arXiv:2304.07164v1 [physics.atom-ph] 14 Apr 2023

基于 HfF^+ 实验更新对 $\mathcal{T}$,$\mathcal{P}$破坏的类轴子粒子介导电子-电子和电子-原子核相互作用的约束

Sergey D. Prosnyak[1,2], Daniel E. Maison[1] 和 Leonid V. Skripnikov[1], 2*[1]国家研究中心"库尔恰托夫研究所"下属以 *B.P. Konstantinov* 命名的彼得堡核物理研究所（国家研究中心"库尔恰托夫研究所"-*PNPI*），俄罗斯列宁格勒州加特契纳 *Orlova roscha* 微区 *1* 号，邮编 *188300*；以及 [2] 圣彼得堡国立大学，俄罗斯圣彼得堡 *Universitetskaya Naberezhnaya 7/9* 号，邮编 *199034*（日期：2023年4月14日）

近期，利用 JILA 的 HfF$\mathcal{T}$阳离子实验，静态时间反演（$\mathcal{T}$）和空间宇称（$\mathcal{P}$）破坏的电子电偶极矩（eEDM）以及表征$\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$破坏的标量-赝标量核-电子相互作用强度的无量纲常数上限得到了更新[+] 阳离子 [T.S. Roussy 等，arxiv:2212.11841（2022年）]。我们考虑了 HfF $\mathcal{T}$中$\mathcal{P}$ 破坏的另外两个来源[+] ——类轴子粒子介导的标量-赝标量电子-电子和核-电子相互作用。为估算这类相互作用在 HfF^+ 中引起的效应大小，我们开发并应用了一种方法，直接采用从头算相对论耦合簇理论计算表征这些相互作用的分子参数。利用这些参数，我们证明，对于广泛的类轴子粒子质量范围，均可根据 HfF $\mathcal{T}$中$\mathcal{P}$破坏效应的实验数据，推导出类轴子粒子介导电子-电子和核-电子相互作用的实验室约束，并将其提高一个数量级。[+]

I. 引言

旨在搜索基本相互作用中时间反演（$\mathcal{T}$）和空间宇称（$\mathcal{P}$）对称性破缺效应的顺磁性重原子分子实验，被认为对标准模型（SM）[1, 2]之外的新物理极为敏感。最受关注的 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$破缺来源之一是永久电子电偶极矩（电子电偶极矩或 d_e）。事实上，电子电偶极矩应沿其自旋 s 的方向：$\mathbf{d}_e = d_e \mathbf{s}/s$ [1–3]。这种电偶极矩与外电场 E 的相互作用为$H = -\mathbf{d}_e \cdot \mathbf{E} \propto d_e \mathbf{s} \cdot \mathbf{E}$。自旋 s 是 $\mathcal{T}$奇的，而 E 是 $\mathcal{T}$偶的。因此，H 是 $\mathcal{T}$奇的。同时，s 是 $\mathcal{P}$偶的，而 E 是 $\mathcal{P}$奇的。因此，H 同时具有 $\mathcal{T}$和 $\mathcal{P}$奇性。标准模型扩展理论中电子电偶极矩的预期值，比标准模型中的估计值高出许多个数量级[4–9]。近期，JILA 研究组利用旋转电场俘获的一氟化铪分子阳离子 $^{180}Hf^{19}F^+$，得出了电子电偶极矩更新后的上限：$|d_e| < 4.1 \times 10^{-30}\ e \cdot \mathrm{cm}$（90% 置信度） [10]。该实验在 HfF^+的第一激发亚稳电子态 $^3\Delta_1$ 上进行。处于这类态的分子具有能级十分接近、宇称相反的态，即所谓的Ω双重态能级结构。因此，这些分子中的 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$奇效应会显著增强[11, 12] 。此外，使用 $^3\Delta_1$ 电子态可以抑制系统误差 [13–16]。使用 HfF^+ 得到的电子电偶极矩约束，比此前利用一氧化钍分子束[17]得到的最严格约束改善了 2.4 倍。搜索电子电偶极矩的实验还对违反 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$ 对称性的标量-赝标量核-电子相互作用 [1, 18–21]。事实上，同一项 HfF^+ [10] 实验还更新了表征这种相互作用强度的无量纲常数的约束。目前，其他分子体系中利用电子电偶极矩开展搜索的多项实验正在筹备中。其中包括 ThF^+[22]、YbOH [23, 24], BaF [25], YbF [26],$LuOH^+$ [27] 等。

搜索对称性破坏效应，对于理解《自然》的基本定律至关重要，因为标准模型中仍有若干现象尚未得到解释。大约六十年前，人们发现了联合 $\mathcal{CP}$ 对称性（$\mathcal{C}$ 是电荷共轭）的破缺，这一发现来自K介子衰变[28]。这表明弱相互作用不守恒 $\mathcal{CP}$。然而，迄今尚不清楚为何 $\mathcal{CP}$ 对称性似乎在标准模型的量子色动力学（QCD）部分中得以守恒。原则上，这种守恒并无必然理由，因为QCD的拉格朗日量中存在可破坏 $\mathcal{CP}$对称性的自然项。一般而言，这种机制会导致中子电偶极矩的数值比当前限值[29]大约 10^8 倍。因此，这个"精细调节"问题被称为强 $\mathcal{CP}$ 问题。请注意，根据 $\mathcal{CPT}$ 定理，$\mathcal{CP}$ 破缺会导致 $\mathcal{T}$对称性破缺。$\mathcal{CP}$不守恒是我们宇宙中重子不对称性的必要条件之一，即物质与反物质数量不平衡 [1, 30, 31]。然而，标准模型中 $\mathcal{CP}$ 对称性破缺的程度非常微弱，不足以解释这种不平衡。另一个尚未解决的问题是暗物质的本质未知，而暗物质约占宇宙的25%。人们正通过大量努力搜索暗物质粒子 [32–37]。其中，赝标量自旋零轴子或类轴子粒子（ALP）是非常热门的候选者[38–40]。轴子 [41, 42] 被视为一种准南部-戈德斯通

* http ://www.qchem.pnpi.spb.ru; skripnikov_lv@pnpi.nr cki.ru

玻色子，因为佩奇-奎因对称性发生自发破缺 $U_{\rm PQ}(1)$ [43]。这种对称性破缺被视为解决QCD中强 $\mathcal{CP}$问题的一种方案 [44]。因此，搜索轴子对现代物理学至关重要。

轴子和类轴子粒子与标准模型中其他粒子的相互作用可以保持 $\mathcal{CP}$对称性，也可以破坏 $\mathcal{CP}$对称性。本文关注破坏 $\mathcal{CP}$对称性的电子和核子相互作用。由于这类研究十分重要，众多天体物理和实验室实验及研究计划都致力于搜索类轴子粒子并研究其性质。过去十年间，这些研究工作发展迅速。轴子和类轴子粒子性质的现状及相关限制可参见文献 [44–62]。

根据文献 [63, 64], ，宇宙类轴子粒子与费米子的相互作用可以诱发振荡的 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$破坏性分子和原子电偶极矩，人们可以尝试观测这一效应。振荡频率由类轴子粒子质量决定。振荡幅度与类轴子粒子密度的平方根成正比 [63, 64]。假设暗物质主要由类轴子粒子构成，即可估算这一密度。之后，有人提出采用固态核磁共振技术搜索振荡电偶极矩[65]。近期，此类实验的结果已发表 [57] ，并以振荡核希夫矩的形式表述 [57, 66] 。后者被解释为轴子与胶子场耦合常数 [57]。此外，通过将此前关于 HfF^+ 分子阳离子的实验数据分析为振荡偶极矩[56]，也得出了对类轴子粒子-胶子耦合常数的严格限制。

在文献 [67] 中，研究了电子与电子之间以及电子与原子核之间虚类轴子粒子交换的效应。这些效应可诱发违反静态永久 $\mathcal{T}$,$\mathcal{P}$ 对称性的原子和分子电偶极矩。文献 [67] 进行了各种原子的相应计算，并对一些分子进行了基于原子的估算。文献 [68–70] 从理论上研究了类轴子粒子交换对 Fr原子和 YbOH 分子的影响。对于后一种情况，在电子—电子类轴子粒子介导相互作用方面，我们仅考虑了轻类轴子粒子的限值。本文旨在将近期关于 HfF^+ [10] 分子静态 $\mathcal{T}$,$\mathcal{P}$ 对称性破缺电偶极矩的实验数据，解释为电子之间以及电子与原子核之间虚类轴子粒子交换的结果。为此，我们开发了一种方法，可直接计算此类效应在分子中的贡献，适用于极宽的类轴子粒子质量范围，包括极轻和极重类轴子粒子的极限情况。

II. 理论

轴子与其他粒子之间可能存在多种耦合。我们来考察类轴子粒子与费米子相互作用的拉格朗日量，它可以写成如下[71]:

$$\mathcal{L}_{\rm int} = a\sum_{\psi}\bar{\psi}\left(g^s_{\psi} + ig^p_{\psi}\gamma_5\right)\psi\ . \tag{1}$$

在此表达式中， a 和 ψ 分别表示轴子场和费米子场； $\bar{\psi}=\psi^+\gamma_0$； g^s_{ψ} (g^p_{ψ})分别表示轴子与费米子之间的标量（赝标量）耦合常数； γ_0以及 γ_5 表示狄拉克矩阵，其定义见文献 [72]。拉格朗日量（1）中的求和遍及系统中的所有类型的费米子。相应的 $\mathcal{T}$，$\mathcal{P}$破坏相互作用，即由质量为 m_a 的轴子介导的两个电子之间的相互作用，可由如下形式的类 Yukawa 两电子相互作用描述[67, 71]:

$$V_{ee}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = +i\frac{g^s_e g^p_e}{4\pi}\frac{e^{-m_a|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\gamma_0\gamma_5\ , \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 是电子的位置， γ_0 和 γ_5 是指第二个电子的矩阵， g^s_e （g^p_e）是电子—轴子相互作用的标量（赝标量）耦合常数。在 QCD 轴子模型中， g^s_e 和 m_a 满足关系[71]。然而，在许多研究中，人们转而考虑一种更一般的情形，即将这些参数视为相互独立，因此所涉及的是任意质量的粒子。在本文中，我们采用这一做法，不区分轴子和类轴子粒子。

