-\xi_c\big)\big(1-\eta_c\big), \tag{116}$$

其中 Δ_0 由式 (106) 给出，

$$\xi_c = \frac{\mathcal{G}_0-\mathcal{G}_c}{\mathcal{G}_0}, \quad \eta_c = \frac{\mathcal{F}_c}{\mathcal{G}_c}, \tag{117}$$

and

$$\mathcal{G}_c = \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^\infty g_c(r)f_c(r)dr, \tag{118a}$$

$$\mathcal{F}_c = \frac{a_B^2}{Z^3\alpha}\int_0^\infty \Big[1-\mathcal{M}_c(r)\Big]g_c(r)f_c(r)dr. \tag{118b}$$

F. 超精细分裂的相对论量子电动力学辐射修正

现在我们纳入方程 (105) 中给出的相对论量子电动力学辐射修正 $\zeta_{\rm QED} = \gamma(2\gamma-1)\chi_{\rm QED}$。对于某些元素，参考文献 [22, 25] 中计算了量 $\chi_{\rm QED}$。修正 $\zeta_{\rm QED}$ 列于表 XIV。

我们用公式 [25],拟合 $\zeta_{\rm QED}$

$$\zeta_{\rm QED}^{\rm (fit)}(Z) = \frac{\alpha}{\pi}\Big[A_0 - A_1\,\alpha Z + A_2\,(\alpha Z)^2 + A_3\,(\alpha Z)^2\ln(\alpha Z) + A_4\big(\alpha Z\ln(\alpha Z)\big)^2\Big], \tag{119}$$

拟合结果为，

$$\begin{aligned} A_0 &= 0.509092\\ A_1 &= 7.08715,\\ A_2 &= 4.43975,\\ A_3 &= 0.696079,\\ A_4 &= 0.448402, \end{aligned}$$

表 XIV. 方程（ ）中超精细分裂的 QED辐射修正 $\zeta_{\rm QED} = \gamma\,2\gamma-(\,)\chi_{\rm QED}$，[1] 其中 γ 由方程（15）给出，$\chi_{\rm QED}$ 针对某些元素的计算见参考文献 [22, 25]。拟合 $\zeta^{\rm (fit)}$ 量子电动力学 是使用公式（119）计算的。

Z	$\zeta_{\rm QED}$	$\zeta^{\rm (fit)}$ 量子电动力学
1	0.00105756	0.00106387
2		0.000946973
3	0.000835844	0.000831409
5	0.000609149	0.000603679
7	0.000382069	0.00038002
10	0.0000466108	0.0000516092
19		−0.000884945
37		−0.00253464
49	−0.00348472	−0.00345706
53	−0.00373754	−0.00373092
55		−0.00386134
57	−0.0039463	−0.00398737
63	−0.00427325	−0.00433865
67	−0.00467521	−0.00455007
71	−0.00461933	−0.00474287
75	−0.00501339	−0.00491674
82	−0.0051733	−0.0051745
83	−0.0051822	−0.00520641
92		−0.00543714

且平均标准差 $\sigma_{\rm QED}$ 为

$$\begin{aligned}\sigma_{\rm QED} &= \Big(\frac{1}{N_Z}\sum_{n_Z}^{N_Z}\big(\zeta_{\rm QED}(Z)-\zeta_{\rm QED}^{\rm (fit)}(Z)\big)^2\Big)^{1/2}\\ &= 0.000058397,\end{aligned}$$

其中，$\zeta_{\rm QED}$ 取自表 XIV，$N_Z = 14$ 是表中列出 $\zeta_{\rm QED}$ 的元素数量，n_Z 是所用元素的递增索引。图 10 展示了 QED 辐射修正 $\zeta_{\rm QED}$ 及其根据公式（119）得到的拟合结果。拟合曲线（蓝色）与红点十分接近，因此我们认为公式（119）中的近似是令人满意的。公式（119）中的 QED 辐射修正 $\zeta^{\rm (fit)}$ 量子电动力学(Z)列于 H& HLI 的表 XIV。对于重同位素，$\zeta_{\rm QED}(Z)$满足以下不等式：$\zeta_{\rm QED} < 0$，以及 $\eta_a < |\zeta_{\rm QED}| < \eta_b \ll \xi$，其中 ξ_a 和 ξ_b 列于表 XII，η_a 和η_b 列于表 XIII。因此，我们认为，超精细分裂的主要贡献来自修正 ξ，即有限核电荷分布所导致的修正；其大小远大于相对论性 QED 辐射修正，以及有限核尺寸引起的磁矩分布修正。对于轻元素（例如氢和氦），$\zeta_{\rm QED} > 0$ 并满足以下不等式：$\zeta_{\rm QED} > \xi_a$、$\xi_b > \eta_a$、η_b；也就是说，基态超精细分裂的 QED 辐射修正大于有限核尺寸效应。对于重元素，$\zeta_{\rm QED} < 0$并满足以下不等式：$|\zeta_{\rm QED}| < \eta_a$、$\eta_b < \xi_a$、$\xi_b$；由电荷分布导致的超精细分裂有限核尺寸修正是最大的修正，使用

模型 (a)或(b)。

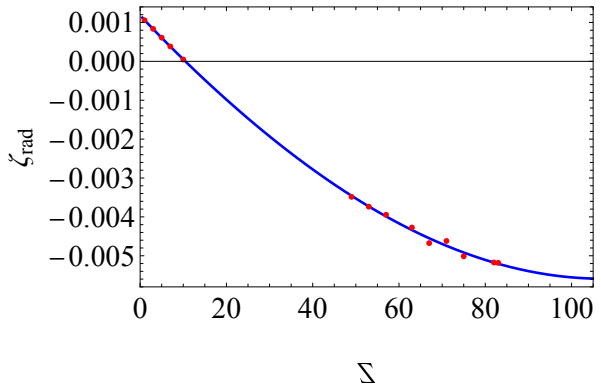


图 10 $\zeta_{\rm QED} = \gamma\,2\gamma - 。$ 方程（1）中的超精细分裂的QED辐射修正（红点）（105）$\chi_{\rm QED}$ 与核电荷 Z 的关系，其中$\chi_{\rm QED}$ 由文献 [22, 25]计算得到。蓝色曲线是对方程（119）中 $\zeta_{\rm QED}$ 的拟合。

VII. 模型 (a)、(b) 和 (c) 中超精细分裂不确定度的估计

基态超精细分裂 Δ_a（方程（108））和 Δ_b（方程（112））取决于核 g 因子 g_I 和核均方根电荷半径 r_N。实验测得了 g_I 和 r_N，其不确定度分别为 δg_I 和δr_N，见表 I 和表 XI。不确定度 δg_I 和 δr_N会导致不确定度 $\delta\Delta_a$ 和 $\delta\Delta_b$，其表达式为

$$\delta\Delta_\nu = \sqrt{\left(\frac{\partial\Delta_\nu}{\partial g_I}\,\delta g_I\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta_\nu}{\partial r_N}\,\delta r_N\right)^2}. \qquad (120)$$

