arXiv:2601.16756v1 [physics.atom-ph] 23 Jan 2026

摇激 原子 ^{7}铍电子俘获衰变中的激发与摇脱谱

Mauro Guerra,[1], * *Inwook Kim,*[2] *Stephan Friedrich,*[2] *Pedro Amaro,*[1] *Adrien Andoche,*[3] *Gonçalo Baptista,*[4] *Connor Bray,*[5] *Robin Cantor,*[6] *David Diercks,*[7] *Spencer L. Fretwell,*[5] *Abigail Gillespie,*[5]*Ad Hall,*[6] *Cameron N. Harris,*[8] *Jackson T. Harris,*[9] *Leendert M. Hayen,*[10] *Paul Antoine Hervieux,*[11] *Paul Indelicato,*[4] *Geon Bo Kim,*[2] *Kyle G. Leach,*[12] *Annika Lennarz,*[13] *Vincenzo Lordi,*[2] *Peter Machule,*[14] *Andrew Marino,*[5] *David McKeen,*[15] *Xavier Mougeot,*[3] *Daniel Pinheiro,*[1]*Francisco Ponce,*[14] *Chris Ruiz,*[13] *Amit Samanta,*[2] *José Paulo Santos,*[1] *Joseph Smolsky,*[5] *Caitlyn Stone-Whitehead,*[5] *Joseph Templet,*[5] *William K. Warburton,*[9] *Benjamin Waters,*[16] 和 *Jorge Machado*[1], †[1]*LIBPhys, LA-REAL, NOVA FCT,* 里斯本新大学, *2829-516 Caparica,* 葡萄牙[2]劳伦斯利弗莫尔国家实验室, 利弗莫尔, *CA 94550,* 美国[3]巴黎-萨克雷大学, 法国原子能和替代能源委员会, *List,* 亨利·贝克勒尔国家实验室 *(LNE-LNHB), 91120* 帕莱索, 法国 [4]卡斯特勒-布罗斯尔实验室, 索邦大学, 巴黎, 法国[5]物理系, 科罗拉多矿业学院, 戈尔登, *CO 80401,* 美国[6]*STAR Cryoelectronics LLC,* 圣菲, *NM 87508,* 美国[7]共享仪器设施, 科罗拉多矿业学院, 戈尔登, *CO 80401,* 美国[8]*Ciambrone*放射化学实验室, 帕特里克太空军基地, *FL 32925,* 美国[9]*XIA LLC,* 奥克兰, *CA 94601,* 美国[10]卡昂亚原子与宇宙学实验室, 卡昂国立高等工程师学院, 卡昂大学, 法国国家科学研究中心/核与粒子物理研究所, *14000* 卡昂, 法国 [11]斯特拉斯堡大学, 法国国家科学研究中心, 斯特拉斯堡材料物理与化学研究所, *UMR 7504, F-67000* 斯特拉斯堡, 法国 [12] 物理与天文系 , 麦克马斯特大学 , 汉密尔顿 , 安大略省 *L8S 4M1,* 加拿大 [13]*TRIUMF,* 温哥华 , *BC V6T 2A3,* 加拿大[14]太平洋西北国家实验室, 里奇兰, *WA 99354,* 美国[15]稀有同位素束流设施, 密歇根州立大学, 东兰辛, *MI 48824,* 美国[16] *Maybell Quantum,* 丹佛, *CO 80221,* 美国 （日期：*2026*年*1*月*26*日）

目前，针对亚兆电子伏特惰性中微子存在性的实验室最严格限制，来自嵌入超导传感器中的放射性 ^{7}铍的衰变能谱学。系统不确定度主要源于对电子摇激谱和摇脱谱的建模；这些模型并非基于最先进的原子理论，也未考虑电子关联或相对论效应。我们采用多组态狄拉克-福克形式，从头算获得关联波函数，并计算原子 ^{7}铍电子俘获衰变中的所有单重和双重摇激过程。模拟结果能够解释部分但并非全部观测到的能谱特征，这可能是因为嵌入其中的^{7}铍的波函数受到钽传感器材料的影响。新模型还表明，此前对钽中 ^{7}铍的 L/K 电子俘获比略有低估，因此将先前的数值 0.070(7) 修订为 0.0756(20)。

关键词：核反冲光谱学、电子结构、摇脱、摇激、BeEST实验

I. 引言

粒子物理学的标准模型（SM）是一个极为成功的理论框架，用于理解宇宙的基本组成成分及其相互作用。然而，尽管它取得了诸多成就，却未将引力纳入其中，也无法解释宇宙中的暗物质或重子不对称性 [1]。中微子领域或许是寻找超出标准模型的物理学（BSM）最有希望的方向，因为最简版本的标准模型并未解释中微子质量 [2]。一些超出标准模型的物理学模型假设存在右手惰性中微子（ν_S），它们不参与弱相互作用，只通过引力和混合发生相互作用，且质量尺度几乎可以是任意大小 [3]。

铍超导隧道结电子俘获（BeEST）实验目前对亚 MeV 质量范围内惰性中微子的存在设定了最严格的限制 [4]。在这项实验中，半衰期为 53.284 ± 0.016天 [5]，的放射性 ^{7}铍被直接植入高分辨率超导隧道结传感器中。当^{7}铍发生电子俘获衰变时，中微子会逸出，但可以精确测量反冲 ^{7}锂子核的能量，从而推断中微子质量。由于 ^{7}铍具有较大的

* 通信邮箱：mguerra@fct.unl.pt
† 通信邮箱：jfd.machado@fct.unl.pt

Q_{EC}值（862 keV）、 [6], 相对较高的反冲能（∼57 电子伏特），以及简单的原子和核结构，因此这种纯电子俘获衰变的原子核非常适合通过反冲测量研究中微子。在这项实验中，放射性 ^{7}铍被植入 TRIUMF-ISAC 设施中的高计数率超导隧道结传感器。随后将传感器运送至劳伦斯利弗莫尔国家实验室（LLNL），以高能量分辨率（1–2 电子伏特）测量 ^{7}铍电子俘获衰变产生的衰变产物。信号由 ^{7}锂反冲能以及原子壳层弛豫能量组成；后者来自被俘获的电子，或由摇激和摇脱通道产生的其他激发态。由于 ^{7}铍可以俘获来自 K 壳层或 L 壳层的电子，而 ^{7}锂子核可以处于基态或第一激发态，因此活性中微子发射产生的总能谱有四个主峰：一个对应 K 层俘获并衰变至 ^{7}锂核基态（K-GS），一个对应 K 层俘获并衰变至 ^{7}锂* 核激发态（K 壳层激发态），以及对应的两个 L 壳层俘获峰 L-GS 和 L-ES。较重的惰性中微子会降低 ^{7}锂反冲能，并在能谱中产生额外峰，作为其特征信号。

BeEST实验对 ν_S 的灵敏度取决于对含活性中微子衰变产生的总能谱进行拟合的准确性。目前，这些拟合的系统误差主要源于用于描述 ^{7}Be衰变时电子摇激（SU）和摇脱（SO）至束缚态及非束缚态的函数。这些效应会在能谱中产生额外峰，并在所有峰的高能侧形成高能尾部；这是因为电子俘获后锂原子发生激发（SU）或电离（SO）时会产生多余能量，而这些能量将沉积在探测器内。此前对BeEST实验数据的拟合使用了不包含相对论效应和多电子效应的函数来描述SO尾部，因此不适用于高精度实验。此外，对测得的K-GS峰进行拟合需要三个独立分量，而且K-GS峰和L-GS峰的展宽都远大于STJ传感器的能量分辨率 [7]。准确描述摇激和摇脱对其他超越标准模型物理搜索也很重要。例如，摇激和摇脱降低了无中微子双电子俘获对共振条件的要求，并使非共振原子核的俘获率显著提高 [8]。类似地，它们也会影响中微子质量测量。例如，在 ^{163}Ho的电子俘获衰变中，Ho-Dy波函数重叠的不确定度若为10%，摇脱概率就可能相差两个数量级 [9]。