类轴子粒子介导的电子与核子之间的 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$ 破坏相互作用可表示为以下形式 [67, 71]:

$$V_{eN}(\boldsymbol{r}) = +i\frac{g^s_N g^p_e}{4\pi}\frac{e^{-m_a|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|}\gamma_0\gamma_5, \tag{3}$$

其中， $\boldsymbol{R}$ 为核子的位置， $\boldsymbol{r}$ 为电子的位置； g^s_N 为标量类轴子粒子-核子耦合常数； N 为核子（质子或中子）中的； γ矩阵指电子。

分子内部所考虑的 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$ 破坏电子-电子相互作用可由以下参数[68, 73]表征:

$$W^{(ee)}_{\rm ax}(m_a) = \frac{1}{\Omega}\frac{1}{g^s_e g^p_e}\langle\Psi|\sum_{i,j=1}^{N_e}{}' V_{ee}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)|\Psi\rangle, \tag{4}$$

其中， Ψ 为分子电子波函数，Ω 是总电子角动量在分子轴上的投影， N_e 为电子数。对于所考虑的 HfF^+ 阳离子的第一电子激发态，$\Omega=1$。求和中的撇号表示应省略含有 $i=j$ 的项。

类轴子粒子介导的电子-原子核相互作用可由分子参数 $W^{(eN)}_{\rm ax}$ 表征:

$$W^{(eN)}_{\rm ax}(m_a) = \frac{1}{\Omega}\langle\Psi|\sum_{i=1}^{N_e}\sum_{N}\frac{1}{g^s_N g^p_e}V_{\rm eN}(\boldsymbol{r}_i)|\Psi\rangle, \tag{5}$$

其中，指标 i 遍历所有电子；内层求和遍历铪原核的所有核子。请注意，$W^{(ee)}_{\rm ax}(m_a)$ 和 $W^{(eN)}_{\rm ax}$是类轴子粒子质量的函数。

由相互作用（ $\mathcal{T}$，$\mathcal{P}$-破坏对称性所导致的电子能级特征性能量位移（2）可表示为：

$$\delta E = g_e^s g_e^p \Omega W_{\rm ax}^{(ee)}(m_a), \tag{6}$$

而由相互作用（ $\mathcal{T}$，$\mathcal{P}$违变能量位移可表示为：3）

$$\delta E = \bar{g}_N^s g_e^p \Omega W_{\rm ax}^{(eN)}(m_a). \tag{7}$$

这里的 $\bar{g}_N^s$ 是对铪原子核内核子取平均后的 ALP-核子耦合常数： $\bar{g}_N^s = (Z g_p^s + N_n g_n^s)/A$； g_p^s和 g_n^s 分别是标量 ALP-质子和 ALP-中子耦合常数， Z 是铪原子核的电荷数， N_n 是其中子数， $A = Z + N_n$： $Z = 72$、 $N_n = 108$、$A = 180$。

III. 实现与计算细节

由方程（6）和（7）可知，要提取未知耦合常数乘积的数值，需要分子参数（4）和（5）。然而，这些参数在实践中无法测量。这与提取eEDM 数值的问题类似：需要知道分子内部作用于电子的有效电场。要解决此类实验结果解释问题，需要进行分子电子结构计算。本研究采用 Dirac-Coulomb（DC）哈密顿量来描述 HfF^+ 的电子结构：

$$H_{DC} = \Lambda_+ \left[\sum_j \left[\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{p}_j + \beta_j + V_{\rm nuc}(j) \right] + \sum_{j<k} V_C(r_{jk}) \right] \Lambda_+. \tag{8}$$

这里， α， β 是狄拉克矩阵，$\mathbf{p}$ 表示电子动量， $V_{\rm nuc}$ 是核子系统势， V_C是库仑电子-电子相互作用算符，Λ_+ 是狄拉克表象中正能态的投影算符，求和指标遍历所有电子。为计算电子波函数，我们采用相对论耦合簇（CC）方法 [74, 75]。该方法采用以下指数型试探形式表示多电子波函数Ψ:

$$\Psi = e^{\hat{T}} \Phi_0. \tag{9}$$

这里， Φ_0 是参考 Slater 行列式，为多电子分子波函数提供零阶近似。在本研究中， Φ_0 通过狄拉克–哈特里–福克方法获得。波函数 Ψ考虑了电子关联的影响。簇算符 T 可写为：

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3 + \ldots, \tag{10}$$

其中， T_1、 T_2.....是不同阶的激发算符：

$$\hat{T}_1 = \sum_{\substack{i\in occ \\ b\in virt}} t_i^b a_b^\dagger a_i; \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{2!} \sum_{\substack{i_1<i_2\in occ \\ b_1<b_2\in virt}} t_{i_1 i_2}^{b_1 b_2} a_{b_1}^\dagger a_{b_2}^\dagger a_{i_2} a_{i_1}.$$

这些量 $t_{\cdots}^{\cdots}$ 称为簇振幅。它们可以通过求解耦合簇方程来确定 [74, 75]。$a_b^\dagger$ 和 a_i 是单电子态 b 和 i的产生与湮灭算符。指标 i_1、i_2... 指的是占据态，即包含在参考行列式中的态 Φ_0；而 b_1、b_2.....指的是未占据（虚）轨道。本文考察了以下理论层次：(i) 具有单、双簇振幅的耦合簇方法 CCSD；(ii) 具有单、双、三簇振幅的耦合簇方法 CCSDT；以及 (iii) 具有单、双和非迭代三簇振幅的耦合簇方法 CCSD(T)。后者通常是完整迭代 CCSDT 模型的良好近似，但所需计算资源要少得多。这种简化是通过使用微扰理论估算三簇振幅的贡献实现的。由于 CCSD(T) 方法在精度与计算复杂度之间具有很好的平衡，因此被称为量子化学的“黄金标准”。从式（10）可以看出，即使簇算符在 $\hat{}$项之后截断，得益于多电子波函数的指数型试探形式（9），高阶激发（例如四重激发）仍会被有效地纳入考量。耦合簇方法最重要的特征之一是其尺寸广延性 [75]。这意味着关联能会随电子数正确地缩放。对于描述多电子体系和计算对称性破坏效应而言，这一特征非常重要[76–78]。

为了在 CC理论框架下计算所关注的分子参数，我们采用了有限场方法。为此，我们将所需的算符（2）或（3）以较小系数（“弱场”）加入电子哈密顿量中，并用标准数值技术计算总电子能量

对该系数的导数。由此，我们得到了所需的矩阵元（4）和（5）。这种方法常用于计算分子坐标系偶极矩等性质，也广泛应用于计算许多其他性质。通常，研究的是单电子性质；我们在此对（3）所做的就是如此。但在本研究中，我们还采用有限场方法计算双电子特征量（5）。从技术上讲，这需要计算所关注算符在分子双旋量上的相应双电子积分。下面我们将详细介绍这一问题。

文献 [69] 中曾尝试直接计算分子中效应 (4)、(6) 的影响。然而，该计算仅针对式 (2) 中的指数可近似为两项的情况（低质量类轴子粒子的情形）。考虑到 γ-矩阵的结构，算符 (2) 在分子双旋量上的矩阵元计算，若不采用这种近似，可归结为计算如下形式的“原始”积分 $\langle ab|\frac{e^{-m_a r}}{r}|cd\rangle$，其中基函数是原始高斯型基函数 a, b, c, d。这里，n, m, k 是非负整数，其和定义了给定基函数的角动量，而 $\beta > 0$ 是指数参数。对于双原子分子，基函数 a, b, c, d 可以分别以不同原子核为中心，这使得此类计算更为复杂（参见文献 [70]，其中讨论了高斯型函数的单中心问题）。在相应的库仑相互作用积分 $\langle ab|\frac{1}{r}|cd\rangle$ 计算问题中，计算算法通常涉及求值 Boys 函数 [79, 80]:

$$F_m(T) = \int_0^1 dt t^{2m} e^{-Tt^2}. \tag{11}$$

积分 $\langle ab|\frac{e^{-m_a r}}{r}|cd\rangle$ 的计算方法类似，但必须用更复杂的特殊函数 [81] 替代 Boys函数:

$$G_m(T,U) = \int_0^1 dt t^{2m} e^{-Tt^2+U(1-\frac{1}{t^2})}. \tag{12}$$

这使得人们能够采用多种经典电子排斥积分求值算法的不同推广形式，例如 McMurchie–Davidson[82], Obara–Saika [83], Gill等人的 PRISM [84], Pople–Hehre [85], Head-Gordon–Pople [86],以及其他方法 [87–90]。本文采用了 LIBINT 计算库[91]中实现的 Yukawa 势积分求值算法。该方法与 Dupuis等人[92–94] 针对电子排斥积分提出的所谓 Rys 求积法类似，后经 Lindh等人 [95],进一步完善。与其他算法相比，该方法被认为特别适用于求值高角动量轨道上的积分。然而，LIBINT 库中实现的代码是为显式相关电子结构方法 [82], – [83], 的问题设计的。

该代码中变量 T 和 U [91] 的取值范围不足以满足我们的需求。因此，我们作出了一些修改，以便开展本文所关注的计算。如上所述，在 LIBINT 库的原始版本中，采用定制的高斯求积作为计算积分[97]的主要方法。该算法使用预先计算的网格点位置和权重的切比雪夫展开系数，因此仅适用于 $0 \le T \le T_{max}$ 和$U_{min} \le U \le 10^3$，其中 $T_{max} = 1024$ 和 $U_{min} = 10^{-7}$。如果 $T > T_{max}$ 或 $U < U_{min}$，则采用参考文献 [96] 中的“方案 1”，即进行计算

$$G_{-1} = \frac{e^{-T}}{4}\sqrt{\frac{\pi}{U}}\left[e^{k^2}\mathrm{erfc}(k) + e^{\lambda^2}\mathrm{erfc}(\lambda)\right], \tag{13}$$

$$G_0 = \frac{e^{-T}}{4}\sqrt{\frac{\pi}{T}}\left[e^{k^2}\mathrm{erfc}(k) - e^{\lambda^2}\mathrm{erfc}(\lambda)\right], \tag{14}$$