利用方程（108）和（112），可将方程（120）写为:

$$\delta\Delta_\nu = \Delta_\nu\sqrt{\left(\frac{\delta g_I}{g_I}\right)^2 + \left(\frac{\delta\xi_\nu}{1-\xi_\nu} + \frac{\delta\eta_\nu}{1-\eta_\nu}\right)^2}. \qquad (121)$$

方程（116）中的基态超精细分裂 Δ_c 取决于 g_I、r_N 和分布厚度参数 a_F。参数 g_I、r_N和 a_F及其不确定度 δg_I、δr_N 和 δa_F均由实验测得，见表I、IX和XI。由不确定度 δg_I、δr_N 和 δa_F 导致的 Δ_c 中的不确定度 $\delta\Delta_c$ 估计为:

$$\delta\Delta_c = \sqrt{\left(\frac{\partial\Delta_c}{\partial g_I}\,\delta g_I\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta_c}{\partial r_N}\,\delta r_N\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta_c}{\partial a_F}\,\delta a_F\right)^2}. \qquad (122)$$

利用方程 (116)，我们可以将方程 (122) 改写为:

$$\delta\Delta_c = \left[\left(\frac{\delta g_I}{g_I}\right)^2 + \left(\frac{\delta\xi_c^{(r)}}{1-\xi_c} + \frac{\delta\eta_c^{(r)}}{1-\eta_c}\right)^2 + \left(\frac{\delta\xi_c^{(a)}}{1-\xi_c} + \frac{\delta\eta_c^{(a)}}{1-\eta_c}\right)^2\right]^{1/2}, \qquad (123)$$

其中 $\delta\xi_c^{(r)}$和 $\delta\xi_c^{(a)}$是 ξ_c 的不确定度，它们源于 r_N 和 a_F中的不确定度 δr_N 和 δa_F，

$$\delta\xi_c^{(r)} = \left|\frac{\partial\xi_c}{\partial r_N}\right|\delta r_N, \quad \delta\xi_c^{(a)} = \left|\frac{\partial\xi_c}{\partial a_F}\right|\delta a_F,$$

以及 $\delta\eta_c^{(r)}$和 $\delta\eta_c^{(a)}$是由于 r_N 和 a_F中的不确定度 δr_N 和 δa_F 而导致的 ξ_c 不确定度，

$$\delta\eta_c^{(r)} = \left|\frac{\partial\eta_c}{\partial r_N}\right|\delta r_N, \quad \delta\eta_c^{(a)} = \left|\frac{\partial\eta_c}{\partial a_F}\right|\delta a_F.$$

VIII. 超精细分裂：与实验比较

现在，我们将 H&HLI 基态超精细分裂的实验结果与采用模型 (a) 和 (b) 进行计算的结果进行比较。我们给出未包含和包含相对论性 QED辐射修正的计算结果。

理论结果相对于实验值的百分比不确定度定义如下，

$$\tau_\nu = \frac{\Delta_{\rm exp} - \tilde{\Delta}_\nu}{\Delta_{\rm exp}}, \qquad (124)$$

˜其中 $\nu = a$、b、c和 Δ_ν是包含 QED辐射修正的超精细分裂，其表达式为

$$\tilde{\Delta}_\nu = \Delta_0\left[(1-\xi_\nu)(1-\eta_\nu) + \zeta_{\rm QED}\right] = \Delta_\nu + \Delta_0\,\zeta_{\rm QED}. \qquad (125)$$

氢原子和氦离子的实验超精细分裂 $\Delta_{\rm exp}$ 取自参考文献 [48–52],；类氢铅离子的数值取自参考文献 [53],，类氢铋离子的数值取自参考文献˜ ˜和 [54]。量 Δ_a、Δ_b、$\Delta_{\rm exp}$、τ_a 和 τ_b 列于表 XV。对于 ^{1}氢原子和 ^{3}氦离子，˜ ˜$\tau_a < 0$ 和 $\tau_b > 0$，以及 $\Delta_a < \Delta_{\rm exp} < \Delta_b$。此外，$|\tau_a|$ 和 τ_b 小于有限核尺寸修正 η_ν 和ξ_ν，也小于 QED 辐射修正 $\zeta_{\rm QED}$。对于 ^{2}氢和^{3}氢原子，τ_a 和 τ_b 均为正值，且 $\tilde{\Delta}_a$ 和 $\tilde{\Delta}_b$低于 $\Delta_{\rm exp}$。此外，τ_a 和 τ_b 大于 η_ν，但小于 ξ_ν 和 $\zeta_{\rm QED}$。对于 ^{207}铅离子，$\tau_a < 0$ 和 $\tau_b > 0$；对于 ^{209}铋离子，$\tau_a > 0$ 和 $\tau_b > 0$。对于 ^{207}铅和 ^{209}铋，$|\tau_a|$ 和 τ_b 均低于 η_ν 和 ξ_ν，但高于$\zeta_{\rm QED}$。

表 XV。 以哈特里为单位的超精细分裂实验值 $\Delta_{\rm exp}$ [], , 与采用模型（a）和（b）并计入相对论性 QED 辐射修正后，方程（125）中的计算结果 $\tilde{\Delta}_a$ 和 $\tilde{\Delta}_b$ 进行比较；同时列出理论结果相对于 $\Delta_{\rm exp}$的百分比不确定度（$\tilde{\tau}_a$、 $\tilde{\tau}_b$）。方括号中的数字表示 $\Delta_{\rm exp}$中的不确定度 $\delta\Delta_{\rm exp}$，以及在 $\nu = a$、b条件下 Δ_ν 中的不确定度 $\delta\Delta_\nu$，见方程（121）。氢原子和氦离子的实验值取自参考文献 [48–52], ; 类氢铅离子的数值取自参考文献 [53] , 类氢铋离子的数值取自参考文献 [54]。理论结果相对于实验值的百分比不确定度 τ_ν 见方程（124） []。本表未列出重离子的模型 (c) 结果；这些结果将在下文给出。