在本研究中，我们采用多组态狄拉克–福克（MCDF）形式计算了 ^{7}铍的原子结构，以及 ^{7}锂子原子的所有相关能级和其单电离、双电离离子。随后，我们根据母原子与子原子波函数的重叠，计算摇激和双空穴激发的概率。电子保持在初始状态且量子数不变的概率

用于提取总摇脱概率并对能谱进行归一化。所有计算均在突然近似下进行 [10], ，并假设只有单极跃迁。此外，我们通过将基组空间扩展至 $4s$轨道，并纳入单激发和双激发，在多组态狄拉克-福克计算中考虑了电子关联。最后，鉴于 BeEST实验提供的数据集统计量日益增高，我们还计算了双重摇激和双重双空穴激发等低概率事件的发生率。接下来的章节将介绍我们在BeEST实验背景下进行的从头算 计算及对结果所作的解析近似。我们利用这些结果改进惰性中微子亚 MeV 质量范围搜索中的本底建模，并更精确地提取 Ta 中 ^{7}铍的 L/K俘获比。

II. 理论方法

本研究的计算采用多组态狄拉克-福克框架，并使用由 Desclaux 和 Indelicato[11, 12]开发的从头算 多组态狄拉克-福克通用矩阵元（MCD-FGME）代码。在 MCDFGME 中，计算从所谓的无对产生 哈密顿量 $\mathcal{H}^{np}$ 出发，其中使用投影算符，将电子 - 电子相互作用有效地投影到 $E > mc^2$ 连续态，

$$\mathcal{H}^{np} = \sum_{i=1}^{N_e} \mathcal{H}_D(r_i) + \sum_{i<j} \Lambda_{ij}^{++} V_{ij} \Lambda_{ij}^{++}. \qquad (1)$$

这里， $\mathcal{H}_D(r_i)$ 是单电子狄拉克哈密顿量，而 V_{ij} 表示通过某种合适算符（例如库仑相互作用或布赖特相互作用）描述的电子-电子相互作用。

投影算符 $\Lambda_{ij}^{++} = P_i^+ P_j^+$ 用于单电子本征函数，将其投影到正能量波函数上，从而避免正、负能量连续态之间的耦合。库仑-布赖特算符可写为

$$\begin{aligned} V_{ij} &= \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} \cos(\omega_{ij} r_{ij}) \\ &+ (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\nabla}_i)(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \boldsymbol{\nabla}_j) \frac{\cos(\omega_{ij} r_{ij}) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}}, \end{aligned} \qquad (2)$$

其中， $r_{ij} = (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$ 为电子间距， ω_{ij} 为两个电子之间交换的光子的能量， $\boldsymbol{\alpha}_i$ 为狄拉克矩阵。

第一项 $1/r_{ij}$ 描述通常的库仑相互作用，第二项是冈特相互作用，而

剩余项是由光速有限所产生的最低阶迟滞相互作用。这些势包含在自洽场计算中，而其余布赖特迟滞项则作为微扰纳入计算。计算还包括量子电动力学（QED）辐射修正，例如自能和真空极化 [13]。单电子自能采用 Mohr 和 Kim 提出的表达式计算 [14, 15]，并进一步修正有限核尺寸的影响 [16]。采用 Welton 形式体系计算其余电子造成的自能屏蔽 [17]。对于真空极化，Uelhing 势以自洽方式纳入所有阶，而 Wichmann-Kroll 和 Kallen-Sabry 项则作为微扰计算 [18]。最新版本的 MCDFGME 代码（V2025v1）已实现 Wichmann-Kroll 势的全阶计算 [19]。少电子原子和离子的 QED 计算精度见[20]。核尺寸效应通过托马斯-费米核模型计算，原子质量和电荷半径的测量值分别取自 Audi 等人 [21] 和 Angeli [22], 的表格。

A. 相对论态函数

多组态狄拉克-福克方法中的波函数通过变分原理计算，并由组态态函数（CSF）的线性组合构成。反过来，这些组态态函数本身又表示为狄拉克旋量的斯莱特行列式的线性组合，

$$\Phi^{\eta}_{\Pi JM}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_{N_e}) = \sum_{q\geq 1} C^{\eta}_{q} \begin{vmatrix} \phi^{q}_{n_1\kappa_1 m_1}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi^{q}_{n_{N_e}\kappa_{N_e} m_{N_e}}(\vec{r}_1) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \phi^{q}_{n_1\kappa_1 m_1}(\vec{r}_{N_e}) & \cdots & \phi^{q}_{n_{N_e}\kappa_{N_e} m_{N_e}}(\vec{r}_{N_e}) \end{vmatrix}, \quad (3)$$

其中四分量狄拉克旋量为 [18]

$$\phi_{n\kappa m}(r) = \frac{1}{r}\begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r)\chi_{\kappa\mu}(\theta,\phi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\chi_{-\kappa\mu}(\theta,\phi) \end{bmatrix}. \quad (4)$$

这里，$\chi_{\kappa\mu}(\theta,\ \phi)$ 是泡利球旋量，n是主量子数，κ是狄拉克量子数，m 是总角动量投影，μ 是 J_z的本征值。线性组合的系数和组态态函数的数量通过施加约束获得：解必须是哈密顿量 H、总角动量算符 J^2和投影算符 J_z 的本征函数。表征波函数所需的所有其他量子数均由公式 3 中的 η 表示。

多组态计算是通过将原子态函数（ASF）构造为对应于基态和激发态电子组态的组态态函数的线性组合而得到的一种推广：

$$\Psi_{\Pi JM}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_{N_e}) = \sum_{\eta=1}^{N_{\rm CSF}} D_\eta \Phi^{\eta}_{\Pi JM}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_{N_e}). \quad (5)$$

该方法在 MCDFGME代码中通过求和组态态函数实现，这些组态态函数涵盖价电子到某一主量子数 $n \geq n_{\rm valence}$以内的单激发和双激发。基组的扩展会带来计算成本，其增长速度随纳入的组态态函数数量迅速上升；而组态态函数的数量又会随 n迅速增加。这一影响对原子计算尤为显著，特别是对于开壳层原子系统中的价电子。事实上，即使不纳入单激发和双激发，每个原子态函数（ASF）也都是具有相同角动量的jj 组态态函数的线性组合，因为组态态函数是在jj 耦合方案下计算的，而 MCDFGME 的输入则以LS 组态形式给出。为简便起见，以下各节将用其 $n\ell j$ 量子数来描述波函数 $\Psi_{\Pi JM}(\vec{r}_1,\ \cdots,\ \vec{r}_{N_e})$，并将其记作 $\psi(n\ell j)$。本研究使用的 MCDFGME V2025v1 [19]版本是专为 BeEST 开发的，因为它现在可以计算核电荷不同的原子和离子之间的摇激概率。

B. 原子摇激过程

原子中的摇激过程发生于原子电子感受到的势突然改变时，此时它们的波函数不再是新哈密顿量的本征态。俘获 K 壳层或 L 壳层电子后，原子处于受扰状态，每个剩余电子的势能都与俘获过程发生前不同。在几个阿秒内，一个或多个电子有可能从原子系统中被摇出，而其他电子则弛豫至所形成离子的基态。初始系统的波函数可以展开为新系统本征态的线性组合

$$|\psi_i(n\ell j)\rangle = \sum_{n'\ell' j'} c_{if}|\psi_f(n'\ell' j')\rangle \quad (6)$$

其中，$c_{if} = \langle\psi_f(n'\ell' j')|\psi_i(n\ell j)\rangle$ 表示初始系统本征态与电子俘获后系统本征态之间的重叠。量 $|c_{if}|^2$ 表示系统初始处于状态 $\psi_i(n\ell j)$时，在核力导致势突然改变后最终处于末态 $\psi_f(n'\ell' j')$的概率