其中 erfc 是互补误差函数,

$$k = -\sqrt{T} + \sqrt{U}, \tag{15}$$

$$\lambda = \sqrt{T} + \sqrt{U}, \tag{16}$$

并借助向上递推关系求得其余所有 G_m 数值

$$G_m = \frac{1}{2T}[(2m-1)G_{m-1} + 2UG_{m-2} - e^{-T}]. \tag{17}$$

为考虑 $T = 0$ 的情况，我们按照文献 [96] 添加了一个函数，用于在 $T = 0$ 处实现向上递推关系。递推关系的首项定义如下:

$$G_0 = 1 - e^U\sqrt{\pi U}\mathrm{erfc}(\sqrt{U}). \tag{18}$$

其余各项通过递推关系求得

$$G_m(0,U) = \frac{1}{2m+1}[1 - 2UG_{m-1}(0,U)]. \tag{19}$$

此外，发现“方案 1”在较小 T 时会出现数值不稳定性，因为在方程（17）中 T 出现在分母中。为解决这一问题，我们针对 $T < 0.1$ 在$U < U_{min}$时，实现了文献 [96] 中的“方案 3”。根据该方案，$G_m(T, U)$ 可通过以下方程求得:

$$G_m(T,U) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-T)^k}{k!}G_{m+k}(0,U), \tag{20}$$

在实际计算中，我们考虑了 k 至 $k = 8$; $G_m(0, U)$根据方程（18）和（19）计算。

在参考文献 [69] 中，我们仅考虑了类轴子粒子质量约为 1 meV 的情况。对于某些轴子模型，这已足够 [44, 58, 101], ，但一般而言，我们关心所有类轴子粒子质量 [102, 103]。采用上述方法，我们大幅拓宽了可计算分子效应的质量范围。所研究的分子参数（4）（以及（5））仅在具有未成对电子的电子态中才可能非零。在所研究的 $^3\Delta_1$ HfF^+ 态中有两个这样的电子，且二者主要局域在 Hf 原子上。它们大致分别对应于 Hf $5d$ 和 $6s$ 离子的态。因此，鉴于这种相互作用的作用范围较短（），在类轴子粒子质量较大时，双中心积分对参数（4）的贡献预计很小（2）。事实上，根据我们对 $m_a = 10^4$ eV 情况的直接计算，双中心积分的贡献可以忽略不计。这大大简化了计算流程。因此，我们采用这种方法计算了4）参数，适用于$m_a \geq 10^5$ eV。最后，值得考察类轴子粒子的高质量极限。在这种情况下，可以使用关系式[70]:

$$\frac{e^{-m_a r}}{4\pi r} \approx \frac{1}{m_a^2}\delta(\boldsymbol{r}), \tag{21}$$

这对于极高质量的情况是成立的。从该式可以看出，类轴子粒子质量可以被提取出来，而分子效应（6）和（7）可仅由相应的、与类轴子粒子质量无关的分子参数来表征 [67, 70] （见下文）。为了方便地数值实现狄拉克δ函数，我们使用了高斯电子对算符 $c \cdot e^{-\alpha r^2}$，其中 c 为归一化常数；在实际应用中， α 应远大于原始高斯基函数中的任何指数参数 β。采用这种替代方式，我们可以利用 LIBINT 库中已有的相应双电子积分实现。

最后，在计算完所有原始积分 $\langle ab|\frac{e^{-m_a r}}{r}|cd\rangle$ 后，我们从原始高斯函数基组向复分子双旋量基组进行了四指标变换 [104]，并考虑了 γ 矩阵的结构。

不同类轴子粒子质量下的 $W_{\rm ax}^{(eN)}(m_a)$ 分子常数值，是采用 Dirac-Coulomb 哈密顿量下的相对论 CCSD(T) 方法计算得到的。在这些计算中，将 HfF^+的 70 个电子纳入相关处理（Hf 的 $1s2s2p$ 个电子不参与计算），并将虚轨道能量的截断值设为 1000 E_h。我们使用 Dyall 的未收缩 AE4Z [105, 106] 基组计算 Hf，并使用 AE2Z [105, 107, 108] 基组计算 F；下文将这两种基组的组合称为 LBas。此外，我们还对所得$W_{\rm ax}^{(eN)}$数值计算了以下修正：(i) 高阶电子相关效应修正。该修正通过耦合簇单、双激发及迭代三激发振幅计算所得的 $W_{\rm ax}^{(eN)}$数值与 CCSDT [109], 级别的数值，与 CCSD(T) 级别的数值之差计算得到。对 HfF^+ 的 42 个外核层和价电子进行了相关处理（$1s..4p$ 个 Hf 电子和 $1s$ 个 F 电子不参与计算），并将基组缩减为 SBas 基组。后者对应于两个原子均采用 AE2Z [105, 107, 108] 。 (ii) Hf 内层 $1s2s2p$电子（在主要计算中未纳入）的影响，采用 SBas 基组在 CCSD(T) 级别进行计算。在这项计算中，虚轨道能量的截断值提高至 10000 E_h [76, 78]。 (iii) 最后，我们通过采用 SBas 基组、在 CCSD(T) 方法下得到的 Dirac-Coulomb-Gaunt 结果与 Dirac-Coulomb 结果之差，估算 Gaunt 电子-电子相互作用效应的贡献。由于所考虑的算符具有双电子性质，计算 $W_{\rm ax}^{(ee)}(m_a)$ 常数的难度要大得多（2）。因此，这些计算采用 SBas 基组，在 CCSD(T) 级别进行，并将所有电子纳入相关处理。值得注意的是，对于 YbOH 分子，这种理论水平已被证明能够给出相当准确的结果 [69]。在所有电子结构计算中，均采用 Hf 与 F 之间的[110] 实验距离。

在所有计算中，我们使用了适用于分子问题的高斯核电荷分布模型 [111]。与文献 [67], 类似，我们将电子-原子核相互作用视为式（3）所示的形式，即不考虑算符（3）中的有限核尺寸效应。相关问题例如已在文献 [112, 113]中进行了研究。

为获得式（9）中的参考 Slater 行列式，所需的 Dirac-Hartree-Fock 计算是在相对论电子结构软件包 DIRAC 中完成的 [114, 115]。相关性计算使用 DIRAC [114, 115] 和 MRCC [116–118]代码完成。矩阵元（5）使用文献 [68]中开发的代码计算。计算矩阵元（4）时，我们使用了本研究开发的代码和 LIBINT 计算库 [91]。用于计算分子双旋量上 Gaunt 电子间相互作用矩阵元的代码由文献[119, 120]开发。

IV. 结果与讨论

在不同理论层次下计算得到的 $W_{\rm ax}^{(eN)}$常数，适用于广泛的$1 \div 10^{10}$ eV 类轴子粒子质量范围，列于表I 中：Dirac-Hartree-Fock（DHF）、单、双激发振幅耦合簇（CCSD）以及 CCSD(T) 理论层次。表I 中的“最终”一栏给出了计入上一节所述修正后的数值。可以看出，电子关联效应（即超出 DHF 理论层次的效应）对于描述 $W_{\rm ax}^{(eN)}$常数非常重要，而且从小质量到大质量的变化过程中，其作用不断增强。同时，关联效应处理实现了良好的收敛性。

表 I. 不同电子结构理论层次下计算得到的 $W_{(eN)\mathrm{ax}}(m_a)$ 分子参数。“最终”列为 CCSD(T) 结果与正文所述修正项之和。最后一列给出了根据实验数据得出的$|\bar{g}_N^s g_e^p|$ 上限 [10]，其对应的类轴子粒子质量列于第一列。

m_a, eV	$W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}(m_a)$ ， $m_e c/\hbar$				$\lvert\bar{g}_N^s g_e^p\rvert$
	DHF	CCSD	CCSD(T)	最终	限值, $\hbar c$
1	$+1.20\cdot10^{-5}$	$+1.72\cdot10^{-5}$	$+1.68\cdot10^{-5}$	$+1.67\cdot10^{-5}$	$1.11\cdot10^{-20}$
10	$+1.20\cdot10^{-5}$	$+1.72\cdot10^{-5}$	$+1.68\cdot10^{-5}$	$+1.67\cdot10^{-5}$	$1.11\cdot10^{-20}$
10^2	$+1.19\cdot10^{-5}$	$+1.73\cdot10^{-5}$	$+1.68\cdot10^{-5}$	$+1.66\cdot10^{-5}$	$1.11\cdot10^{-20}$
10^3	$+1.14\cdot10^{-5}$	$+1.60\cdot10^{-5}$	$+1.56\cdot10^{-5}$	$+1.54\cdot10^{-5}$	$1.19\cdot10^{-20}$
10^4	$+2.87\cdot10^{-6}$	$+3.59\cdot10^{-6}$	$+3.55\cdot10^{-6}$	$+3.30\cdot10^{-6}$	$5.25\cdot10^{-20}$
10^5	$-8.36\cdot10^{-6}$	$-1.14\cdot10^{-5}$	$-1.12\cdot10^{-5}$	$-1.15\cdot10^{-5}$	$1.66\cdot10^{-20}$
10^6	$-3.88\cdot10^{-6}$	$-6.43\cdot10^{-6}$	$-6.27\cdot10^{-6}$	$-6.41\cdot10^{-6}$	$2.97\cdot10^{-20}$
10^7	$-1.72\cdot10^{-7}$	$-2.86\cdot10^{-7}$	$-2.79\cdot10^{-7}$	$-2.85\cdot10^{-7}$	$6.67\cdot10^{-19}$
10^8	$-3.19\cdot10^{-9}$	$-5.33\cdot10^{-9}$	$-5.19\cdot10^{-9}$	$-5.30\cdot10^{-9}$	$3.59\cdot10^{-17}$
10^9	$-3.53\cdot10^{-11}$	$-5.90\cdot10^{-11}$	$-5.74\cdot10^{-11}$	$-5.85\cdot10^{-11}$	$3.24\cdot10^{-15}$
10^{10}	$-3.54\cdot10^{-13}$	$-5.91\cdot10^{-13}$	$-5.75\cdot10^{-13}$	$-5.87\cdot10^{-13}$	$3.24\cdot10^{-13}$

CCSD(T) 模型以外的高阶关联效应对所有类轴子粒子质量的贡献均在 1%–2% 以内。根据我们的计算，上述对 CCSD(T) 结果所作修正的总贡献对于所考察的每一种质量均不超过 5%。