同位素（Z, A)	$\tilde{\Delta}_a$	$\delta\Delta_a/\Delta_a$	$\tilde{\Delta}_b$	$\delta\Delta_b/\Delta_b$	$\Delta_{\rm exp}$	τ_a	τ_b
氢 (1, 1)	$2.1587837(7)E^{-7}$	$3E^{-7}$	$2.1587637(8)E^{-7}$	$4E^{-7}$	$2.158775054569(2)E^{-7}$	$-4.0E^{-6}$	$5.2E^{-6}$
氢 (1, 2)	$4.97460440(14)E^{-8}$	$3E^{-8}$	$4.97448807(18)E^{-8}$	$4E^{-8}$	$4.9756850998(3)E^{-8}$	$2.2E^{-4}$	$2.4E^{-4}$
氢 (1, 3)	$2.305066(3)E^{-7}$	$1.4E^{-6}$	$2.305022(4)E^{-7}$	$1.8E^{-6}$	$2.30512816232(1)E^{-7}$	$2.7E^{-5}$	$4.6E^{-5}$
氦 (2, 3)	$-1.3170511(4)E^{-6}$	$3E^{-7}$	$-1.3170088(3)E^{-6}$	$2E^{-7}$	$-1.317031330040(2)E^{-6}$	$-1.5E^{-5}$	$1.7E^{-5}$
钾(19, 39)	$1.416801(3)E^{-4}$	$2E^{-6}$	$1.415971(3)E^{-4}$	$1.8E^{-6}$			
钾(19, 40)	$-3.9639(8)E^{-4}$	$1.9E^{-4}$	$-3.9616(8)E^{-4}$	$1.9E^{-4}$			
钾(19, 41)	$7.77649(4)E^{-5}$	$5E^{-6}$	$7.77191(3)E^{-5}$	$4E^{-6}$			
铷(37, 85)	$3.50330(2)E^{-3}$	$7E^{-6}$	$3.497280(19)E^{-3}$	$5E^{-6}$			
铷(37, 87)	$7.91520(4)E^{-3}$	$4E^{-6}$	$7.90160(3)E^{-3}$	$4E^{-6}$			
铯(55, 133)	$2.38846(6)E^{-2}$	$2E^{-5}$	$2.37919(4)E^{-2}$	$1.8E^{-5}$			
铯(55, 135)	$2.54604(19)E^{-2}$	$8E^{-5}$	$2.53615(19)E^{-2}$	$8E^{-5}$			
铅 (82, 207)	$4.5117(19)E^{-2}$	$4E^{-5}$	$4.46840(17)E^{-2}$	$4E^{-5}$	$4.4684(7)E^{-2}$	$-9.7E^{-3}$	$8.3E^{-3}$
铋 (83, 209)	$1.85493(12)E^{-1}$	$1.2E^{-5}$	$1.83335E^{-1}$	$1.0E^{-5}$	$1.86871(3)E^{-1}$	$1.4E^{-3}$	$3.5E^{-3}$
铀(92, 235)	$-2.85(22)E^{-2}$	$8E^{-2}$	$-3.46(27)$	$8E^{-2}$			

现在我们将模型 (c) 的结果与实验进行比较。对 ^{207}Pb 离子的计算结果为:

$$\xi_c = 0.11105(8), \quad \eta_c = 0.02086(3).$$

考虑到 $\Delta_0 = 5.1434(2) \times 10^{-2}$，我们得到

$$\Delta_c = 4.4858(2) \times 10^{-2},$$

因此

$$\tau_c = \frac{\Delta_{\rm exp} - \Delta_c}{\Delta_{\rm exp}} = -0.0039.$$

将表 XV 中的 τ_c 、 $\tau_a = -0.0097$ 和 $\tau_b = 0.0083$ 进行比较，可以看出，模型 (c) 对基态超精细分裂的计算结果优于模型（a）和（b）。然而， $|\Delta_{\rm exp} - \Delta_c| > \delta\Delta_c$。

对 ^{209}铋离子的计算结果为:

$$\xi_c = 0.104649(27), \quad \eta_c = 0.020142(10).$$

考虑到 $\Delta_0 = 2.14590(10)E^{-2}$，我们得到

$$\Delta_c = 0.185665(15)E^{-2},$$

使得

$$\tau_c = \frac{\Delta_{\rm exp} - \Delta_c}{\Delta_{\rm exp}} = 0.0064526.$$

比较表 XV 中的 τ_c 、 $\tau_a = 0.0014$ 和 $\tau_b = 0.0035$ 可知，对于 ^{209}铋，模型 (a) 对基态超精细分裂的计算结果略优于模型 (b) 和 (c)。

IX. 总结与结论

我们使用狄拉克方程，并采用三种不同的原子核电荷分布模型，计算了 H&HLI 的基态（$1s$）和第一激发态（$2s$）的有限核尺寸修正。对于模型 (a) [原子核表面上的核电荷], , 我们给出了狄拉克方程的解析解；对于模型 (b) [核电荷在原子核内均匀分布] 和模型 (c) [双参数费米模型 – TPFM], , 则采用数值计算和一阶微扰理论（后者不适用于较大的 Z 原子核）。对于轻核（即，低 Z 原子核） [33], 基态能量和第一激发态能量的有限核尺寸修正小于电子-原子核约化质量修正和相对论性 QED 辐射修正。尽管如此，获得准确的有限核尺寸修正仍然很重要，这样才能与氢 [18, 19] 和氘[69, 70]的极高精度实验结果进行良好比较。参考文献 [28] 报道了对氢 $1s$-$2s$ 跃迁的详细研究。对于重核，由于$m_e/M(Z, A)$较小，电子-原子核约化质量修正很小，因此有限核尺寸修正大于电子-原子核约化质量修正。此外，对于重核，$Z\alpha$ 不是一个小参数，因此需要考虑高阶相对论性 QED 辐射修正；这些修正在氢和轻核的情况下可以忽略。因此，由于尚未计算后者，目前还不清楚有限核尺寸修正是否比相对论性 QED 辐射修正更重要。

我们发现，对于氢原子和轻 HLI，使用模型 (a) 得到的有限核尺寸修正之差

和模型 (b) 得到的有限核尺寸修正之差 $\varepsilon_{n,a} - \varepsilon_{n,b}$ 很小；对于 $n = 1$（$1s$ 态）和 $n = 2$（$2s$ 态），模型 (a) 与模型 (b) 的能量差 ε_n 小于 $\varepsilon_{n,a}$ 和 $\varepsilon_{n,b}$ 中的不确定度 $\delta\varepsilon_{n,a}$ 和 $\delta\varepsilon_{n,b}$，见表III和表IV。因此，测量低 Z 原子核 [的 $1s$-$2s$ 跃迁频率，无法用于确定核电荷分布的细节；对于低 Z 原子核，方程 (69) 中的微扰理论表达式是很好的近似，该表达式不依赖于电荷分布的细节，而只取决于 r_N]。然而，对于重类氢离子，差值 $\varepsilon_{n,a} - \varepsilon_{n,b}$ 大于 $\varepsilon_{n,a}$ 和 $\varepsilon_{n,b}$ 中的不确定度 $\delta\varepsilon_{n,a}$ 和 $\delta\varepsilon_{n,b}$。因此，测量重核 HLI 的 $1s$-$2s$ 跃迁频率，不仅可以用于确定核电荷半径，还可以确定核电荷分布的细节。注意，QED辐射修正仅适用于 $Z\alpha \ll 1$。因此，将 QED 修正应用于重核存在问题。

氢和氘的 $1s$-$3s$ 跃迁频率实验结果也已有报道，参见例如参考文献 [65]。我们计划在未来的工作中计算这一跃迁频率，并与这些实验结果进行比较。

我们还采用模型 (a)、(b) 和 (c) 计算了 H&HLI 基态超精细分裂的有限核尺寸修正。计算点状原子核（模型 $\nu = 0$）的超精细分裂后，我们计算了由核电荷分布引起的修正 ξ_ν（其中 $\nu = a$、b、c），以及由磁矩分布引起的修正 η_ν。理论结果的百分比不确定度 τ_ν 与实验值 [进行了比较，见公式（124）]。$|\tau_a|$ 和 $|\tau_b|$ 均小于超精细分裂的修正 ξ_ν。对于 ^{1}氢原子和 ^{3}氦离子，$|\tau_\nu| < \eta_\nu$。对于 ^{2}氢、^{3}氢原子以及^{207}铅和 ^{209}铋 HLI，$|\tau_\nu| > \eta_\nu$。我们还采用模型 (c) 描述核电荷分布和磁矩分布，计算了 ^{207}铅和 ^{209}铋 HLI 的基态超精细分裂。对于 ^{207}铅 HLI，模型 (c) 对基态超精细分裂的计算结果略优于模型（a）和（b）。对于 ^{209}铋 HLI，模型 (a) 对基态超精细分裂的计算结果略优于模型 (b) 和 (c)。