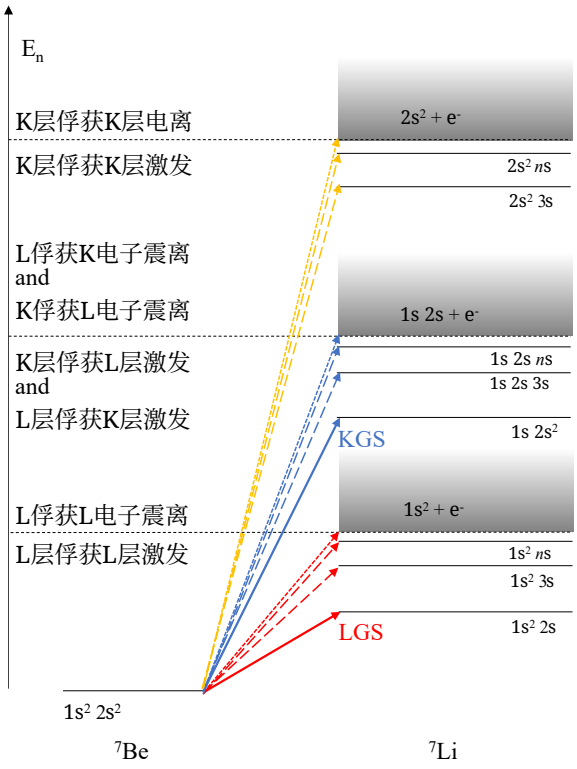

图1. 电子俘获后的原子过程示意图。实线表示产生 BeEST 能谱中两个主要峰（K-GS、L-GS）及其对应激发态（K 壳层激发态、L-ES）的俘获事件。虚线表示摇激通道，点线表示无论发生K层俘获还是L俘获，K层和L层电子摇脱的起始过程。

电子俘获。这个末态可以涵盖新哈密顿量的所有允许态以及连续态波函数。一个或多个电子跃迁至连续态波函数的过程称为摇脱。另一方面，摇激描述的是一个或多个电子被激发至更高的束缚态，而其他电子重新排列成更有利组态的过程。通常在突然近似（SA）框架内计算这两种效应的联合概率 [23]。

在 BeEST实验中，^{7}Be发生电子俘获后，SU和SO都可能以不同概率发生；每种过程所需的能量都会降低发射出的中微子的能量。鉴于 ^{7}Be衰变的 Q_{EC} 值很高，且动量守恒，核反冲能的变化可以忽略不计。图1示意总结了 ^{7}Be电子俘获中的SU和SO过程。所有这些过程均以箭头表示，箭头从 ^{7}Be基态出发，终止于在探测器内重新结合后形成的某个 ^{7}Li态。图1右栏中，实线表示由简单俘获产生的中间态（分别对应L俘获和K俘获的$1s^22s$ 和 $1s2s^2$ ），以及在K或L俘获后有一个K或L电子发生摇激的SU通道。SO过程则以灰色表示，即在K或L俘获后，K或L电子从原子中被击出。左栏在各过程发生的能区标出了所有过程。

C. 总摇激概率

在突然近似（SA）下，量子数为（$n\ell j$）的电子的总摇激概率 $P^{\mathrm{shake}}_{n\ell j}$，通过从总概率空间中减去衰变后壳层中的所有$N_{n\ell j}$ 电子均保留其量子数的概率来计算。

$$P^{\text{摇跃}}_{n\ell j} = 1 - \left|\langle\psi_{f\,(n\ell j)}|\psi_{i\,(n\ell j)}\rangle\right|^{2N_{n\ell j}} - N_{n\ell j}P^{\mathrm{forb}}_{n\ell j}, \quad (7)$$

其中

$$P^{\mathrm{forb}}_{n\ell j} = \sum_{(n'\ell j)\neq(n\ell j)} \frac{N_{n'\ell j}}{2j+1}\left(\left|\langle\psi_{f\,(n'\ell j)}|\psi_{i\,(n\ell j)}\rangle\right|^2\right). \quad (8)$$

这里的 $\psi_{f\,(n'\ell j)}$ 是已完全或部分占据的壳层，因此 P_{forb} 会考虑跃迁至泡利不相容原理所禁止能级的概率，而这部分概率必须从总概率空间中移除。量 $N_{n'\ell j}$ 和 $N_{n\ell j}$ 指相应的俘获后壳层占据数 [24]。这与 Carlson–Nestor约定不同，后者采用中性原子占据数 [23]。因此，摇激概率表示由同一电子俘获事件产生的所有原子通道中的比例。由此，若要与实验进行比较，就需要在拟合程序中区分所有原子过程，并将同一俘获事件产生的所有过程之和归一化为 1。

公式 7 中的概率曾多次被错误地解释为：原子势突然改变后，一个 电子跃迁到另一个束缚态或连续态的概率 [10]。事实上，它表示给定轨道上的一个或多个 电子被摇激到更高能态或摇脱的概率。尽管单个电子的摇激概率通常远高于多个电子同时被摇激的概率 [25], ，但在某些原子系统中，双重和三重摇激可占总摇激概率的 10%–30%。因此，不应将这些效应视为弱核衰变中的高阶修正，

而应视为突然近似下的主导阶项。多重摇激概率可由总摇激概率计算得出，这与根据若干独立试验计算任意数量成功结果的概率是类似的问题。对于从任意壳层移除一个电子的概率，我们可以采用二项分布概率，并假设壳层中的每个 $N_{n\ell}$ 电子因哈密顿量的改变而被移出的可能性相同。因此，多重摇激概率可由 [24]

$$P_{n\ell j}(n_e) = \binom{N_{n\ell j}}{n_e} \Big(1 - (1 - P_{\text{shake}})^{\frac{1}{N_{n\ell j}}}\Big)^{n_e} \times (1 - P_{\text{shake}})^{\frac{N_{n\ell j} - n_e}{N_{n\ell j}}}, \quad (9)$$

其中， n_e 是壳层$N_{n\ell j}$ 中摇激电子的数量， P_{shake} 是该壳层中至少一个 电子发生摇激的概率（公式 7）。此表达式可用于计算同一轨道的单摇激概率或多重摇激。不同壳层电子的双摇激概率，则按照 [24], 中的步骤计算，即将跃迁涉及的各壳层的单摇激概率相乘。

D. 摇激

在突然近似中，可以从第一性原理计算电子俘获同时使另一个电子跃迁到激发能级的概率。该概率就是电子俘获前的初始波函数与电子俘获后的最终波函数之间重叠的模平方。由于在突然近似条件下，这一过程被视为一个两步过程，因此这些激发必须保持原子波函数的宇称。因此，若一个电子可由波函数 $\psi_{i\,(n\ell j)}$描述，则任意一个具有该波函数的 $N_{n\ell j}$ 电子被激发到另一个由波函数$\psi_{f\,(n'\ell j)}$ 描述的能级的概率为

$$P_{n\ell j}^{\text{shake-up}} = N_{n\ell j} \left| \langle \psi_{f\,(n'\ell j)} | \psi_{i\,(n\ell j)} \rangle \right|^2. \quad (10)$$

E. 摇脱

摇脱概率的计算方式与摇激概率 10 类似，只是在这种情况下，连续态电子波函数被用作末态波函数。该过程涉及计算微分概率在从自由电子的无穷多个能级一直到反应 Q_{EC} 值范围内的积分。鉴于连续态波函数的归一化依赖于能量，因此只能计算摇脱分布随电子能量变化的形状。不过，如果总摇激概率和摇激概率已确定，则可通过从总摇激概率中减去单次和多次摇激跃迁的贡献，得到摇脱的总概率。该值代表一个或多个电子发生双空穴激发的总概率，从而能够从第一性原理计算摇脱分布的相对面积。

这些概率的函数形式可以按照与摇激概率类似的方法，计算其随能量变化的关系。对于 ^{7}铍的电子俘获，摇脱谱由束缚态 ^{7}Be波函数与连续态波函数之间重叠的模平方计算得出；连续态波函数对应出射电子的不同动能，并是在 ^{7}Li离子的势中计算的，适用于俘获K层或L层电子后出射K层或L层电子的情形。为说明这一方法，图2展示了 ^{7}Be中 $2s$ 束缚电子的径向波函数，以及在带有K 壳层俘获空穴和由出射L 壳层电子产生的 $2s$ 空穴的 ^{7}Li离子势中，三个不同动能下的连续态电子波函数。正如预期，由于连续态波函数具有振荡特性，随着动能增加，重叠会减小，从而形成特定的摇脱谱形状。由于这种形状主要由束缚电子的波函数决定，K层和L层摇脱的谱形将有所不同。因此，在本实验中，四种摇脱通道将产生四种不同的谱形： $1s^2 2s^2 \to 2s^2 + e^-$ 对应K层俘获后的K层摇脱， $1s^2 2s^2 \to 1s 2s + e^-$ 对应K层俘获后的L层摇脱， $1s^2 2s^2 \to 1s 2s + e^-$ 对应L俘获后的K层摇脱， $1s^2 2s^2 \to 1s^2 + e^-$ 对应L俘获后的L层摇脱。图2中的灰色虚线表示3.3埃的Ta晶格常数，以显示子核离子势使连续态波函数发生畸变的范围，并与Ta基质中其他原子的相对位置进行比较。其他值得关注的量包括1.46埃的钽共价半径 [26] 及其原子半径；根据计算时是否采用相对论波函数，其取值范围为1.55埃 [27] 至2.00埃 [28] 。图1展示了所有摇脱跃迁。