与 YbOH 分子的情况类似，函数$W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}(m_a)$ 在 m_a =10^4 eV 与 $m_a = 10^5$ eV 之间的区域内变号。有趣的是，对于所考虑的 HfF$W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}(m_a)$ 情形，在所有类轴子粒子质量下，其数值约为 $W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}(m_a)$ 在 YbOH 情形下数值的一半。这一差异可能与式（Ω （5）中的不同 Ω = 1 有关：HfF$^+$中为Ω = 1/2，而 YbOH 中为。HfF（7）与 YbOH 的能量位移则相当。

表 $W_{\mathrm{ax}}^{(ee)}(m_a)$ 中给出了不同类轴子粒子质量下的常数计算值（$1 \div 10^{10}$ eV）。可以看出，与轻类轴子粒子相比，电子关联效应对高质量类轴子粒子的影响更显著。值得注意的是，对于质量低于 $m_a = 10^2$ eV 的类轴子粒子，$W_{\mathrm{ax}}^{(ee)}(m_a)$ 的数值几乎相等。在这种情况下， $W_{\mathrm{ax}}^{(ee)}$约为 $W_{\mathrm{ax}}^{(ee)}$的一半（以 YbOH 为例） [69]。同样，这可以归因于 YbOH 和 HfF$^+$ 的 Ω 值不同。可以看出，在 $m_a = 10^3$ eV 附近， $W_{\mathrm{ax}}^{(ee)}(m_a)$ 发生了一定变化；当质量为 $m_a = 10^4$ eV 时，其数值下降至原来的三分之一；对于质量更高的类轴子粒子，其符号最终发生变化，这与 $W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}$ 的情况相同。

在文献 [10] 中，依据以下关系，将对违反 $\mathcal{T}$,$\mathcal{P}$ 的能量位移的限制解释为电子电偶极矩 d_{e}：

$$\delta E = d_{\mathrm{e}}\Omega W_d, \tag{22}$$

其中 $E_{\mathrm{eff}} = W_d|\Omega| \approx 23$ GV/cm [121–124]。利用关系式（6）和（7），可以将得到的约束解释为对.....的约束能量[10]:

$$\delta E \approx 23\ \mu\mathrm{Hz} \tag{23}$$

以类轴子粒子耦合常数乘积的上限表示。对应类轴子粒子质量数值的推导上限列于表I 和II的最后几列。我们还来考察以下两种极限情形。

低质量极限。如上所述，从表 I 可以看出，对于轻类轴子粒子（$m_a < 1$ keV）， $W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}(m_a)$ 常数几乎不依赖于m_a 数值。因此，在极宽的类轴子粒子质量范围内，都可以采用相同的 $W_{\mathrm{ax}}^{(eN)}$数值。这可以解释为：对于轻类轴子粒子，汤川型相互作用 R_{Yu} =$1/m_a$（相对论单位）的特征半径 $= \hbar/m_a c$ 远大于分子尺寸[67]。例如，1 玻尔的特征分子间距对应于$m_a \approx 4$ keV。因此，对于这类类轴子粒子，可以将实验数据 [10] 重新解释为对 $\bar{g}_N^s g_e^p$的限值：$|\bar{g}_N^s g_e^p|/(\hbar c) \lesssim 1.1\times10^{-20}$。这一限制比先前由一氧化钍实验 [17, 67]推导出的 $|\bar{g}_N^s g_e^p|$上限严格一个数量级。

对于轻质量类轴子粒子的情况，也可以将实验 [10] 重新解释为对 $g_e^s g_e^p$乘积的限制： $|g_e^s g_e^p|/(\hbar c) \lesssim 2.2\times10^{-20}$。这一限制也比根据一氧化钍实验 [17]推导出的结果好一个数量级 [67]。

高质量极限。 对于质量较高的类轴子粒子（$m_a \geq 1$ GeV），存在近似关系 [67, 68]： $W_{(eN)\text{轴}}(m_a) \simeq \widetilde{W}^{eN} m_a^{-2}$。该 $\widetilde{W}^{eN}$参数不依赖于 m_a。因此，在这种情况下，能量位移（7）可参数化如下 [69]:

$$\delta E \approx \frac{\bar{g}_N^s g_e^p}{m_a^2}\Omega\widetilde{W}^{eN}, \tag{24}$$

表 II. 计算得到的数值（W 的$^{(ee)}$）分子参数在不同理论层次下的数值，最后一列给出了根据 $|g_e^s g_e^p|$ 乘积推导出的上限，推导自实验数据[10]，对应于第一列给出的类轴子粒子质量m_a。

m_a, eV	$W_{\rm ax}^{(ee)}(m_a)$, $m_e c/\hbar$			$|g_e^s g_e^p|$
	DHF	CCSD	CCSD(T)（最终）	限值，$\hbar c$
1	$+6.35\cdot10^{-6}$	$+8.83\cdot10^{-6}$	$+8.63\cdot10^{-6}$	$2.16\cdot10^{-20}$
10	$+6.35\cdot10^{-6}$	$+8.83\cdot10^{-6}$	$+8.63\cdot10^{-6}$	$2.16\cdot10^{-20}$
10^2	$+6.34\cdot10^{-6}$	$+8.81\cdot10^{-6}$	$+8.61\cdot10^{-6}$	$2.16\cdot10^{-20}$
10^3	$+5.67\cdot10^{-6}$	$+7.81\cdot10^{-6}$	$+7.64\cdot10^{-6}$	$2.44\cdot10^{-20}$
10^4	$+1.98\cdot10^{-6}$	$+2.49\cdot10^{-6}$	$+2.46\cdot10^{-6}$	$7.57\cdot10^{-20}$
10^5	$+7.73\cdot10^{-8}$	$+1.64\cdot10^{-7}$	$+1.59\cdot10^{-7}$	$1.17\cdot10^{-18}$
10^6	$-4.01\cdot10^{-9}$	$-5.77\cdot10^{-9}$	$-5.67\cdot10^{-9}$	$3.28\cdot10^{-17}$
10^7	$-6.83\cdot10^{-11}$	$-1.11\cdot10^{-10}$	$-1.08\cdot10^{-10}$	$1.72\cdot10^{-15}$
10^8	$-6.90\cdot10^{-13}$	$-1.12\cdot10^{-12}$	$-1.09\cdot10^{-12}$	$1.70\cdot10^{-13}$
10^9	$-6.94\cdot10^{-15}$	$-1.12\cdot10^{-14}$	$-1.09\cdot10^{-14}$	$1.69\cdot10^{-11}$
10^{10}	$-6.97\cdot10^{-17}$	$-1.12\cdot10^{-16}$	$-1.10\cdot10^{-16}$	$1.67\cdot10^{-9}$

其中

$$\widetilde{W}^{eN} = \lim_{m_a\to+\infty} m_a^2 W_{\rm ax}^{(eN)}(m_a). \tag{25}$$

因此，根据表 I：

$$|\widetilde{W}^{eN}| \approx 5.87\times10^{-11}\ \text{GeV}^2 \times \frac{m_e c}{\hbar}.$$

因此，根据能量位移的实验约束（23） [10]可以得到：$|\bar{g}_N^s g_e^p|/(\hbar c m_a^2) \lesssim 3.2\cdot10^{-15}\ \text{GeV}^{-2}$。该约束略优于 [67]，由一氧化钍实验得到的约束[17]。

电子-电子分子参数（4）对类轴子粒子质量的类似依赖关系也成立，这源于关系式（21）：

$$\widetilde{W}^{ee} = \lim_{m_a\to+\infty} m_a^2 W_{\rm ax}^{(ee)}(m_a). \tag{26}$$

根据当前计算

$$|\widetilde{W}^{ee}| \approx 1.1\times10^{-14}\ \text{GeV}^2 \times \frac{m_e c}{\hbar}.$$

这对应于以下限值：$|g_e^s g_e^p|/(\hbar c m_a^2) \lesssim 1.7\cdot10^{-11}\,\text{GeV}^{-2}$。这比相应的最佳约束好约三倍；该约束来自 ThO 实验 [17, 67]。为方便起见，表 III 汇总了上述针对轻质量和高质量类轴子粒子限值情形得到的约束。

将利用 HfF^+ 阳离子 [10] 获得的实验数据与本研究中计算的分子参数相结合，可以针对类轴子粒子质量为 $m_a \geq 10^{-2}$ eV 的情形，推导出类轴子粒子耦合常数乘积的最新实验室约束（不同约束的汇总示例见文献[67]的图 2）。文献 [45] 综述指出，通过结合来自完全不同来源的、针对 g_N^s 和 g_e^p 的独立约束，可以获得对 $g_N^s g_e^p$ 乘积更严格的间接界限，例如实验室实验和天体物理恒星能量损失界限。然而，正如文献[45] 所强调的，某些机制可能会削弱天体物理界限，因此非常需要纯粹基于地球实验室实验的约束。

表 III. 总结了轻质量和高质量类轴子粒子极限情形下推导出的类轴子粒子耦合常数组合约束。

限值	数值
$|\bar{g}_N^s g_e^p|/(\hbar c)$, $m_a \ll 1$ 千电子伏特	1.1×10^{-20}
$|g_e^s g_e^p|/(\hbar c)$, $m_a \ll 1$ 千电子伏特	2.2×10^{-20}
$|\bar{g}_N^s g_e^p|/(\hbar c m_a^2)$, $m_a \geq 1$ GeV	$3.2\cdot10^{-15}\,\text{GeV}^{-2}$
$|g_e^s g_e^p|/(\hbar c m_a^2)$, $m_a \geq 1$ 吉电子伏特	$1.7\cdot10^{-11}$ 吉电子伏特$^{-2}$

V. 结论

研究了 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$-破坏的类轴子粒子介导的标量-赝标量电子-电子和核-电子相互作用对 HfF^+阳离子亚稳态 $^3\Delta_1$ 电子态的影响。为求解核-电子相互作用问题，我们使用了此前开发的代码[69]，；而为描述电子-电子相互作用，我们使用了本工作中开发的代码。我们采用该方法计算了表征这些相互作用的分子常数。这些常数将 $\mathcal{T}$、$\mathcal{P}$-破坏性能量位移的实验限制与类轴子粒子-电子标量耦合常数和 ALP-电子赝标量耦合的乘积，或类轴子粒子-原子核标量耦合常数和 ALP-电子赝标量耦合的乘积联系起来。利用所得常数的数值，我们重新解读了 JILA 实验对 HfF^+ 分子阳离子的测量结果 [10] ；该实验旨在以类轴子粒子耦合常数乘积为依据搜索电子电偶极矩。更新后的限制