我们表明，对于所有同位素（见表 XII 和表 XIII），$\xi_a > \eta_a$，也就是说，核电荷分布对基态超精细分裂的修正大于磁矩分布修正。另一方面，差值 $|\xi_a - \xi_b|$ 远大于 ξ_a 和 ξ_b中的不确定度 $\delta\xi_a$ 和 $\delta\xi_b$，而差值$|\eta_a - \eta_b|$ 远大于 η_a 和 η_b中的不确定度 $\delta\eta_a$ 和 $\delta\eta_b$。因此，要获得更接近实验超精细分裂的结果，检验更准确的核电荷分布和磁矩分布模型至关重要。只有建立准确的有限核尺寸修正，对量子电动力学辐射修正所投入的工作才能取得成果。鉴于对于所研究的所有原子核，有限核尺寸效应对超精细分裂的影响与量子电动力学辐射修正一样大或更大

如何才能获得更准确的核电荷分布和磁矩分布，从而改进有限核尺寸修正？有几种可行方法。（1）可以采用更复杂的电荷分布和磁矩分布模型。例如，可以采用三参数费米模型，它在 TPFM [24] 或双三参数费米模型[63] 中加入了一个额外的项（$1 + w_F\, r^2/c_F^2$）。（2）可以利用原子核电子散射的数据，对核电荷分布和磁矩分布进行直接数值拟合 [64]。（3）电荷分布和磁矩分布通常并不相同，参见附录 D，因此应通过实验分别确定这两种分布。

致谢：感谢 Shalom Shlomo 提供有益的通信交流。

附录A：核电荷半径

核电荷半径 $r_N = \sqrt{\langle r^2\rangle_N}$ 定义为均方根电荷半径，用于表征归一化电荷分布 ρ_N(r)，

$$\langle r^2\rangle_N = \int r^2 \rho_N(r) d^3\mathbf{r}, \tag{A1}$$

其中 ρ_N(r) 按照以下条件归一化

$$\int \rho_N(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 1.$$

现在我们应用方程 (A1)，计算模型（a）和（b）的核半径。

模型 (a)：当电荷均匀分布在半径为 r_a 的球体上时，归一化的质子分布 ρ_N(r) $\equiv \rho_a$(r) 为，

$$\rho_a(r) = \frac{Ze}{4\pi r_a^2}\,\delta(r - r_a), \tag{A2}$$

将方程 (A2) 代入方程 (A1)，得到

$$r_a = r_N. \tag{A3}$$

模型 (b)：当电荷均匀分布在半径为 r_b 的球体内时，归一化质子分布 ρ_N(r) $\equiv \rho_b$(r) 为，

$$\rho_b(r) = \frac{3Ze}{4\pi r_b^3}\,\Theta(r_b - r), \tag{A4}$$

其中，对于 $r < r_b$，$\Theta(r_b - r)$ 等于 1；对于 $r = r_b$，等于 $\frac{1}{2}$；对于 $r > r_b$，则等于 0。将方程 (A4) 代入方程 (A1)，得到$r_N = r_b\sqrt{3/5}$，或者

$$r_b = r_N\sqrt{\frac{5}{3}}. \tag{A5}$$

附录 B：$\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}$ 的矩阵元

矢量算符 $\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}$ 可写为：

$$\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha} \;=\; \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

其中，2×2 维矩阵 $\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\sigma}$ 定义为

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\sigma} \;=\; & \begin{pmatrix} \sin\theta\sin\phi & i\cos\theta \\ -i\cos\theta & -\sin\theta\sin\phi \end{pmatrix} \mathbf{e}_x + \\ & \begin{pmatrix} -\sin\theta\cos\phi & \cos\theta \\ \cos\theta & \sin\theta\cos\phi \end{pmatrix} \mathbf{e}_y + \\ & \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\phi} \\ ie^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{e}_z. \end{aligned}$$

方程 (100) 中波函数ψ_{m_J}(r)对应的 $\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}$ 矩阵元形式为，

$$\begin{aligned} & \int \psi^{\dagger}_{m_J}(\mathbf{r}) \left[\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\alpha}\right] \psi_{m'_J}(\mathbf{r}) \sin\theta d\theta d\phi \times \\ & = g(r)f(r) \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \times \\ & \quad \left\{ i\, \Omega^{\dagger}_{\frac{1}{2}0m_J} \left[\mathbf{e}_r \times \boldsymbol{\sigma}\right] \Omega_{\frac{1}{2}1m'_J} + \text{c.c.} \right\} \\ & = -\frac{8}{3}\, g(r)f(r)\, \mathbf{J}_{m_J,m'_J}, \end{aligned} \tag{B1}$$

其中，$\mathbf{J}_{m_J,m'_J}$ 是轨道角动量算符 J 的矩阵元。

附录 C：利用方程 (58) 确定 s态能量的迭代法

现在我们以 ^{3}He 离子的情形为例，具体说明迭代法。模型 (a) 下 ^{3}He 离子的基态能量为 $\varepsilon_1^{(0)} = 1.47460 \times 10^{-8}\epsilon_H$ （见表 III），其中 $\varepsilon_1^{(0)}$ 是方程 (21) 中给出的、具有点状原子核的 He 离子的基态能量。模型 (b) 下的能量与模型 (a) 下的能量相近，见下文表 VIII。因此，我们将 $\mathcal{E}_1 = \varepsilon_1^{(0)} - 4 \times 10^{-8}\epsilon_H$ 作为能量的第一次迭代。对 $\mathcal{E}$数值求解方程 (54)，得到g_b,–(r) f_b,–(r)，对应于 $r < r_{b\circ}$ 将 g_b,–(r_b)f_b,–(r_b)，以及 $g_+(r_b)$ $f_+(r_b)$（其中 $\mathcal{E}_1$ [见方程 (36)] ）代入方程 (58)，得到 $\mathfrak{D}_1 \equiv \mathfrak{D}(\mathcal{E}_1) = -5.16387 \times 10^{-5}$。第二次迭代为 $\mathcal{E}_2 = \varepsilon_1^{(0)} - 1.4 \times 10^{-8}\epsilon_{H\circ}$ 对 $\mathcal{E}_2$数值求解方程 (54)，得到 g_b,–(r)f_b,–(r)，对应于 $r < r_{b\circ}$ 将 g_b,–(r_b) f_b,–(r_b)，以及 $g_+(r_b)$ $f_+(r_b)$（其中 $\mathcal{E}_2$[见方程 (36)] ）代入方程 (58)，得到 $\mathfrak{D}_2 \equiv \mathfrak{D}(\mathcal{E}_2)$ =1.52535 $\times 10^{-6}$。为求得基态能量 ε的第三次迭代，我们绘制 $\mathfrak{D}(\varepsilon)$ 随 ε变化的图，并标出两个点 ($\mathcal{E}_1$,$\mathfrak{D}_1$) 和 ($\mathcal{E}_2$,$\mathfrak{D}_2$)。随后用一条直线连接这两点，并求出这条直线与 $\mathcal{E}_3$ 轴的交点，

$$\mathcal{E}_3 = \frac{\mathcal{E}_1\mathfrak{D}_2 - \mathcal{E}_2\mathfrak{D}_1}{\mathfrak{D}_2 - \mathfrak{D}_1} = \varepsilon_1^{(0)} - 1.474597673 \times 10^{-8}\,\epsilon_H.$$