III. 结果

准确理论建模能级和 SU/SO 概率，对于解读 BeEST 能谱至关重要。这些效应源于电子俘获过程中核势的突然变化，可能导致电子激发（SU）或电离（SO），从而将能谱强度重新分配到

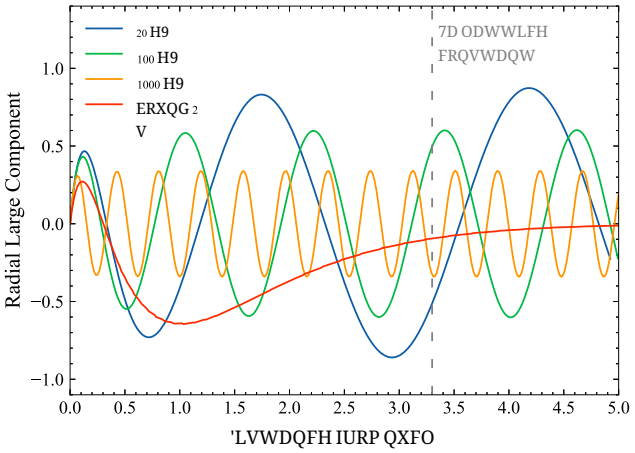

图 2. 基态 $2s$铍原子中束缚电子的径向波函数 $1s^2 2s^2$ ，以及基态 L 俘获后动能为 20 电子伏特、100 电子伏特或 1000 电子伏特的电子连续态波函数（在 ^{7}锂$^+$ 势中计算）。$1s^2 + e^-$。3.3 埃处的灰色虚线表示 BeEST实验中 Ta 宿主的晶格常数。

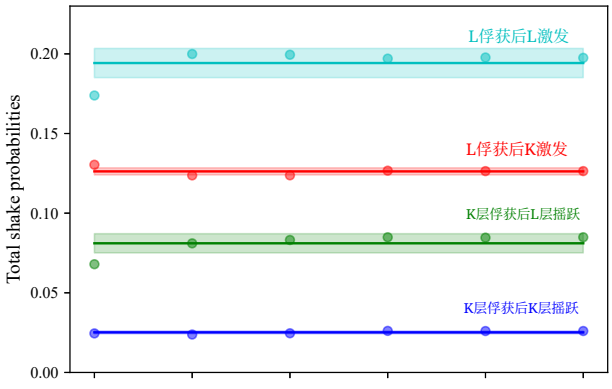

图 3. 根据公式 (7) 得出的总摇跃概率随基组空间大小的变化。包含截至 $4s$ 轨道的所有单激发和双激发。彩色带表示 1σ 区间。

卫星通道中。因此，可靠地处理此类贡献，对于校准实验数据以及为新物理建立稳健的限制都不可或缺。

A. 能级

多组态狄拉克–福克计算中能量的准确度取决于基组空间的大小。在此，我们通过将基组空间扩展至4s轨道，并纳入单激发和双激发，计入了电子关联。虽然仍可进一步提高准确度 [29–31], 但超越 BeEST实验 0.1 电子伏特准确度的改进意义有限 [7], 尤其是我们预计，钽基体材料会影响实验测得的^{7}铍能谱能量值 [32]。所有计算均针对质量数为7的原子核，并采用费米分布。 ^{7}铍和 ^{7}锂的核半径取自 Angeli和Marinova[33]。随着纳入更高阶的电子关联，计算得到的能量会系统性降低；但纳入关联至4s轨道后，这些数值已趋近渐近极限。我们发现，摇激和双空穴激发过程也呈现出类似的变化趋势，即随关联轨道数目增加而变化（图3）。因此，我们报告基组空间扩展至4s轨道时计算得到的数值。为估算这一近似造成的误差，我们使用指数模型外推至无限基组极限，并以该极限作为计算中系统不确定度的衡量。我们得到的能量为 -147.05(3), -203.38(3) 和 -52.28(3) 电子伏特，分别对应锂中的 $1s2s^2$、 $1s^2 2s$ 和$2s^2 3s$ 组态。这些数值与目前最准确的计算结果相差 2σ 至 3σ [34, 35]。对于孤立的^{7}锂原子，它们预测 K-GS与L-GS峰之间的能量间隔为 56.33(5) 电子伏特，K-GS与K基态 K层摇激峰之间的能量间隔为93.15(5) 电子伏特。BeEST第三阶段数据的实验值显著偏低，分别为51.57(16) 电子伏特和 89.37(27) 电子伏特。虽然这些差异可能源于固态效应，以及探测器对核反冲响应中的非线性，但也为我们提供了宝贵机会，以加深对环境因素如何影响原子能谱的理解，并进一步改进实验方法。

B. 总摇激概率

根据公式（7）和（8），在突发近似下，可利用初态和末态波函数计算电子俘获衰变激发（“摇激”）给定壳层中一个或多个剩余电子的概率。对于 ^{7}Be 的电子俘获衰变，该概率包括所有不会在末态组态中产生 ^{7}Li 的 K层俘获衰变，以及所有跃迁至 $1s^2 2s$ 以外组态的 L俘获衰变。因此，计算总摇激概率需要 ^{7}Be（$1s^2 2s^2\ ^1S_0$）和 ^{7}Li（$1s^2 2s\ ^2S_{1/2}$）基态的 1s 和 2s 波函数，以及 ^{7}Li 激发态（$1s2s^2\ ^2S_{1/2}$）的波函数。我们使用包含单激发和双激发的组态态函数，针对不同大小的基组空间，利用公式（7）、（8）和（9）计算了所有可能的俘获过程，组态最高达到 4s

轨道。除 L俘获后K激发过程外，关联波函数的重叠均有所增加，因此与未考虑电子关联的计算相比，摇激概率略有上升。近期，Nguyen 等人对铜进行的多组态狄拉克–哈特里–福克计算中也观察到了这一效应 [24] 。目前尚不清楚为何 L俘获后K激发过程的摇激概率会降低约 0.4%；不过，这一变化仅为我们估算不确定度的 1.5 倍。摇激概率对波函数形状十分敏感，而且其收敛趋势与能量的收敛趋势并不相似。因此，我们采取保守估计，以不同数量组态态函数纳入关联波函数时所得摇激结果的标准差，作为总摇激概率的不确定度（图 3）。如 [24] 所述，双电子KL震荡通过将 K层俘获或 L俘获后 K层摇跃和 L层摇跃的单次摇激概率相乘得到。不确定度通过误差传播，根据不同关联程度下概率的标准差计算得出。铍 ^{7}Be 电子俘获的单电子、双电子及总摇激概率汇总于表I。

C. 摇激

利用公式（10）计算了电子跃迁到 ^{7}Li 空束缚态的摇激概率，因为该公式直接给出了原子在电子俘获导致势发生变化后最终处于新哈密顿量某一本征态的概率 [36]。对于处于基态的孤立铍原子，由于总角动量守恒，只允许跃迁到s 轨道，摇激主要表现为跃迁到最低未占据的 3s轨道（图 4）。对于 L 壳层摇激，该概率占总概率的百分之几（表 II）。在 K 和 L 电子俘获之后，随着主量子数增加，摇激概率都会迅速降低（图 4）。要得到总摇激概率，必须对计算值进行外推，因为原则上电子可以被激发到子离子的无限多个轨道中的任意一个。事实上，对钽基质中铍的固态计算 [32], 表明， $2s$ 轨道已与费米能级简并，这意味着摇激峰的形状将反映态密度高度不对称的分布。总摇激值