依据实验数据推导了适用于宽范围类轴子粒子质量的限制 [10]。

所发展的程序可用于解读后续利用顺磁分子和原子开展的实验；这些实验旨在通过具有任意质量的类轴子粒子介导的标量-赝标量相互作用，寻找 $\mathcal{T},\mathcal{P}$-破坏效应。

致谢

电子结构计算使用联邦集体使用中心的计算资源完成国家研究中心“库尔恰托夫研究所”的大型科学设施模拟与数据处理综合中心（http://ckp.nrcki.ru/），以及部分量子化学实验室的计算资源。

分子耦合簇电子结构计算得到了俄罗斯科学基金会第19-72-10019号资助（https://rscf.ru/project/22-72-41010/）。$W_{\rm ax}^{(ee)}(m_a)$矩阵元的计算及相应代码的开发得到了理论物理与数学发展基金会“BASIS”根据项目21-1-2-47-1和20-1-5-76-1提供的资助。

[1]M. S. Safronova, D. Budker, D. DeMille, D. F. J. Kimball, A. Derevianko, and C. W. Clark, 《利用原子与分子寻找新物理》，《现代物理评论》 **90**, 025008 (2018年). [2] R. Alarcon, J. Alexander, V. Anastassopoulos, T. Aoki, R. Baartman, S. Baeßler, L. Bartoszek, D. H. Beck, F. Bedeschi, R. Berger, M. Berz, H. L. Bethlem, T. Bhattacharya, M. Blaskiewicz, T. Blum, T. Bowcock, A. Borschevsky, K. Brown, D. Budker, S. Burdin, B. C. Casey, G. Casse, G. Cantatore, L. Cheng, T. Chupp, V. Cianciolo, V. Cirigliano, S. M. Clayton, C. Crawford, B. P. Das, H. Davoudiasl, J. de Vries, D. De-Mille, D. Denisov, M. V. Diwan, J. M. Doyle, J. Engel, G. Fanourakis, R. Fatemi, B. W. Filippone, V. V. Flam-baum, T. Fleig, N. Fomin, W. Fischer, G. Gabrielse, R. F. G. Ruiz, A. Gardikiotis, C. Gatti, A. Geraci, J. Gooding, B. Golub, P. Graham, F. Gray, W. C. Grif-fith, S. Haciomeroglu, G. Gwinner, S. Hoekstra, G. H. Hoffstaetter, H. Huang, N. R. Hutzler, M. Incagli, T. M. Ito, T. Izubuchi, A. M. Jayich, H. Jeong, D. Kaplan, M. Karuza, D. Kawall, O. Kim, I. Koop, W. Korsch, E. Korobkina, V. Lebedev, J. Lee, S. Lee, R. Lehn-ert, K. K. H. Leung, C.-Y. Liu, J. Long, A. Lusiani, W. J. Marciano, M. Maroudas, A. Matlashov, N. Mat-sumoto, R. Mawhorter, F. Meot, E. Mereghetti, J. P. Miller, W. M. Morse, J. Mott, Z. Omarov, L. A. Orozco, C. M. O’Shaughnessy, C. Ozben, S. Park, R. W. Pat-tie, A. N. Petrov, G. M. Piacentino, B. R. Plaster, B. Podobedov, M. Poelker, D. Pocanic, V. S. Prasan-naa, J. Price, M. J. Ramsey-Musolf, D. Raparia, S. Ra-jendran, M. Reece, A. Reid, S. Rescia, A. Ritz, B. L. Roberts, M. S. Safronova, Y. Sakemi, P. Schmidt-Wellenburg, A. Shindler, Y. K. Semertzidis, A. Silenko, J. T. Singh, L. V. Skripnikov, A. Soni, E. Stephen-son, R. Suleiman, A. Sunaga, M. Syphers, S. Syritsyn, M. R. Tarbutt, P. Thoerngren, R. G. E. Timmermans, V. Tishchenko, A. V. Titov, N. Tsoupas, S. Tzamarias, A. Variola, G. Venanzoni, E. Vilella, J. Vossebeld, P. Winter, E. Won, A. Zelenski, T. Zelevinsky, Y. Zhou, and K. Zioutas, 《电偶极矩与新物理的探索》，arXiv:2203.08103 [hep-ph](2022年). [3] M. S. Safronova, 《新物理探索》，载于《*Springer*原子、分子与光学手册》由 G. W. F. Drake 编辑（施普林格国际出版，施普林格，2023年），第 471–484 页。

[4]Y. Ema、T. Gao 和 M. Pospelov, 《标准模型对顺磁性电偶极矩的预测》，《物理评论快报》129，231801（2022年）。[5] Y. Yamaguchi 和 N. Yamanaka, 《标准模型中带电轻子电偶极矩的夸克层次与强子贡献》，Physical Review D 103，013001（2021年）。[6] J. Engel、M. J. Ramsey-Musolf 和 U. van Kolck, 《核子、原子核和原子的电偶极矩：标准模型及其扩展》，《粒子与核物理进展》71，21（2013年）。[7] D. V. Chubukov 和 L. N. Labzowsky, 《原子系统中 $\mathcal{PT}$-奇的电子-原子核相互作用：希格斯玻色子的交换》，《物理评论 A》93，062503（2016年）。[8] E. D. Commins, 《轻子的电偶极矩》，《原子、分子与光学物理进展》40，1（1998年）。[9] T. E. Chupp、P. Fierlinger、M. J. Ramsey-Musolf 和 J. T. Singh, 《原子、分子、原子核和粒子的电偶极矩》，《现代物理评论》91，015001（2019年）。[10] T. S. Roussy、L. Caldwell、T. Wright、W. B. Cairncross、Y. Shagam、K. B. Ng、N. Schlossberger、S. Y. Park、A. Wang、J. Ye 和 E. A. Cornell, 《电子电偶极矩的新限值》（2022年），arXiv:2212.11841 [原子物理]。[11] L. N. Labzowsky, 《双原子分子光谱中的 Λ 倍增和宇称不守恒效应》，《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》48，434（1978年）。[12] O. P. Sushkov 和 V. V. Flambaum, 《双原子分子中的宇称破缺效应》，《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》48，608（1978年）。[13] D. DeMille、F. Bay、S. Bickman、D. Kawall、L. Hunter、D. Krause、S. Maxwell 和 K. Ulmer, 《实验物理学中的艺术与对称性：尤金·D·康明斯纪念文集》（《美国物理联合会会议论文集》596，编者：D. Budker、P. H. Bucksbaum 和 S. J. Freedman，纽约州梅尔维尔，第72页，2001年）。[14] D. Kawall、F. Bay、S. Bickman、Y. Jiang 和 D. DeMille, 《亚稳态$a(1)[^3\Sigma^+]$ 一氧化铅态的精密塞曼-斯塔克光谱学》，《物理评论快报》92，133007（2004年）。[15] A. C. Vutha、W. C. Campbell、Y. V. Gurevich、N. R. Hutzler、M. Parsons、D. Patterson、E. Petrik、B. Spaun、J. M. Doyle、G. Gabrielse 和 D. DeMille，搜索