对 $\mathcal{E}_3$数值求解方程 (54)，得到g_b,–(r)f_b,–(r)，其中 $r < r_{b\circ}$ 将 g_b,–(r_b)f_b,–(r_b) 和 $g_+(r_b)$ $f_+(r_b)$（ $\mathcal{E}_3$ [见方程 (36)] ）代入方程 (58)，得到 $\mathfrak{D}_3 \equiv \mathfrak{D}(\mathcal{E}_3) = 4.59235 \times 10^{-13}$。能量的第四次迭代由下式求得，

$$\mathcal{E}_4 = \frac{\mathcal{E}_2\mathfrak{D}_3 - \mathcal{E}_3\mathfrak{D}_2}{\mathfrak{D}_3 - \mathfrak{D}_2} = \varepsilon_1^{(0)} - 1.474597699 \times 10^{-8}\,\epsilon_H,$$

使得 $\mathcal{E}_3 - \mathcal{E}_4 = 2.6 \times 10^{-16}\epsilon_{H\circ}$ 对 $\mathcal{E}_4$数值求解方程 (54)，得到 g_b, –(r)f_b, –(r)，其中 $r < r_{b\circ}$ 将 g_b, –(r_b)f_b, –(r_b)，以及 $g_+(r_b)$ $f_+(r_b)$和 $\mathcal{E}_4$[方程 (36) 中的内容] 代入方程 (58)，得 $\mathfrak{D}_4 \equiv \mathfrak{D}(\mathcal{E}_4)$ =−9.41473 $\times 10^{-13}$。由于 $\mathcal{E}_3 - \mathcal{E}_4$ 和 $\mathfrak{D}_4$ 都非常小，$\mathcal{E}_4$ 实际上等于氦的基态能量。

附录 D：特殊原子核的核磁矩分布

本附录讨论闭合核壳层之外有一个核子的原子核的磁矩分布。

1. 核壳层模型

根据核壳层模型 [59, 60], ，原子核中的每个核子都在其他核子产生的自洽场中运动。核自洽势在原子核表面所围成的体积之外迅速减小。通过指定各个核子的状态来描述原子核的量子态。自洽场具有球对称性，其对称中心就是原子核的质心。因此，各个核子的量子态由径向量子数n_r、角动量量子数 L、轨道角动量 $J = L \pm 1/2$以及矢量 J = L +S 的投影 M_J 来表征。核子按照泡利原理填充壳层，使核子态分布于表 XVI [59, 60]所示的各组中。每组都列出了质子或中子的总占据数。因此，当质子数 Z 或中子数 N 等于以下任一数值时，该组即被填满：2、8、28、50、82、126、..... 这些数称为幻数[60]。Z 和 N 均为幻数的原子核称为双幻核，其核自旋为 $I = 0$。

一个核子在由所有其他核子形成的有效吸引势$V^{(j)}_{\text{nucl}}$(r)中运动。势$V^{(j)}_{\text{nucl}}$(r)由 [59] 给出

$$V^{(j)}_{\text{nucl}}(r) = -\frac{V_j}{e^{(r-R_0)/a_F}+1} + U_{\text{rep}}(r)\delta_{j,p}, \tag{D1}$$

shells	nucleons
$1s_{1/2}$	2
$1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$	6
$1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$, $1d_{3/2}$, $1f_{7/2}$	20
$2p_{3/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$	22
$2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $1h_{11/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$	32
$1h_{9/2}$, $2f_{7/2}$, $2i_{13/2}$, $2f_{5/2}$, $3p_{3/2}$, $3p_{1/2}$	44

表XVI. 壳层组及完成每组的核子数。这里，字母前的量子数 n_r 是径向量子数，而字母 s、 p、 d 、 h 、 i 、 f、 g、.....表示角动量量子数， $L_j = 0$、1、2、3、4、5、6、.....；其中 $j = p$、 n 分别对应质子和中子，字母的下标表示核子的总轨道角动量， $J_j = L_j \pm 1/2$。

其中，方程 (D1) 右边的第一项是伍兹-萨克森吸引势，第二项 $U_{\rm rep}(r)$ 是质子与原子核中其他 $Z-1$ 个质子之间的静电排斥相互作用。克罗内克δ表示库仑相互作用仅存在于质子之间，而不存在于中子之间。这里 $R_0 = 1.25\,A^{1/3}$， V_j 是质子（$j = p$）和中子（$j = n$）的势阱深度。注意， $R_0 > c_F$，其中 c_F 是双参数费米核电荷分布中的半密度核半径，见方程 (80)；差值 $R_0 - c_F$ 则是由核力的有限作用范围导致的。势阱深度 V_j 为

$$V_j \;=\; U_0 + \eta_j U_1 \,\frac{N-Z}{A}, \tag{D2}$$

其中 $U_0 = 57$ MeV， $U_1 = 27$ MeV， Z 是原子核中的质子数， N 是原子核中的中子数， $A = Z + N$ 是原子核中的核子总数。方程 (D2) 右侧第二项是当 $Z \neq N$ 时产生的对称能，其中 $\eta_p = 1$ 和 $\eta_n = -1$ [59]。方程 (D1) 右侧第二项 $U_{\rm rep}(r)$ 是一个质子与原子核中其他 $Z-1$ 个质子之间的静电斥力。对于电荷分布的模型 (b)， $U_{\rm rep}(r)$ 为

$$U_{\rm rep}(r) = \begin{cases} \dfrac{(Z-1)e^2}{2r_b}\left(3 - \dfrac{r^2}{r_b^2}\right), & \text{for } \; r \le r_b, \\[2ex] \dfrac{(Z-1)e^2}{r}, & \text{for } \; r > r_b. \end{cases}$$

此外，自洽势中的核子还存在自旋轨道相互作用。该相互作用弱于强相互作用，因此可以用微扰理论加以考虑。

壳层中径向量子数为 n_r、角动量量子数为 L_j 、角动量 $\mathbf{L}j$ 在 z 轴上的投影为 M_L 的核子波函数 $\Psi_{n_r,\ L_j,\ M_L}(\mathbf{r})$ 可由薛定谔方程求得，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_j}\,\nabla^2 + V^{(j)}_{\rm nucl}(r)\right]\Psi_{n_r,L_j,M_L}(\mathbf{r}) = \epsilon\Psi_{n_r,L_j,M_L}(\mathbf{r}), \tag{D3}$$