[7]铍的 K 壳和 L 壳俘获对应的数值，是将图 4 中数据的曲线拟合外推至 $n = 200$ 得到的；超过该值后，摇激概率可忽略不计（表II）。

摇激峰形由所有摇激态的总和给出，并用高斯半高全宽为 2 电子伏特的高斯分布展宽，以考虑 STJ 探测器的分辨率。（图 4，插图）。除 L俘获K壳摇激峰外，所有摇激峰都具有相似的非对称结构：峰来自摇激至最低未占据的 $3s$ 轨道，而高能肩峰则来自摇激至具有 $n > 3$的态。这使摇激峰的宽度超过了探测器的 2 电子伏特分辨率。相比之下，L俘获K壳摇激谱显示出两个峰，因为 L 俘获后 $2s$轨道仅被部分占据，因此摇激跃迁 $1s^2 2s \to 1s 2s^2$是可能的。该跃迁的能量等于 K-GS峰的能量，在计算 L/K俘获比时应予以考虑（第 IV C 节）。两个峰相隔 3.85 电子伏特（表II）。L壳摇激峰与主“无摇激”峰之间的能量差也相同，这或许可以解释为何在拟合 K-GS峰时需要在较高能量处加入一个次级分量。实验上可见的唯一其他摇激跃迁是 K 俘获后的 K 壳摇激，因为它与四个主峰相距较远。

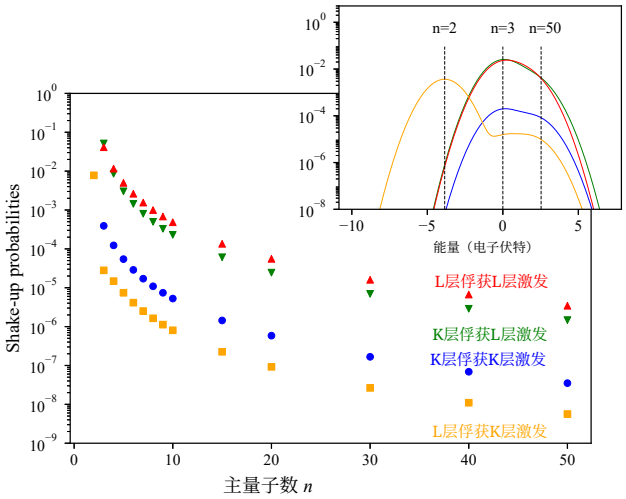

图4。 ^{7}铍发生 K 壳或 L 壳俘获后， $1s \to ns$ 和 $2s \to ns$ 电子激发的摇激概率。插图显示了所有摇激通道的总和，并采用 2电子伏特半高全宽的高斯分布展宽，以考虑探测器分辨率。能量均以各数据集的 $n = 3$ 摇激通道为基准。

D. 摇脱

进入非束缚态的摇脱概率也根据公式（10）计算，不同之处在于此时末态由连续态波函数描述（第II节 E）。我们计算了动能最高达1 keV的摇脱概率，并外推至Q_{EC}=862 keV。SO 谱通过从总摇跃概率（表I）中减去单电子（表II）和双电子摇激概率（表IV）来归一化 [25]。对于K层俘获，SO发生的概率为百分之几；而L俘获

表I. [7]铍K层和L层俘获衰变的单重摇跃、双重摇跃及总摇跃概率。所有数值均以俘获事件为基准计算，因此总摇跃概率与无摇跃概率之和为1。KK和LL双重摇跃概率直接通过公式9计算，而KL摇跃概率则根据K层和L层单重摇跃概率的条件概率计算。

	摇跃概率			
过程	总摇跃	单重摇跃	过程	双重摇跃
K层俘获 K层摇跃	0.0260(9)	0.0258(9)	K层俘获 KL摇跃	0.0021(2)
K层俘获 L层摇跃	0。085(6)	0.083(6)	K俘获后LL激发	0.0019(1)
L俘获后K激发	0.126(3)	0.122(2)	L俘获后KK激发	0.00427(8)
L俘获后L激发	0.198(9)	0.187(9)	L俘获后KL激发	0.023(1)

表II. K层和L层俘获后的摇激概率。总计为截至 $n = 200$的所有摇激通道之和，依据所列结果通过二次插值计算得出。来自能级 $50 < n < 200$ 的摇激概率贡献小于0.02%。此外，还列出了与特定双空穴激发通道能量（∞）相对应的电离阈值。

	KC-LSU	LC-KSU	能量（电子伏特）	KC-KSU	能量（电子伏特）	LC-LSU	能量（电子伏特）
n	$1s^2 2s^2 \rightarrow 1s\ 2s\ ns$			$1s^2 2s^2 \rightarrow 2s^2 ns$		$1s^2 2s^2 \rightarrow 1s^2 ns$	
2		7.8(6)E-03	113.65(3)				
3	5.2(4)E-02	2.8(2)E-05	117.50(3)	3.9(3)E-04	206.80(5)	4.1(3)E-02	60.16(3)
4	8.6(7)E-03	1.5(2)E-05	118.83(3)	1.23(9)E-04	208.27(5)	1.16(9)E-02	61.12(3)
5	3.0(3)E-03	7.4(6)E-06	119.33(3)	5.4(4)E-05	208.82(5)	4.9(4)E-03	61.53(3)
6	1.4(2)E-03	4.1(3)E-06	119.57(3)	2.9(3)E-05	209.08(5)	2.6(2)E-03	61.73(3)
7	8.0(6)E-04	2.5(2)E-06	119.71(3)	1.7(2)E-05	209.22(5)	1.6(2)E-03	61.86(3)
8	4.9(4)E-04	1.6(2)E-06	119.79(3)	1.09(8)E-05	209.31(5)	9.9(7)E-04	61.93(3)
9	3.3(3)E-04	1.12(8)E-06	119.85(3)	7.4(6)E-06	209.37(5)	6.8(5)E-04	61.98(3)
10	2.3(2)E-04	8.0(6)E-07	119.89(3)	5.3(4)E-06	209.41(5)	4.8(4)E-04	62.02(3)
15	6.1(5)E-05	2.2(2)E-07	119.97(3)	1.4(2)E-06	209.51(5)	1.35(10)E-04	62.10(3)
20	2.5(2)E-05	9.2(7)E-08	120.00(3)	5.8(5)E-07	209.54(5)	5.5(4)E-05	62.13(3)
30	6.9(5)E-06	2.6(2)E-08	120.02(3)	1.7(2)E-07	209.56(5)	1.6(2)E-05	62.15(3)
40	2.9(3)E-06	1.10(8)E-08	120.03(3)	6.9(5)E-08	209.56(5)	6.7(5)E-06	62.16(3)
50	1.5(2)E-06	5.6(4)E-09	120.03(3)	3.5(3)E-08	209.57(5)	3.4(3)E-06	62.16(3)
∞			120.04(3)		209.58(5)		62.17(3)
总计	0.067(5)	0.0079(6)		0.00066(5)		0.067(5)	

则约有25%的衰变伴随SO（表III）。L俘获后SO明显更强，这是因为剩余K层和L层电子感受到的有效核电荷变化更大（Z_{eff}）。K层俘获后 Z_{eff} 的变化很小，因为电子俘获过程中的电荷守恒使L层电子（在较小程度上也包括K层电子）感受到的核电荷保持相近。事实上，K层俘获后有效核电荷的相对变化对K层电子为22%，对L壳层电子为11%；而L俘获后 Z_{eff} 的变化对K层电子为27%，对L层电子为31%。此前已有研究计算过这一效应，并在从 $7 < Z < 54$ [37] 到.....的一系列元素中观察到了相同的行为，尽管在分析BeEST第二阶段能谱时并未充分认识到这一点 [38]。各种单一SO谱的阈值能量反映了电子相对于电离阈值的结合能（表III）。