利用一氧化钍测量电子电偶极矩，《物理学杂志B》43，074007（2010年）。[16] L. Caldwell、T. S. Roussy、T. Wright、W. B. Cairncross、Y. Shagam、K. B. Ng、N. Schlossberger、S. Y. Park、A. Wang、J. Ye 和 E. A. Cornell，《HfF^+电子电偶极矩实验的系统与统计不确定度评估》（2022年），arXiv:2212.11837 [原子物理]。[17] V. Andreev、D. Ang、D. DeMille、J. Doyle、G. Gabrielse、J. Haefner、N. Hutzler、Z. Lasner、C. Meisenhelder、B. O'Leary 等，《改进的电子电偶极矩限值》，《自然》562，355（2018年）。[18] V. G. Gorshkow、L. N. Labzovsky 和 A. N. Moskalyov，《双原子分子光谱中的空间和时间宇称不守恒效应》，《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》49，209（1979年）。[19] M. Jung，《电子电偶极矩的稳健限值》，《高能物理学杂志》2013（5），168。[20] M. Pospelov 和 A. Ritz，《电子电偶极矩实验的CKM基准》，Physical Review D 89，056006（2014年）。[21] T. Fleig 和 L. V. Skripnikov，《原子铊中的P、T破坏相互作用与磁超精细相互作用》，Symmetry 12，498（2020年）。[22] D. N. Gresh、K. C. Cossel、Y. Zhou、J. Ye 和 E. A. Cornell，《用于测量电子电偶极矩的ThF^+ 宽带速度调制光谱学》，《分子光谱学杂志》319，1（2016年）。[23] I. Kozyryev 和 N. R. Hutzler，《利用激光冷却多原子分子精密测量时间反演对称性破坏》，《物理评论快报》119，133002（2017年）。[24] T. A. Isaev、A. V. Zaitsevskii 和 E. Eliav，《可激光冷却且含重原子核的多原子分子》，《物理学杂志B：原子、分子与光物理》50，225101（2017年）。[25] P. Aggarwal、H. L. Bethlem、A. Borschevsky、M. Denis、K. Esajas、P. A. B. Haase、Y. Hao、S. Hoekstra、K. Jungmann、T. B. Meijknecht 等，《测量BaF中电子的电偶极矩》，《欧洲物理学杂志D》72，197（2018年）。[26] N. J. Fitch、J. Lim、E. A. Hinds、B. E. Sauer 和 M. R. Tarbutt，《利用超冷氟化镱分子测量电子电偶极矩的方法》，《量子科学与技术》6，014006（2020年）。[27] D. E. Maison、L. V. Skripnikov、G. Penyazkov、M. Grau 和 A. N. Petrov，《$LuOH^+$ 阳离子中的 $\mathcal{TP}$-奇效应》，《物理评论A》106，062827（2022年）。[28] J. H. Christenson、J. W. Cronin、V. L. Fitch 和 R. Turlay，《 K_2^0 介子的 2π 衰变证据》，《物理评论快报》13，138（1964年）。[29] C. Abel、S. Afach、N. J. Ayres、C. A. Baker、G. Ban、G. Bison、K. Bodek、V. Bondar、M. Burghoff、E. Chanel、Z. Chowdhuri、P.-J. Chiu、B. Clement、C. B. Crawford、M. Daum、S. Emmenegger、L. Ferraris-Bouchez、M. Fertl、P. Flaux、B. Franke、A. Fratangelo、P. Geltenbort、K. Green、W. C. Griffith、M. van der Grinten、Z. D. Gruji´c、P. G. Harris、L. Hayen、W. Heil、R. Henneck、V. H´elaine、N. Hild、Z. Hodge、M. Horras、P. Iaydjiev、S. N. Ivanov、M. Kasprzak、Y. Kermaidic、K. Kirch、A. Knecht、P. Knowles、H.-C. Koch、P. A. Koss、S. Komposch、A. Kozela、A. Kraft、J. Krempel、M. Ku´zniak、B. Lauss、T. Lefort、Y. Lemi`ere、A. Leredde、P. Mohanmurthy、A. Mtchedlishvili、M. Musgrave、O. Naviliat-Cuncic、D. Pais、F. M. Piegsa、E. Pierre、G. Pignol, C. Plonka-Spehr, P. N. Prashanth, G. Qu´em´ener, M. Rawlik, D. Rebreyend, I. Rien¨acker, D. Ries, S. Roc- cia, G. Rogel, D. Rozpedzik, A. Schnabel, P. Schmidt- Wellenburg, N. Severijns, D. Shiers, R. Tavakoli Dinani, J. A. Thorne, R. Virot, J. Voigt, A. Weis, E. Wursten, G. Wyszynski, J. Zejma, J. Zenner, and G. Zsigmond，《中子永久电偶极矩测量》，《物理评论快报》124，081803（2020）。[30] A. D. Sakharov，《CP 不变性破坏、C 不对称性与宇宙重子不对称性》，JETP Letters 5，27（1967）。[31] M. Dine 和 A. Kusenko，《物质-反物质不对称性的起源》，《现代物理评论》76，1（2003）。[32] A. K. Drukier、K. Freese 和 D. N. Spergel，《探测冷暗物质候选粒子》，Physical Review D 33，3495（1986）。[33] Z. Ahmed、D. S. Akerib、S. Arrenberg、C. N. Bai- ley、D. Balakishiyeva、L. Baudis、D. A. Bauer、P. L. Brink、T. Bruch、R. Bunker、B. Cabrera、D. O. Cald- well、J. Cooley、E. do Couto e Silva、P. Cushman、M. Daal、F. DeJongh、P. Di Stefano、M. R. Dragowsky、L. Duong、S. Fallows、E. Figueroa-Feliciano、J. Filippini、J. Fox、M. Fritts、S. R. Golwala、J. Hall、R. Hennings- Yeomans、S. A. Hertel、D. Holmgren、L. Hsu、M. E. Huber、O. Kamaev、M. Kiveni、M. Kos、S. W. Leman、S. Liu、R. Mahapatra、V. Mandic、K. A. McCarthy、N. Mirabolfathi、D. Moore、H. Nelson、R. W. Ogburn、A. Phipps、M. Pyle、X. Qiu、E. Ramberg、W. Rau、A. Reisetter、R. Resch、T. Saab、B. Sadoulet、J. Sander、R. W. Schnee、D. N. Seitz、B. Serfass、K. M. Sundqvist、M. Tarka、P. Wikus、S. Yellin、J. Yoo、B. A. Young 和 J. Zhang（CDMS合作组），《CDMS II锗数据低能分析结果》，《物理评论快报》106，131302（2011）。[34] E. Aprile、J. Aalbers、F. Agostini、M. Alfonsi、F. D. Amaro、M. Anthony、F. Arneodo、P. Barrow、L. Baudis、B. Bauermeister、M. L. Benabderrahmane、T. Berger、P. A. Breur、A. Brown、A. Brown、E. Brown、S. Bruen- ner、G. Bruno、R. Budnik、L. B¨utikofer、J. Calv´en、J. M. R. Cardoso、M. Cervantes、D. Cichon、D. Coderre、A. P. Colijn、J. Conrad、J. P. Cussonneau、M. P. Decowski、P. de Perio、P. Di Gangi、A. Di Gio- vanni、S. Diglio、G. Eurin、J. Fei、A. D. Ferella、A. Fieguth、W. Fulgione、A. Gallo Rosso、M. Gal- loway、F. Gao、M. Garbini、R. Gardner、C. Geis、L. W. Goetzke、L. Grandi、Z. Greene、C. Grignon、C. Hasterok、E. Hogenbirk、J. Howlett、R. Itay、B. Kaminsky、S. Kazama、G. Kessler、A. Kish、H. Landsman、R. F. Lang、D. Lellouch、L. Levin- son、Q. Lin、S. Lindemann、M. Lindner、F. Lombardi、J. A. M. Lopes、A. Manfredini、I. Maris、T. Mar- rod´an Undagoitia、J. Masbou、F. V. Massoli、D. Masson、D. Mayani、M. Messina、K. Micheneau、A. Molinario、K. Mor°a、M. Murra、J. Naganoma、K. Ni、U. Ober- lack、P. Pakarha、B. Pelssers、R. Persiani、F. Pias- tra、J. Pienaar、V. Pizzella、M.-C. Piro、G. Plante、N. Priel、L. Rauch、S. Reichard、C. Reuter、B. Riedel、A. Rizzo、S. Rosendahl、N. Rupp、R. Saldanha、J. M. F. dos Santos、G. Sartorelli、M. Scheibelhut、S. Schindler、J. Schreiner、M. Schumann、L. Scotto Lav- ina、M. Selvi、P. Shagin、E. Shockley、M. Silva、H. Sim- gen、M. v. Sivers、A. Stein、S. Thapa、D. Thers、A. Tiseni、G. Trinchero、C. Tunnell、M. Vargas、N. Up- ole、H. Wang、Z. Wang、Y. Wei、C. Weinheimer、J. Wulf,

J. Ye、Y. Zhang 和 T. Zhu（XENON 合作组），《XENON1T 实验首次暗物质搜索结果》，《物理评论快报》119，181301（2017）。[35] C. E. Aalseth、P. S. Barbeau、N. S. Bowden、B. Cabrera- Palmer、J. Colaresi、J. I. Collar、S. Dazeley、P. de Lurgio、J. E. Fast、N. Fields、C. H. Greenberg、T. W. Hoss- bach、M. E. Keillor、J. D. Kephart、M. G. Marino、H. S. Miley、M. L. Miller、J. L. Orrell、D. C. Rad- ford、D. Reyna、O. Tench、T. D. Van Wechel、J. F. Wilkerson 和 K. M. Yocum（CoGeNT 合作组），《使用 p型点接触锗探测器搜索轻质量暗物质的结果》，《物理评论快报》106，131301（2011）。[36] G. Adhikari、P. Adhikari、E. B. de Souza、N. Carlin、S. Choi、M. Djamal、A. C. Ezeribe、C. H. Ha、I. Hahn、A. J. Hubbard 等（COSINE-100 合作组），《使用碘化钠探测器搜索暗物质相互作用的实验》，《自然》564，83（2018）。[37] G. Kane 和 S. Watson，《暗物质与大型强子对撞机：有何联系？》，Mod. Phys. Lett. A 23，2103（2008）。[38] J. Preskill、M. B. Wise 和 F. Wilczek，《不可见轴子的宇宙学》，《物理快报 B》120，127（1983）。[39] L. F. Abbott 和 P. Sikivie，《不可见轴子的宇宙学界限》，《物理快报 B》120，133（1983）。[40] M. Dine 和 W. Fischler，《并非无害的轴子》，《物理快报 B》120，137（1983）。[41] S. Weinberg，《一种新的轻玻色子？》，《物理评论快报》40，223（1978）。[42] F. Wilczek，《瞬子存在时强 $\mathcal{P}$ 与 $\mathcal{T}$不变性的问题》，《物理评论快报》40，279（1978）。[43] R. D. Peccei 和 H. R. Quinn，《赝粒子存在时的 CP 守恒》，《物理评论快报》38，1440（1977）。[44] J. E. Kim 和 G. Carosi，《轴子与强 cp 问题》，《现代物理评论》82，557（2010）。[45] C. A. J. O'Hare 和 E. Vitagliano，《利用 cp破坏相互作用确定轴子参数范围》，Physical Review D 102，115026（2020）。[46] L. Di Luzio、M. Giannotti、E. Nardi 和 L. Visinelli，《QCD 轴子模型的全景》，《物理报告》870，1（2020），QCD 轴子模型的全景。[47]A. N. Youdin、D. Krause Jr.、K. Jagannathan、L. R. Hunter 和 S. K. Lamoreaux，《轴子窗口内自旋-质量耦合的上限》，《物理评论快报》77，2170（1996）。[48] W.-T. Ni、S.-s. Pan、H.-C. Yeh、L.-S. Hou 和 J. Wan，《使用顺磁盐和直流超导量子干涉器件搜索轴子样自旋耦合》，《物理评论快报》82，2439（1999）。[49] L. D. Duffy、P. Sikivie、D. B. Tanner、S. J. Asztalos、C. Hagmann、D. Kinion、L. J. Rosen- berg、K. van Bibber、D. B. Yu 和 R. F. Bradley，《暗物质轴子的高分辨率搜索》，Physical Review D 74，012006（2006）。[50] E. Zavattini、G. Zavattini、G. Ruoso、E. Polacco、E. Milotti、M. Karuza、U. Gastaldi、G. Di Domenico、F. Della Valle、R. Cimino、S. Carusotto、G. Cantatore 和 M. Bregant（PVLAS 合作组），《磁场在真空中产生光学旋光的实验观测》，《物理评论快报》96，110406（2006）。[51] G. D. Hammond、C. C. Speake、C. Trenkel 和 A. P. Pat´on，《质量与内禀自旋耦合的短程力的新约束》，《物理评论快报》98, 081101 (2007). [52] S. Hoedl、F. Fleischer、E. Adelberger 和 B. Heckel，《对轴子介导力的改进约束》，《物理评论快报》106, 041801 (2011). [53] K. Barth、A. Belov、B. Beltran、H. Br¨auninger、J. Car- mona、J. Collar、T. Dafni、M. Davenport、L. D. Lella、C. Eleftheriadis、J. Englhauser、G. Fanourakis、E. Ferrer-Ribas、H. Fischer、J. Franz、P. Friedrich、J. Gal´an、J. Garc´ıa、T. Geralis、I. Giomataris、S. Gninenko、H. G´omez、M. Hasinoff、F. Heinsius、D. Hoffmann、I. Irastorza、J. Jacoby、K. Jakov˘ci´c、D. Kang、K. K¨onigsmann、R. Kotthaus、K. Kousouris、M. Kr˘cmar、M. Kuster、B. Laki´c、A. Liolios、A. Ljubi˘ci´c、G. Lutz、G. Luz´on、D. Miller、T. Pa- paevangelou、M. Pivovaroff、G. Raffelt、J. Redondo、H. Riege、A. Rodr´ıguez、J. Ruz、I. Savvidis、Y. Se- mertzidis、L. Stewart、K. V. Bibber、J. Vieira、J. Villar、J. Vogel、L. Walckiers 和 K. Zioutas，《CAST对轴子-电子耦合的限制》，《宇宙学与天体粒子物理杂志》2013 (05), 010. [54] P. Pugnat、R. Ballou、M. Schott、T. Husek、M. Sulc、G. Deferne、L. Duvillaret、M. Fin- ger、L. Flekova、J. Hosek 等，《利用 OS- QAR 激光实验搜索弱相互作用亚电子伏特粒子：结果与展望》，《欧洲物理学杂志C辑》74, 3027 (2014). [55] V. Flambaum、H. Tran Tan、I. Samsonov、Y. Stadnik 和 D. Budker，《利用原子共振探测和产生轴子》，《现代物理学国际杂志A辑》33, 1844030 (2018). [56] T. S. Roussy、D. A. Palken、W. B. Cairncross、B. M. Brubaker、D. N. Gresh、M. Grau、K. C. Cossel、K. B. Ng、Y. Shagam、Y. Zhou、V. V. Flambaum、K. W. Lehn- ert、J. Ye 和 E. A. Cornell，《实验约束了跨越七个数量级质量范围的类轴子粒子》，《物理评论快报》126, 171301 (2021). [57] D. Aybas、J. Adam、E. Blumenthal、A. V. Gramolin、D. Johnson、A. Kleyheeg、S. Afach、J. W. Blanchard、G. P. Centers、A. Garcon、M. Engler、N. L. Figueroa、M. G. Sendra、A. Wickenbrock、M. Law- son、T. Wang、T. Wu、H. Luo、H. Mani、P. Mauskopf、P. W. Graham、S. Rajendran、D. F. J. Kimball、D. Bud- ker 和 A. O. Sushkov，《利用固态核磁共振搜索类轴子暗物质》，《物理评论快报》126, 141802 (2021). [58] C. B. Adams、N. Aggarwal、A. Agrawal、R. Balafendiev、C. Bartram、M. Baryakhtar、H. Bekker、P. Belov、K. K. Berggren、A. Berlin、C. Boutan、D. Bowring、D. Budker、A. Caldwell、P. Carenza、G. Carosi、R. Cervantes、S. S. Chakrabarty、S. Chaudhuri、T. Y. Chen、S. Cheong、A. Chou、R. T. Co、J. Conrad、D. Croon、R. T. D'Agnolo、M. Demarteau、N. DePorzio、M. Descalle、K. Desch、L. D. Luzio、A. Diaz-Morcillo、K. Dona、I. S. Drachnev、A. Droster、N. Du、K. Dunne、B. D¨obrich、S. A. R. Ellis、R. Essig、J. Fan、J. W. Foster、J. T. Fry、A. G. Rosso、J. M. G. Barcel´o、I. G. Irastorza、S. Gard- ner、A. A. Geraci、S. Ghosh、B. Giaccone、M. Giannotti、B. Gimeno、D. Grin、H. Grote、M. Guzzetti、M. H. Aw- ida、R. Henning、S. Hoof、G. Hoshino、V. Irsic、K. D. Ir- win、H. Jackson、D. F. J. Kimball、J. Jaeckel、K. Jakov- cic、M. J. Jewell、M. Kagan、Y. Kahn、R. Khatiwada、S. Knirck、T. Kovachy、P. Krueger、S. E. Kuenstner、N. A. Kurinsky、R. K. Leane、A. F. Leder、C. Lee、K. W. Lehnert、E. W. Lentz、S. M. Lewis、J. Liu、M. Lynn,