其中 M_j 为核子质量。$\Psi_{n_r,\ L_j,\ M_L}(\mathbf{r})$ 可写为，

$$\Psi_{n_r,L_j,M_L}(\mathbf{r}) = \psi_{n_r,L_j}(r)Y_{L_j,M_L}(\theta,\phi),$$

其中，$\psi_{n_r,\ L_j}(r)$ 是径向波函数，而$Y_{L_j,\ M_L}(\theta,\phi)$ 是球谐函数。$\psi_{n_r,\ L_j}(r)$ 由下列方程求得，

$$-\frac{\hbar^2}{2M_j r^2}\,\frac{d}{dr}\left(r^2\,\frac{d\psi_{n_r,L}(r)}{dr}\right) + \frac{\hbar^2 L_j(L_j+1)}{2M_j r^2}\,\psi_{n_r,L}(r) + V^{(j)}_{\rm nucl}(r)\psi_{n_r,L_j}(r) = \epsilon\psi_{n_r,L_j}(r), \tag{D4}$$

其中，势 $V^{(j)}{}_{\rm nucl}(r)$ 由方程（D1）给出。

现在，我们将应用壳模型来描述 ^{207}铅和 ^{209}铋同位素的核磁矩分布。对于 ^{207}铅， $R_0 = 7.394$fm、 $c_F = 6.591$ fm，差值为 $R_0 - c_F = 0.803$ fm。对于 ^{209}铋，$R_0 = 7.418$fm、 $c_F = 6.765$ fm，差值为 $R_0 - c_F = 0.653$ fm。

2. ^{207}铅同位素核密度

^{207}Pb原子核由 $Z = 82$ 个质子和$N = 125$个中子组成。图11(a)(a)展示了核子填充核壳层的情况：质子数是一个幻数，即质子填满了低能壳层，形成单重态。中子数比幻数126少1。中子填满了最低的5个壳层，外层壳中则有43个中子，尚未填满。我们将外层壳视为一个闭壳层，其中有1个空穴，并推导该空穴的波函数。核自旋 I 等于空穴的轨道角动量。 ^{207}Pb原子核的核自旋为 $I = 1/2$。该空穴处于 $3p_{1/2}$ 轨道，其径向量子数为 $n_r = 3$，角动量量子数为 $L = 1$，轨道角动量量子数为 $I = 1/2$。

径向量子数为 $n_r = 3$、角动量量子数为$L = 1$ 且 L 在 z 轴上的投影为 M_L 的空穴波函数 $\Psi_{3,\ 1,\ M_L}(\mathbf{r})$ 可写为：

$$\Psi_{n_r,L,M_L}(\mathbf{r}) = \psi_{n_r,L}(r)Y_{L,M_L}(\theta,\phi),$$

其中，$\psi_{n_r,\ L}(r)$ 是径向波函数，$Y_{L,\ M_L}(\theta,\phi)$ 是球谐函数。$\psi_{n_r,\ L}(r)$ 可由下式求得：

$$-\frac{\hbar^2}{2M_n r^2}\,\frac{d}{dr}\left(r^2\,\frac{d\psi_{n_r,L}(r)}{dr}\right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2M_n r^2}\,\psi_{n_r,L}(r) + V^{(n)}_{\rm nucl}(r)\psi_{n_r,L}(r) = \epsilon\psi_{n_r,L}(r), \tag{D5}$$

其中 M_n 是中子质量，势 $V^{(n)}{}_{\rm 核}(r)$ 由方程 (D1) 给出，其中 $j = n$。我们使用 Mathematica 命令 NDEigensystem 求解方程 (D4)，并得到

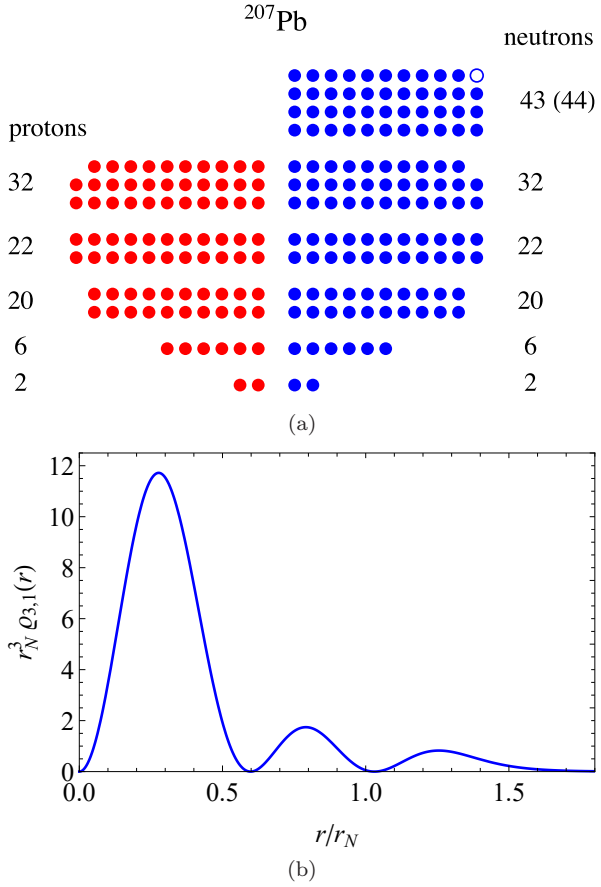


图11。 (a) ^{207}Pb原子核中的质子（红色）和中子（蓝色）填充核壳层。闭合壳层由 2, 6, 20, 22, 32 44 $Z = 82$ 和 核子组成。质子数为一个幻数，而中子数 $N = 125$ 比幻数126少1。空心圆表示外层壳中的空位（空穴）。核自旋 $I = 1/2$ 是 $3p_{1/2}$ 壳层中空穴的轨道角动量。(b) ^{207}Pb同位素的核磁矩密度。

径向波函数 $\psi_{n_r,\ 1}(r)$，以及 $1p$、$2p$和 $3p$ 态的能量。

磁矩密度 $\varrho_m(r)$为

$$\varrho_m(r) = \left|\psi_{3,1}(r)\right|^2. \qquad \text{(D6)}$$

方程（D6）中的磁矩密度 $\varrho_m(r)$绘于图11(b)中。$\varrho_m(r)$有三个节点，分别位于 $r = 0$、$0.59821\,r_N$和 $1.03036\,r_N$；还有三个极大值：ϱ_m 有一个极大值 $11.7192\,r_N^{-3}$ $r_1 = 0.277111\,r_N$ ϱ_m $r_2 = 1.74229\,r_N^{-3}$ ( )位于，（ ）位于 $r_2 = 0.79112\,r_N$，以及 $\varrho_m(r_3) = 0.824837\,r_N^{-3}$ 位于 $r_3 = 1.25533 r_N$。注意，$\varrho(r)$中的最高峰位置r_1 远低于 r_N。