表III. K层和L层电子在K和L电子俘获后的单次摇脱概率及能量阈值。这些结果是通过从表I中的单摇激概率中减去表II各项之和得到的。

过程	摇脱概率	能量阈值
	概率	(eV)
K层俘获K层电离	0.0251(10)	209.58(5)
K俘获L电子震离	0.016(8)	120.04(4)
L俘获K电子震离	0.114(4)	120.04(4)
L俘获L电子震离	0.120(11)	62.17(3)

将这些谱与早期的 SO 过程模型进行比较很有启发性。这些模型传统上基于指数修正高斯分布 [38]，或采用 Levinger 在

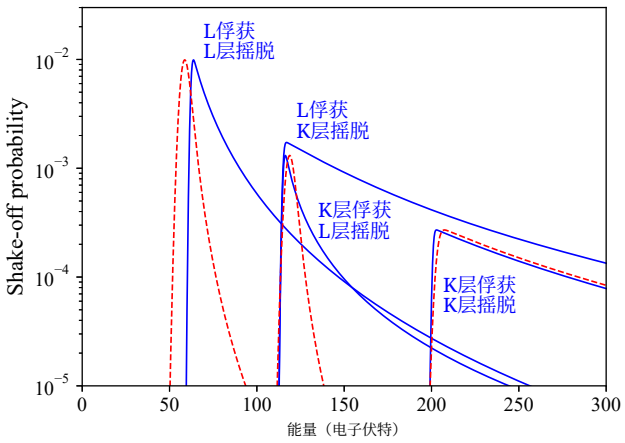

图5. BeEST第二阶段分析中所采用的Levinger摇脱谱形（红色虚线）与从头算计算结果（蓝色实线）的比较。所有谱形均与2电子伏特半高全宽的高斯分布进行卷积，以计入探测器分辨率。Levinger谱的能量阈值采用拟合值，而从头算计算则采用计算值。

20世纪50年代提出的方法 [4, 39, 40]。后者采用屏蔽类氢波函数，因此应足以准确描述 K层摇脱。然而，预计这些波函数对 n = 2 态的描述不够准确，因而也不够准确地描述 L层摇脱，因为后者很大程度上取决于波函数形状 [27]。图5比较了我们的从头算SO 谱线轮廓计算结果与基于 Levinger 方法的 BeEST 第二阶段结果 [4]。正如预期的那样，两种方法得到的 K 壳层 SO 谱相当相似，不过我们只能比较 K层俘获的结果，因为第二阶段拟合未纳入 L俘获后的 K-SO。相比之下，Levinger 函数描述的 L层摇脱衰减速度远快于从头算计算结果。这可能是因为 Levinger 采用了非相对论计算，而我们使用了相对论 Dirac-Fock 形式体系；此外，Levinger 使用屏蔽类氢波函数，而我们使用多组态 Dirac-Fock波函数（第II节）。因此，BeEST实验第三阶段的 SO 谱得到了显著改进，尤其是 L层摇脱谱。尽管使用指数修正高斯分布 [38] 和 Levinger 函数 [4] 得到的拟合形状不同，但 BeEST 两者给出的 L/K比值在各自报告的不确定度范围内非常相近。

为了自动且稳定地分析第三阶段数据，应尽量降低拟合模型的复杂度。虽然我们的从头算 SO 谱是针对不同电子能量逐点计算的，但为了使模型尽可能简单，我们测试了若干概率密度函数，以确定其中一些是否能够足够准确地再现 SO 数据，从而可用于最终拟合。图6显示了能够以较低约化卡方匹配我们的计算结果（数据点）的解析函数。结果表明，三个指数衰减之和、对数正态分布和幂函数都能很好地拟合数值计算结果。在第三阶段分析中，我们选择用幂函数描述 K 壳层 SO 谱，用对数正态分布描述 L 壳层 SO 谱，因为它们能最贴合数据，同时使自由参数的数量保持较少 [7]。

E. 双重摇激过程

BeEST实验的高灵敏度可能有助于观测到细微效应，因此我们还计算了双重摇激和双重摇脱的概率。双重摇激特征根据公式（10）计算，同时考虑到双重摇激通过中间态发生，并且必须考虑所有到达末态的可能路径。例如，L俘获后发生KL层摇激至 $1s\ 3s\ 4s$，可能通过两种方式实现：两个1s电子中的一个跃迁至3s轨道，同时剩余的2s电子跃迁至4s轨道；或者1s电子跃迁至4s壳层，同时2s电子跃迁至3s壳层。我们计算了电子俘获于 ^{7}铍时一系列双重摇激跃迁的概率。表IV列出了强度最高、最有可能被观测到的跃迁。然而，由于L层摇激能量较小，许多双重摇激过程的能量接近单次摇激过程的能量，因此在实验中不太可能作为独立峰被观测到。双重摇激概率根据公式9计算：对于KK摇激或LL摇激，采用 $k_e = 2$；对于KL层摇脱，则将各个亚壳层的单摇激概率相乘。与单次摇激过程的处理方式相同，双重摇脱概率通过从总双重摇激概率（表I）中减去双重摇激概率（见表IV）计算得到。

F. 从头算模拟能谱

图7总结了对四个 ^{7}Be衰变通道的电子俘获能谱所做的完整从头算：K层俘获至 ^{7}Li基态（K-GS）、K层俘获至 ^{7}Li* 激发态（K-ES），以及对应的两个L俘获通道L-GS和L-ES。计算采用多组态狄拉克–福克（MCDF）框架，涵盖截至4s的基组态中计算得到的所有单电子和双电子摇激（SU）及双空穴激发（SO）过程。能谱已根据 ^{7}Li的反冲能进行偏移

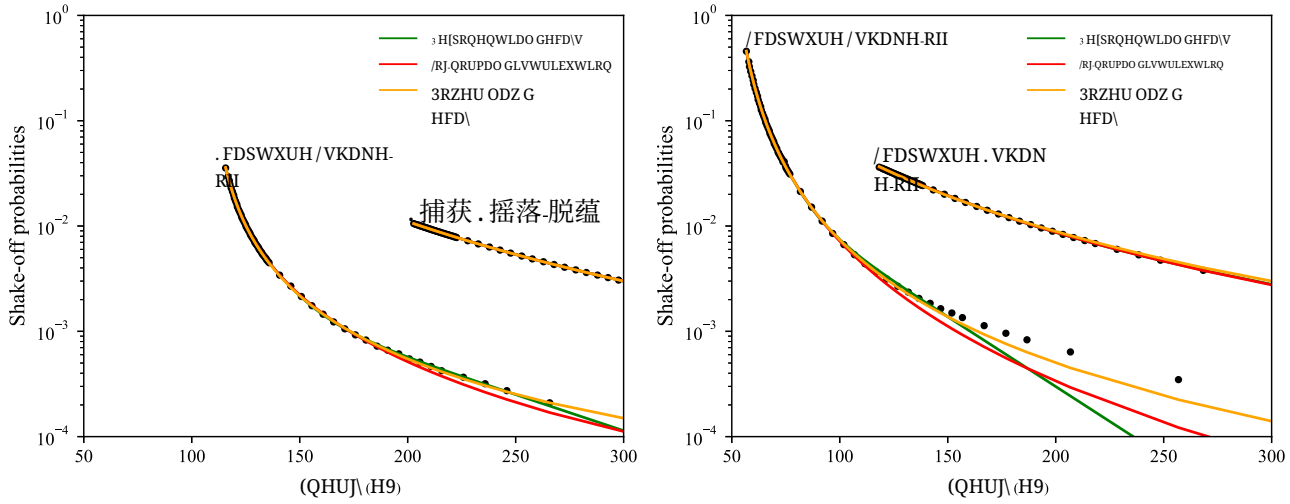

图6. 根据公式10（点）模拟K层俘获（左图）和L俘获（右图）后的摇脱谱，并与采用三个指数函数之和（绿色）、对数正态分布（红色）和幂律衰减（橙色）得到的解析近似进行比较。