B. Majorovits、D. J. E. Marsh、R. H. Maruyama、B. T. McAllister、A. J. Millar、D. W. Miller、J. Mitchell、S. Morampudi、G. Mueller、S. Nagaitsev、E. Nardi、O. Noroozian、C. A. J. O'Hare、N. S. Oblath、J. L. Ouellet、K. M. W. Pappas、H. V. Peiris、K. Perez、A. Phipps、M. J. Pivovaroff、P. Qu´ılez、N. M. Ra- pidis、V. H. Robles、K. K. Rogers、J. Rudolph、J. Ruz、G. Rybka、M. Safdari、B. R. Safdi、M. S. Safronova、C. P. Salemi、P. Schuster、A. Schwartzman、J. Shu、M. Simanovskaia、J. Singh、S. Singh、K. Sinha、J. T. Sinnis、M. Siodlaczek、M. S. Smith、W. M. Snow、A. V. Sokolov、A. Sonnenschein、D. H. Speller、Y. V. Stad- nik、C. Sun、A. O. Sushkov、T. M. P. Tait、V. Takhis- tov、D. B. Tanner、F. Tavecchio、D. J. Temples、J. H. Thomas、M. E. Tobar、N. Toro、Y. D. Tsai、E. C. van Assendelft、K. van Bibber、M. Vandegar、L. Visinelli、E. Vitagliano、J. K. Vogel、Z. Wang、A. Wickenbrock、L. Winslow、S. Withington、M. Wooten、J. Yang、B. A. Young、F. Yu、K. Zhou 和 T. Zhou，《轴子暗物质》（2023），arXiv:2203.14923 [hep-ex]。[59] A. Arza 和 E. Todarello，《用于轴子暗物质探测的回声方法》，Symmetry 13, 10 3390 13112150 2021 . /sym ( )。[60] Y. Wang、H. Su、M. Jiang、Y. Huang、Y. Qin、C. Guo、Z. Wang、D. Hu、W. Ji、P. Fadeev、X. Peng 和 D. Budker，《利用自旋放大器对轴子窗口内的轴子和类轴子粒子设定限值》，《物理评论快报》129, 051801 (2022). [61] M. E. Tobar、C. A. Thomson、W. M. Campbell、A. Quiskamp、J. F. Bourhill、B. T. McAllister、E. N. Ivanov 和 M. Goryachev，《比较不同电磁晕圈探测器对轴子暗物质和高频引力波的仪器谱灵敏度》，Symmetry 14, 10.3390/sym14102165 (2022). [62] H. Zhang，《轴子星》，Symmetry 12, 10 3390 12010025 2020 . /sym ( )。[63] P. W. Graham 和 S. Rajendran，《利用冷分子探测轴子暗物质》，Physical Review D 84, 055013 (2011). [64] P. W. Graham 和 S. Rajendran，《直接探测轴子暗物质的新观测量》，Physical Review D 88, 035023 (2013). [65] D. Budker、P. W. Graham、M. Ledbetter、S. Ra- jendran 和 A. O. Sushkov，《宇宙轴子自旋进动实验（CASPEr）方案》，Physical Review X 4, 021030 (2014). [66] L. V. Skripnikov 和 A. V. Titov，《基于 Lcao 的 $PbTiO_3$ 晶体理论研究：搜索固体中的宇称和时间反演破坏相互作用》，J. Chem. Phys. 145, 054115 (2016). [67] Y. V. Stadnik、V. A. Dzuba 和 V. V. Fla m- baum，《根据原子和分子的电偶极矩，改进对电子与核子之间由类轴子粒子介导的P,T破坏相互作用的限值》，《物理评论快报》120, 013202 (2018)，另见 https://arxiv.org/abs/1708.00486v3 (2020). [68] D. E. Maison、V. V. Flambaum、N. R. Hutzler 和 L. V. Skripnikov，《用于搜索类轴子粒子的氢氧化镱分子电子结构》，《物理评论 A》103, 022813 (2021). [69] D. E. Maison、L. V. Skripnikov、A. V. Oleyn- ichenko 和 A. V. Zaitsevskii，《氢氧化镱分子中的轴子介导电子-电子相互作用》，J. Chem. Phys. 154, 224303 (2021).

[70] D. E. Maison 和 L. V. Skripnikov，轴子样粒子交换诱导的钫原子静态电偶极矩，Phys. Rev. A 105, 032813 (2022年). [71] J. Moody 和 F. Wilczek，新的宏观力？，Physical Review D 30, 130 (1984). [72] I. B. Khriplovich，《原子现象中的宇称不守恒》（Gordon and Breach，纽约，1991）. [73] Y. Y. Dmitriev、Y. G. Khait、M. G. Kozlov、L. N. Labzovsky、A. O. Mitrushenkov、A. V. Shtoff 和 A. V. Titov，包含 $\mathcal{P}$- 和 $\mathcal{P},\mathcal{T}$-奇宇称弱相互作用项的氟化汞和氟化铅分子自旋-转动哈密顿量计算，物理快报 A 167, 280 (1992). [74] L. Visscher、T. J. Lee 和 K. G. Dyall，包含非迭代连通三重激发的相对论非限制耦合簇方法的构建与实现，J. Chem. Phys. 105, 8769 (1996). [75] R. J. Bartlett 和 M. Musia l，量子化学中的耦合簇理论，《现代物理评论》79, 291 (2007). [76] L. V. Skripnikov 和 A. V. Titov，电子电偶极矩搜索中一氧化钍的理论研究：一氧化钍中 $h^3\delta_1$ 的电子性质，J. Chem. Phys. 142, 024301 (2015). [77] L. V. Skripnikov，结合四分量与相对论赝势方法研究电子电偶极矩搜索中的 ThO，J. Chem. Phys. 145, 214301 (2016). [78] L. V. Skripnikov、D. E. Maison 和 N. S. Mosyagin，钫原子中的标量-赝标量相互作用，Phys. Rev. A 95, 022507 (2017). [79] S. F. Boys，电子波函数-I. 一种计算任意分子体系定态的一般方法，数学、物理与工程科学学报 200, 542 (1950). [80] T. Helgaker、P. Jorgensen 和 J. Olsen，《分子电子结构理论》（John Wiley & Sons，2013）. [81] S. Ten-no，显式相关斯莱特型 geminal 理论的开创，Chem. Phys. Lett. 398, 56 (2004). [82] L. E. McMurchie 和 E. R. Davidson，笛卡尔高斯函数上的单电子和双电子积分，《计算物理学杂志》26, 218 (1978). [83] S. Obara 和 A. Saika，高效递归计算笛卡尔高斯函数上的分子积分，J. Chem. Phys. 84, 3963 (1986). [84] P. M. W. Gill、B. G. Johnson 和 J. A. Pople，高斯 s 函数上的双电子排斥积分，国际量子化学杂志 40, 745 (1991). [85] J. A. Pople 和 W. J. Hehre，涉及收缩高斯基函数的电子排斥积分计算，《计算物理学杂志》27, 161 (1978). [86] M. Head-Gordon 和 J. A. Pople，使用递推关系计算双电子高斯积分及其积分导数的方法，J. Chem. Phys. 89, 5777 (1988). [87] T. P. Hamilton 和 H. F. Schaefer，直接自洽场程序中的双电子积分计算新变化，Chem. Phys. 150, 163 (1991). [88] S. Ten-no，一种计算收缩高斯型函数电子排斥积分的高效算法，Chem. Phys. Lett. 211, 259 (1993). [89] T. Yanai、K. Ishida、H. Nakano 和 K. Hirao，面向一般收缩方案的电子排斥积分新算法，国际量子化学杂志 76, 396 (2000). [90] H. Nakai 和 M. Kobayashi，新算法