3. ^{209}铋同位素核密度

^{209}铋原子核由 $Z = 83$ 个质子和$N = 126$ 个中子组成。核子填充核壳层的情况如图 12 所示。中子的数量是一个幻数，即中子填满最低的 6 组壳层并形成单重态，见表XVI。质子的数量比幻数 82 多 1。最低的 5 组壳层由质子填满，外层壳则由 1 个质子部分填充。 ^{209}铋的核自旋 $I = 9/2$等于 $J_p = 9/2$径向量子数为 $n_r = 1$、角动量量子数为 $L_p = 5$的$1h_{9/2}$ 壳层上质子的总轨道角动量。

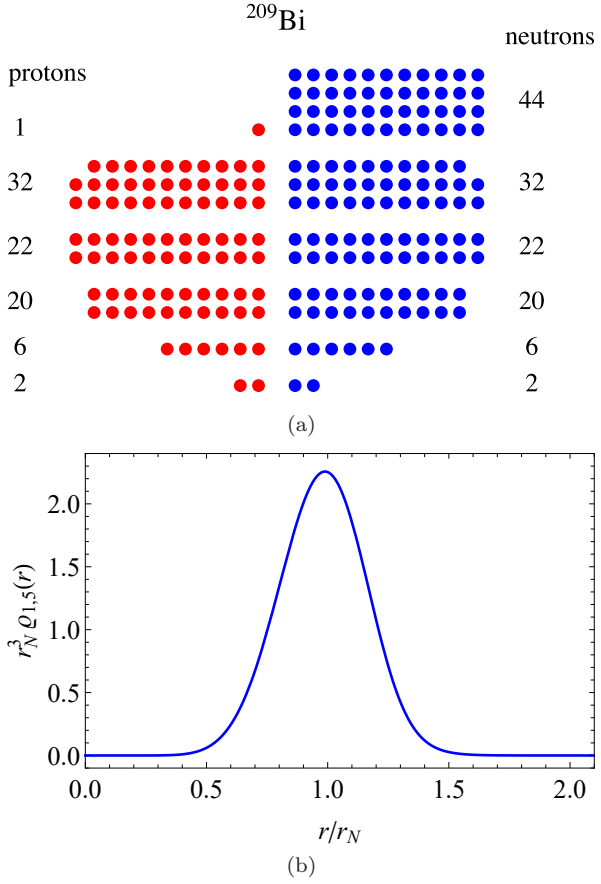


图 12. (a) ^{209}Bi 原子核中的质子（红色）和中子（蓝色）填充核壳层。闭合壳层由 2, 6, 20, 22, 32, 44 $Z = 83$ 个核子组成。质子数比幻数多一个，而中子数 $N = 126$ 是一个幻数。核自旋 $I = 9/2$ 等于占据最外层 $1h_{9/2}$ 壳层的质子的轨道角动量。(b) ^{209}Bi 同位素的核磁矩密度。

使用 Mathematica 命令 NDEigensystem，我们对方程 (D4) 进行数值求解，以求得 $\psi_{1,\ 5}(r)$ 波函数以及 $1h$ 壳层上质子的本征能量。

^{209}Bi 原子核的磁矩密度 $\varrho_m(r)$ 为

$$\varrho_m(r) = \left|\psi_{1,5}(r)\right|^2. \qquad \text{(D7)}$$

方程 (D7) 中的磁矩密度 $\varrho_m(r)$ 绘于图 12(b) 中。 $\varrho_m(r)$ 在 $r = 0$ 处有一个节点，随 r 增大而增加，达到最大值 $\varrho_m(r_1) = 2.56639\,r_N^{-3}$ 在 $r_1 = 0.988875\,r_N$，当 $r > r_1$ 增大时减小，并趋于零，如