表IV. K层俘获和L俘获后的双重激发概率。总计为本工作所考虑的所有双重摇激通道之和。本工作未考虑能级的摇激概率贡献估计可以忽略不计。

组态	L俘获后KL激发	K俘获后LL激发	能量（电子伏特）
$1s2s3s$	1.54(31)E-04		118.81(3)
$1s3s^2$	5.17(11)E-06	2.47(50)E-06	126.96(3)
$1s3s4s$	2.77(56)E-07	1.51(31)E-06	128.29(3)
$1s3s5s$	5.73(12)E-08	5.22(11)E-07	128.95(3)
$1s4s^2$	2.04(41)E-08	2.83(57)E-10	131.32(3)
$1s4s5s$	1.26(26)E-09	3.28(66)E-10	132.30(3)
$1s5s^2$	3.38(68)E-10	3.34(10)E-13	133.27(3)
总计	3.11(63)E-04	4.5(9)E-06	
	L俘获后KK激发	K俘获 KL摇激	
$2s^23s$	2.51(51)E-06	1.46(30)E-04	206.77(5)
$2s^24s$	7.88(16)E-07	7.88(16)E-07	208.25(5)
$2s3s^2$	1.00(21)E-06	2.58(52)E-05	217.57(5)
$2s3s4s$	1.58(32)E-06	4.76(96)E-06	220.02(6)
$2s3s5s$	1.33(27)E-08	8.18(17)E-07	219.82(5)
$2s4s^2$	1.12(23)E-07	5.05(11)E-07	222.71(6)
$2s5s^2$	2.37(48)E-08	5.53(12)E-08	224.90(6)
总计	6.0(2)E-06	1.79(36)E-04	

衰变至基态时反冲能为56.826(9)电子伏特，衰变至 ^{7}Li* [4]激发态时为28.747(4)电子伏特。由于目前在BeEST实验中，STJ探测器的2电子伏特能量分辨率是唯一得到充分理解的展宽来源，因此将两条衰变至 ^{7}Li基态的衰变分支与宽度为2电子伏特半高全宽的高斯函数进行卷积。衰变至 ^{7}Li* 激发态的衰变分支则与宽度为 16.84 电子伏特半高全宽的高斯函数卷积，以考虑多普勒展宽 [7]。K-GS 能谱在其峰值处归一化为 1，其他分支则按衰变至 ^{7}Li* [41] 的 10.44% 分支比以及测得的 0.07 [38] L/K 俘获比进行缩放。

图7中的四个主峰以深紫色突出显示，所有摇激和双空穴激发贡献则

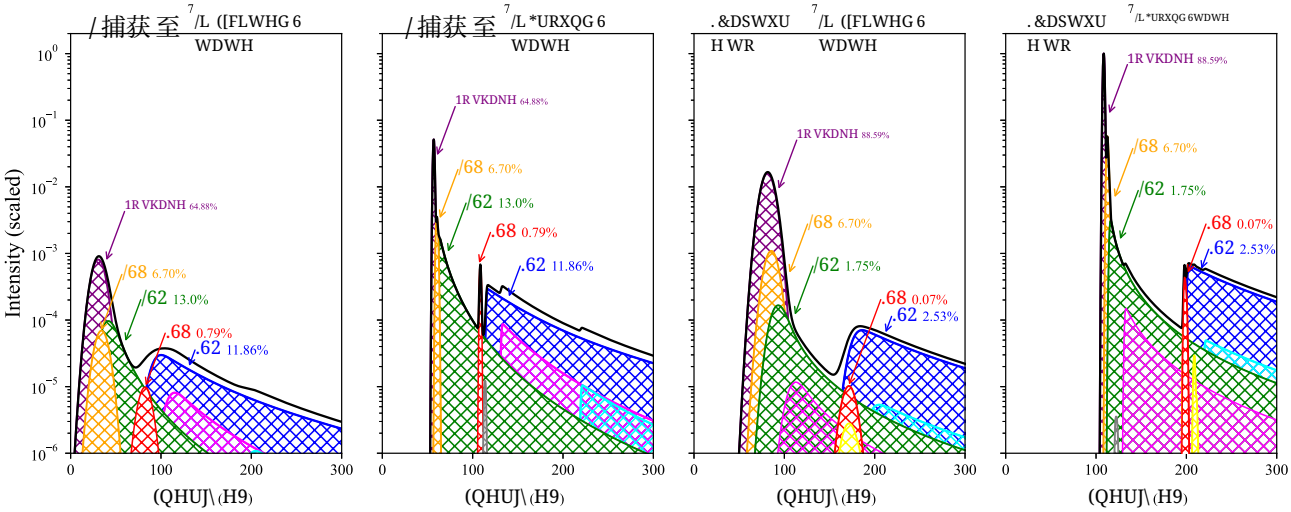

图7。包含所有摇激及摇脱过程的四种 ^{7}铍衰变通道的完整从头算模拟。衰变至 ^{7}锂基态的两条谱线采用探测器的2电子伏特半高全宽分辨率进行展宽；衰变至激发态 ^{7}锂* 的谱线则采用16.8电子伏特半高全宽的测量宽度进行展宽，以计入多普勒效应。K层俘获后的双重摇跃过程包括LL层摇脱（粉色，0.19%）、KL层摇脱（青色，0.21%）、LL层摇起（灰色，<0.01%）和KL层摇激（黄色，0.02%）。L俘获图中的双重摇跃过程包括KL层摇脱（粉色，2.27%）、KK层摇脱（青色，0.43%）、KL层摇激（灰色，0.03%）和KK层摇激（黄色，<0.01%）。

分别以橙色表示 L SU、绿色表示 L层摇脱、红色表示 K 壳层 SU、蓝色表示 K层摇脱。在目前的实验条件下，双重摇跃贡献仍处于统计噪声水平，无法明确辨认，尽管它们出现在能谱中相对清晰的区域。各衰变通道的预期相对强度（如图注所述，分别以灰色、粉色、黄色和青色表示）对 L层俘获能谱的贡献不到 2.5%，对 K 壳层俘获能谱的贡献不到 0.2%（表I和表IV），且大多与单次摇激特征重叠。除非在统计量极高的能谱中，否则这些成分不太可能呈现为独立峰，但可能会影响相邻特征的测量强度。图7所示的模拟能谱可作为与 BeEST实验数据进行比较的依据。

IV. 讨论

A. 与实验比较

将计算得到的摇激（SU）和双空穴激发（SO）谱与BeEST实验直接比较较为困难，因为该实验测量的并非孤立的 ^{7}铍原子的电子俘获衰变，而是植入钽基超导隧道结传感器中的 ^{7}铍原子的电子俘获衰变。因此，实验谱与计算谱有所不同。具体而言，测量峰明显宽于 STJ探测器的2电子伏特半高全宽分辨率，而且峰质心的能量始终低于模拟结果和文献值的预期。目前尚未完全理解这些差异的成因。我们推测，Ta吸收膜中5d电子的摇激会影响测得的能量并使峰展宽。由于 ^{7}铍在L俘获后的摇激强于K层俘获后的摇激，因此L 壳层俘获峰受到的影响会比K 壳层俘获峰更大。此外，对于能量相同的核反冲和电子相互作用，STJ传感器的响应可能不同，这种效应称为“核淬灭”。这会使衰变至 ^{7}锂基态的信号与衰变至 ^{7}锂* 激发态的信号受到不同程度的削弱。因此，为了与实验进行比较，我们对计算得到的峰质心进行平移，并用高斯函数对谱进行卷积，其宽度与测量值 [7]相符。为保持一致，摇激谱和双空穴激发谱的平移量及高斯函数卷积参数，均与相应的无摇激主峰采用相同的参数。

图8展示了完整的从头算模拟结果，并经过平移和展宽，使其质心和宽度与实验数据相匹配。模拟结果和实验光谱均已归一化，使108.50电子伏特处的K-GS峰强度为1。L-GS谱的模拟结果按0.070(7)[38], 的L/K比值进行了缩放，两个激发态谱则按10.44% [41]的分支比，相对于基态谱进行了缩放。SU谱和SO谱的振幅未偏离其从头算值，且