用于快速计算电子排斥积分：初等基组算法，Chem. Phys. Lett. 388, 50 (2004). [91] E. F. Valeev，Libint：用于计算高斯函数上多体算符分子积分的库，http://libint.valeyev.net/ (2022年)，版本 2.8.0.[92]M. Dupuis、J. Rys 和 H. F. King，高斯基函数上的分子积分计算，J. Chem. Phys. 65, 111 (1976). [93] H. F. King 和 M. Dupuis，利用 Rys 多项式进行数值积分，《计算物理学杂志》21, 144 (1976). [94] J. Rys、M. Dupuis 和 H. F. King，使用 Rys求积法计算电子排斥积分，J. Comput. Chem. 4, 154 (1983). [95] R. Lindh、U. Ryu 和 B. Liu，Rys 求积的约简乘法方案，以及基于辅助函数的双电子积分计算新递推关系，J. Chem. Phys. 95, 5889 (1991). [96] S. Ten-no，使用解析 Slater 型 geminal 的二阶默勒-普莱塞特微扰理论新实现，J. Chem. Phys. 126, 014108 (2007). [97] T. Shiozaki，使用定制高斯求积计算 Slater 型 geminal 积分，Chem. Phys. Lett. 479, 160 (2009). [98] A. Kumar、F. Neese 和 E. F. Valeev，用于精确处理含数百个原子的开壳层分子的显式相关耦合簇方法，J. Chem. Phys. 153, 094105 (2020年). [99] M. K´allay、R. A. Horv´ath、L. Gyevi-Nagy 和 P. R. Nagy，尺寸一致的显式相关三重激发修正，J. Chem. Phys. 155, 034107 (2021年). [100] M. K´allay、R. A. Horv´ath、L. Gyevi-Nagy 和 P. R. Nagy，通过降低成本的显式相关方法获得扩展分子的基组极限 CCSD(T) 能量，J. Chem Phys. 19, 174 (2023年). [101] R. D. Peccei，强 CP 问题与轴子，载于《轴子：理论、宇宙学与实验搜寻》

，

编者：M. Kuster、G. Raffelt 和 B. Beltr´an（Springer Berlin Heidelberg，柏林、海德堡，2008年），第 3–17 页。[102] K. J. Kelly、S. Kumar 和 Z. Liu，《DUNE 近探测器中重轴子的研究机遇》，Physical Review D 103，095002（2021年）。[103] M. Giannotti、R. Nita 和 E. Welch，《重轴子模型的现象学影响》，AIP Conf Proc 1274，20（2010年）。[104] M. Abe、T. Yanai、T. Nakajima 和 K. Hirao，《狄拉克四分量相对论理论中的四指标变换》，Chem. Phys. Lett. 388，68（2004年）。[105] K. G. Dyall，《Hf–Hg 5d 元素的相对论双ζ、三ζ和四ζ基组》，Theor. Chem. Acc. 112，403（2004年）。[106] K. G. Dyall，《31–118号元素的芯层相关基函数》，Theor. Chem. Acc. 131，1217（2012年）。[107] K. G. Dyall 和 A. S. Gomes，《修订后的 Hf–Hg 5d 元素相对论基组》，Theor Chem Acc. 125，97（2010年）。[108] K. G. Dyall，《H–Ar 轻元素的相对论双ζ、三ζ和四ζ基组》，Theor. Chem. Acc. 135，128（2016年）。[109] A. V. Oleynichenko、A. Zaitsevskii、L. V. Skripnikov 和 E. Eliav，《适用于多电子体系的相对论福克空间耦合簇方法：非对连通三重激发的微扰处理，Symmetry 12, 1101 (2020)。[110] K. C. Cossel, D. N. Gresh, L. C. Sinclair, T. Coffey, L. V. Skripnikov, A. N. Petrov, N. S. Mosyagin, A. V. Titov, R. W. Field, E. R. Meyer, E. A. Cornell, and J. Ye，HfF+的宽带速度调制光谱：迈向电子电偶极矩的测量，Chem. Phys. Lett. 546, 1 (2012)。[111] L. Visscher and K. G. Dyall，采用不同核电荷分布的狄拉克–福克原子电子结构计算，At. Data Nucl. Data Tables 67, 207 (1997)。[112] B. K. Sahoo，对强子和半强子 CP 违背参数的限值及暗力载体在 ^{199}Hg电偶极矩中的作用的改进，Physical Review D 95, 013002 (2017)。[113] H. Gharibnejad and A. Derevianko，暗力与原子电偶极矩，Physical Review D 91, 035007 (2015)。[114] DIRAC，一款相对论从头算电子结构程序，DIRAC19版（2019），由 A. S. P. Gomes、T. Saue、L. Visscher、H. J. Aa. Jensen 和 R. Bast 编写，并由 I. A. Aucar、V. Bakken、K. G. Dyall、S. Dubillard、U. Ekstroem、E. Eliav、T. Enevoldsen、E. Fasshauer、T. Fleig、O. Fossgaard、L. Halbert、E. D. Hedegaard、T. Helgaker、J. Henriksson、M. Ilias、Ch. R. Jacob、S. Knecht、S. Komorovsky、O. Kullie、J. K. Laerdahl、C. V. Larsen、Y. S. Lee、H. S. Nataraj、M. K. Nayak、P. Norman、M. Olejniczak、J. Olsen、J. M. H. Olsen、Y. C. Park、J. K. Pedersen、M. Pernpointner、R. Di Remigio、K. Ruud、P. Salek、B. Schimmelpfennig、B. Senjean、A. Shee、J. Sikkema、A. J. Thorvaldsen、J. Thyssen、J. van Stralen、M. L. Vidal、S. Villaume、O. Visser、T. Winther 和 S. Yamamoto 共同贡献（参见 http://diracprogram.org）。[115] T. Saue、R. Bast、A. S. P. Gomes、H. J. A. Jensen、L. Visscher、I. A. Aucar、R. Di Remigio、K. G. Dyall、E. Eliav、E. Fasshauer、T. Fleig、L. Halbert、E. D. Hedeg˚ard、B. Helmich-Paris、M. Ilia˘s、C. R. Jacob、S. Knecht、J. K. Laerdahl、M. L. Vidal、M. K. Nayak、M. Olejniczak、J. M. H. Olsen、M. Pernpointner、B. Sen- jean、A. Shee、A. Sunaga 和 J. N. P. van Stralen，适用于相对论分子计算的 dirac 程序，J. Chem. Phys. 152, 204104 (2020)。[116] mrcc，m. K´allay、P. R. Nagy、D. Mester、Z. Rolik、G. Samu、J. Csontos、J. Cs´oka、P. B. Szab´o、L. Gyevi-Nagy、B. H´egely、I. Ladj´anszki、L. Szegedy、B. Lad´oczki、K. Petrov、M. Farkas、P. D. Mezei 和 ´a. Ganyecz：mrcc 程序系统：从水到蛋白质的精确量子化学，J. Chem. Phys. 152, 074107 (2020)；mrcc，一套由 M. K´allay、P. R. Nagy、D. Mester、Z. Rolik、G. Samu、J. Csontos、J. Cs´oka、P. B. Szab´o、L. Gyevi-Nagy、B. H´egely、I. Ladj´anszki、L. Szegedy、B. Lad´oczki、K. Petrov、M. Farkas、P. D. Mezei 和 ´a. Ganyecz 编写的量子化学程序。参见 www.mrcc.hu。[117]M. K´allay 和 P. R. Surj´an，耦合簇理论中的高阶激发，J. Chem. Phys. 115, 2945 (2001)。[118] M. K´allay、P. G. Szalay 和 P. R. Surj´an，一种通用的态选择多参考耦合簇算法，J. Chem. Phys. 117, 980 (2002)。[119] D. E. Maison、L. V. Skripnikov 和 D. A. Glazov，类硼氩离子中 g 因子的多体研究，

《物理评论 A》**99**, 042506 (2019)。[120] D. E. Maison、L. V. Skripnikov、V. V. Flambaum 和 M. Grau，搜索 $\mathcal{CP}$-违背的核磁四极矩，使用 $LuOH^+$ 阳离子，J. Chem. Phys.**153**, 224302 (2020)。[121] L. V. Skripnikov，通信：HfF^+ 阳离子的理论研究，以搜索 $\mathcal{T}$，$\mathcal{P}$奇宇称相互作用，J. Chem. Phys. **147**, 021101 (2017)。[122] T. Fleig，$\mathcal{P}$，$\mathcal{T}$奇宇称相互作用、磁超精细相互作用常数及 HfF 激发态寿命$^+$，《物理评论 A》 **96**, 040502(R) (2017)。[123] A. N. Petrov、N. S. Mosyagin、T. A. Isaev 和 A. V. Titov，HfF 的理论研究$^+$，用于搜索电子电偶极矩，《物理评论 A》 **76**, 030501(R) (2007)。[124] A. N. Petrov、N. S. Mosyagin 和 A. V. Titov，关于 HfF 低能电子态和跃迁矩的理论研究$^+$，用于电子电偶极矩搜索，《物理评论 A》 **79**, 012505 (2009)。