$r \to \infty$。峰的半高半宽为 $\Delta R_0 = 0.211582\, r_N$，即 $\Delta R_0 \ll r_N$。

[1] H. A. Bethe 和 E. E. Salpeter，*Quantum Mechanics of One- And Two-Electron Atoms*，（Springer Verlag，柏林，1957）。[2] A. I. Akhiezer，V. B. Berestetskii，*Quantum electrodynamics* 1965，（John Wiley，纽约，）。[3] J. J. Sakurai，*Qdvanced Quantum Mechanics*，（Addison-Wesley，雷丁，马萨诸塞州，1967）。[4] V. B. Berestetskii，L. P. Pitaevskii，E. M. Lifshitz，*Quantum Electrodynamics: Volume 4 (Course of Theoretical Physics)* 2 1982，第版，（Butterworth-Heinemann，）。[5] J. Mawhin 和 A. Ronveaux，“氢原子的薛定谔方程和狄拉克方程及拉盖尔多项式”，《精确科学史档案》64，429（2010）。[6] L. Essen，M. J. Donaldson，M. J. Bangham 和 E. G. Hope，《自然》229，110（1971）。[7] A. Dupays，A. Beswick，B. Lepetit，C. Rizzo，D. Bakalov，《物理评论A》68，052503（2003）。[8] S. Kanda 等，《物理学杂志：会议系列》1138，012009（2018）。[9] 1玻尔 $\equiv \frac{\hbar^2}{me^2} = 5.2917721 \times 10^{-11}$ m $\equiv a_0$，此量称为玻尔半径。[10] E. Tiesinga，P. J. Mohr，D. B. Newell，B. N. Taylor，《现代物理评论》93，025010（2021）。这是质子均方根电荷半径的 2018 CODATA 值。[11] P. J. Mohr 和 B. N. Taylor，《现代物理评论》77，1（2005）。[12] P. Beiersdorfer，S. B. Utter，K. L. Wong，J. R. C. Lopez-Urrutia，J. A. Britten，H. Chen，C. L. Harris，R. S. Thoe，D. B. Thorn，E. Trabert，M. G. H. Gustavsson，C. Forssen 和 A.-M. Martensson-Pendrill，《物理评论A》64，032506（2001）。[13] A. Bohr 和 V. F. Weisskopf，《物理评论》77，94（1950）。[14] F. F. Karpeshin，M. B. Trzhaskovskaya，《核物理A》941，66（2015）。[15] A. Adamu，M. Hassan，M. K. Dikwa，S. A. Amshi，《美国量子化学与分子光谱学杂志》2，39（2018）。[16] A.-M. Martensson-Pendrill 和 M. G. H. Gustavsson，“原子核”，载于《分子物理学与量子化学手册》第1卷，第477–484页（John Wiley & Sons, Ltd，奇切斯特，2003）。[17] R. T. Deck，J. G. Amar 和 G. Fralick，《物理学杂志B》38，2173（2005）[18] C. G. Parthey *et al*，《物理评论快报》107，203001（2011）。[19] A. Matveev *et al*，《物理评论快报》110，230801（2013）。[20] A. V. Volotka，D. A. Glazov，G. Plunien 和 V. M. Shabaev，《物理年鉴》525，636（2013）。[21] V. M. Shabaev，《物理学杂志B》26，1103（1993）。[22] V. M. Shabaev，M. Tomaselli，T. K¨uhl，A. N. Artemyev 和 V. A. Yerokhin，《物理评论A》56，252（1997）。[23] I. A. Valuev，Z. Harman，C. H. Keitel 和 N. S. Oreshkina，“Skyrme型核相互作用：用于计算原子能级和束缚电子g因子的有限核尺寸修正”，《物理评论A》101，062502（2020）。[24] H. De Vries，C. W. De Jager，C. De Vries，《原子数据与核数据表》36，495536（1987）。[25] P. Sunnergren，H. Persson，S. Salomonson，S. M. Schneider，I. Lindgren 和 G. Soff，“辐射修正对类氢系统的超精细结构分裂”，Phys. Rev. 58, 1105 (1998) [26] A. V. Volotka，《氢中的超精细结构及多电荷离子跃迁率的高精度量子电动力学计算》，博士论文，德累斯顿工业大学，德累斯顿，2006年。[27] I. Angeli 和 K. P. Marinova，《原子数据与核数据表》99, 69 (2013)。[28] I. Kuzmenko、T. Kuzmenko、Y. Avishai、Y. B. Band，“氢 $1s$-$2s$ 跃迁频率：实验与理论的比较”，Phys. Rev. Lett.（已投稿），arXiv:2211.05411。[29] V. B. Berestetskii、L. P. Pitaevskii、E. M. Lifshitz，*Relativistic quantum theory: Volume 4 part 1 (Course of Theoretical Physics)* 2，第版，(Butterworth-Heinemann，1971)。*Ibid.* 4，第110–115页。[30] K. Pachucki、D. Leibfried、M. Weitz、A. Huber、W. K¨onig 和 T. W. H¨ansch，J. Phys. B 29, 177 (1996)。[31] N. Guang-Jiong、X. Jian-Jun、L. Sen-Yue，Chin. Phys. B 20, 020302 (2011)。[32] W. Greiner，*Relativistic Quantum Mechanics*，第3版，第250页，Springer，法兰克福，2000年。[33] M. I. Eides、H. Grotch 和 V. A. Shelyuto，《轻氢类束缚态》，(Springer-Verlag，柏林、海德堡，2007年)。[34] https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Info/Constants/definitions.html。简言之，如果测量结果为 $y = 1234.56789$ U，其不确定度为$u(y) = 0.00011$ U，其中 U 是 y 的单位，那么 $Y = (1234.56789 \pm 0.00011)$ U。该表达式的简写形式，也是常用形式，是$Y = 1234.56789(11)$ U，其中括号中的数字表示不确定度的数值，其对应于所报告结果的末几位数字。[35] *Ibid.* 4，第73–76页。[36] P. J. Mohr、B. N. Taylor、D. B. Newell，Rev. Mod. Phys. 80, 633 (2008)。[37] T. J. H¨ansch *et al.*，Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A 363, 2155 (2005)；T. W. H¨ansch 和 H. Walther，Rev. Mod. Phys. 71, S242 (1999)。[38] T. Manovitz、R. Shaniv、Y. Shapira、R. Ozeri、N. Aker-man，Phys. Rev. Lett. 123, 203001 (2019)。[39] https://en.wikipedia.org/wiki/Confluent_hypergeometric_function [40] 方程（36）和（45）中的波函数无量纲且未归一化。归一化波函数还带有一个额外因子 $\mathcal{N}$，由公式（47）给出。$\mathcal{N}_n$ 的量纲为 $[\mathcal{N}_n] =$cm$^{-3/2}$。[41] T. Hannensson 和 S. M. Blinder，Int. J. Quant. Chem. 15, 7 (1979)。[42] Y. B. Band 和 Y. Avishai，*Quantum Mechanics with Applications to Nanotechnology and Quantum Information Science* 2013 4 6，(Academic Press – Elsevier，)，第. .节。[43] T. Hannesson 和 S. M. Blinder，Int. J. Quantum Chem. 15, 7 (1979)。[44] S. M. Blinder，Theoret. Chim. Acta (Bed.) 53, 159

(1979)。[45] H. Hellwig、R. F. C. Vessot、M. V. Levine *et al.*，IEEE Trans. Instrum. Meas. IM-19, 200 (1970)；L. Essen、M. J. Donaldson、M. J. Bangham 和 E. G. Hope，《自然》(伦敦) 229, 110 (1971)。[46] “核同位素数据库”，https://easyspin.org/documentation/isotopetable. html。[47] *Handbook of Mathematical Functions*，M. Abramowitz 和 I.A. Stegun 编（美国国家标准局，华盛顿哥伦比亚特区，1964年）。[48] S. G. Karshenboim，Can. J. Phys. 78, 639 (2000)。[49] D. J. Wineland 和 N. F. Ramsey，Phys. Rev. 5, 821 (1972)。[50] B. S. Mathur *et al.*，Phys. Rev. 158, 14 (1967)。[51] H. A. Schluessler *et al.*，Phys. Rev. 187, 5 (1969)。[52] S. G. Karshenboim 和 V. G. Ivanov，Phys.Rev. D 65, 023510 2002( )。[53] T. St¨ohlker，“重离子原子物理精密实验”，http://pyweb.swan.ac.uk/quamp/quampweb/talks/13_09_11 2013 - QuAMO -ThomasStoehlker.pdf。[54] J. Ullmann、Z. Andelkovic、C. Brandau 等，《自然·通讯》8, 15484 (2017)。[55] F. Biraben，Eur. Phys. J. Special Topics 172, 109–119 (2009)。[56] E. Arimondo、M. Inguscio 和 P. Violino。Rev. Mod. Phys., 49, 31（1977）。[57] P. Seelig、S. Borneis、A. Dax、T. Engel、S. Faber、M. Gerlach、C. Holbrow、G. Huber、T. K¨uhl、D. Marx、K. Meier、P. Merz、W. Quint、F. Schmitt、M. Tomaselli、L. V¨olker、H. Winter、M. W¨urtz、K. Beckert、B. Franzke、F. Nolden、H. Reich、M. Steck 和 T. Winkler，《物理评论快报》81，4824（1998）。[58] P. Raghavan，ADNDT 42，189（1989）。[59] “原子核壳层模型”。HyperPhysics。http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/ Nuclear/shell.html[60] L. D. Landau 和 E. M. Lifshitz，《量子力学：非相对论理论》：《理论物理学教程》第3卷。 [佩加蒙出版社有限公司。 1965], 第447–456页。[61] https://en.wikipedia.org/wiki/Isotopes_of_铅[62] https://en.wikipedia.org/wiki/Isotopes_of_铋[63] A. R. Abdulghany，《中国物理C》42，074101（2018）。[64] H. ¨Uberall， *Electron Scattering from Complex Nuclei*，（学术出版社，纽约，1971）。[65] A. Grinin， *et al*，《科学》370，6520（2020）。[66] R. Pohl *et al*，《自然》466，213?216（2010）。[67] A. Antognini *et al*，《科学》339，417?420（2013）。[68] A. Beyer， *et al*，《科学》358，79（2017）。[69] K. Pachucki、M. Weitz 和 T. W. H¨ansch，《物理评论A》49，2255（1994）。[70] U. D. Jentschura， *et al*，《物理评论A》83，042505（2011）。