SO谱的形状也未改变。图8展示了模拟原子 ^{7}铍的SU和SO过程的优势与局限。SO谱的形状与观测结果相当吻合，尤其是在远高于电离阈值的能量范围内，此时钽晶格周期势的影响较小。它们还表明，∼160 至 ∼190 电子伏特的能量范围受到L-GS谱的KSO尾部影响，而早期分析并未将其纳入。实验光谱在接近电离阈值的能量处与原子模拟结果吻合较差，例如在 ∼120至 ∼150 电子伏特的能量范围内，K层俘获的LSO尾部占主导。这并不令人意外，因为在这一能量范围内，跃迁概率可能会因 ^{7}锂 [42]的化学环境而显著改变。这也可能解释了为何SU谱和SO谱的振幅与测量结果不同，因为其归一化是根据 ^{7}铍和 ^{7}锂原子波函数之间的重叠计算得出的，而这些波函数决定了总摇激概率（第II节）。例如，在 ∼200 电子伏特附近可以看到这一点：预测的K层俘获KSU峰过小，而K层俘获KSO尾部过大。

然而，模拟可以帮助解答一个尚未解决的问题，即拟合 KGS 峰时为何需要不止一个沃伊特分量。模拟结果表明，K-GS 峰高能侧的次级分量源自 L SU。尽管 LSU 峰计算得到的质心和振幅与实验值略有差异，但其数值处于合理范围，大致足以匹配 K-GS 峰的高能肩峰。这些差异很可能同样源于固态效应。由于 L-GS 峰比 K-GS 峰更宽，因此无法将 L 俘获的 LSU 贡献分辨为高能侧的次级分量。另一方面，我们尚不清楚 K-GS 峰低能侧第三分量的来源。我们推测，它可能是 ^{7}Li 反冲造成的晶格损伤所导致的能量损失，但也不排除其他能量损失机制。这一低能分量占 K-GS 谱全部事件的显著比例： ∼25%。由于其他峰的面积均按 K-GS 谱进行归一化，若不考虑 K-GS 的第三分量，计算得到的特征中计数会少于实验数据。对于 K-ES 峰，和用于约束其形状的 K-GS 峰一样，低能肩部的计数也有所缺失。

最后，在 ∼100电子伏特附近，实验光谱与模拟结果存在差异。该区域受到俄歇电子初始弛豫期间电子逃逸的影响，并取决于^{7}铍原子核相对于 STJ探测器表面的深度分布 [7]。要完整拟合 BeEST实验的第三阶段能谱，必须考虑所有这些效应。

B. Fitto 实验

为了完整拟合实验光谱，我们采用两项简化假设。首先，我们用单个质心替代 SU 谱的数值模拟，因为 SU 主要由跃迁至 $3s$ 轨道的过程主导；在当前测量精度下，观测到的展宽使 SU 谱无法与单个高斯峰区分开来（见图 4 插图）。拟合中不为 L俘获后的 K 壳层 SU 单独设置项，因为其末态与 K 壳层俘获后的 L SU 相同。其次，我们用从头算 SO 谱的解析近似替代它们（图 6）。L 壳层 SO 谱用对数正态分布近似，K 壳层 SO 谱则用具有一定阈值能量的幂律衰减近似。SO 谱的振幅、衰减尺度和阈值能量均允许变化，这是考虑基质效应的最简单近似。跃迁至 ^{7}锂基态和激发态后的 SO 谱被约束为具有相同的形状和相对强度，因为 SO 预计不受末态核态影响。

此外，我们在 K-GS 峰中加入第三个分量，并将 K 壳层激发态峰约束为在多普勒展宽前具有相同的三个分量。随后，我们在两个 K 壳层俘获峰下方（但不在 L 俘获峰下方）加入一个指数修正高斯分布，以描述俄歇电子逃逸尾。K-GS 和 K 壳层激发态跃迁之后的逃逸尾被约束为具有相同的相对强度。K 壳层俘获峰采用自然线宽为 30 毫电子伏的 Voigt 函数描述，以考虑 $1s$ 空穴的寿命。该宽度主要由俄歇速率决定；计算时纳入了俄歇跃迁、磁偶极 M1 $1s2s^2\ {}^2\mathrm{S}_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s\ {}^2\mathrm{S}_{1/2}$ 跃迁，以及双光子单电子跃迁和双电子单光子跃迁。有趣的是，L-GS峰可以用单个高斯函数拟合，这很可能是因为它比 K-GS峰略宽，且其高能侧肩部与较宽的 K 壳层激发态峰重叠。因此，为避免过拟合，我们不在 L 俘获后加入 LSU 峰，而是将 LSU 的贡献纳入主要的 L 俘获峰及其 SO 尾部。此外， $2s$ 空穴的寿命足够长，因此可以忽略 L 俘获峰的寿命展宽。所有峰的质心和宽度均可变化；不过，K 壳层激发态谱和 L 壳层激发态谱采用相同的高斯宽度进行卷积，因为多普勒展宽预计不取决于被俘获电子的来源。摇激谱和 SO 谱均与高斯函数卷积，且其宽度与各自对应的无摇跃峰相同。重要的是，我们不再将 L/K 俘获比约束为 BeEST实验第二阶段文献报道的 0.070(7) [38] ，因为我们预计新的 SO 谱能够改善 L/K 比值，

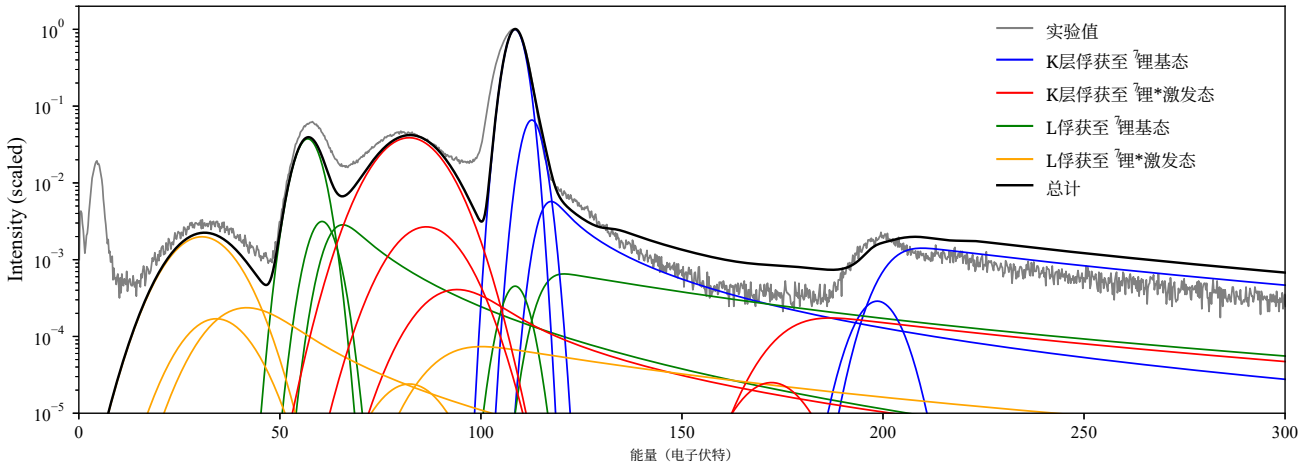

图8。在0-300电子伏特范围内模拟的完整 ^{7}铍电子俘获能谱，归一化至1，并与BeEST实验第三阶段的一日归一化能谱进行比较。四个主峰均伴有L层摇激、L层摇脱、K层摇激和K层摇脱谱。原子结构计算结果经过能量平移，并与高斯响应卷积，以匹配实验数据。L俘获谱按0.070(7)的L/K俘获比缩放 [41] ，激发态谱则按10.44%的分支比缩放 [38]。

系统不确定度降低。

当前数据集中未观测到双重摇激事件，因此拟合中未予纳入。计算结果可能在一定程度上高估了这些事件，因为其量级预计与统计涨落相当。待完整的第三阶段能谱解除盲化后，或许仍能识别出这些跃迁；不过，可能难以将 L 俘获后的 KL 层摇脱与基质效应区分开，也难以将 K 俘获后的 KL 层摇脱与 K基态-K基态堆积区分开。数据处理和能谱拟合的详情见 [7]。

请注意，迄今为止，BeEST第三阶段数据仅在惰性中微子搜索的感兴趣区域（ROI）之外解除盲化。因此，我们将解除盲化的数据缩放至ROI内能谱的强度，使得数据在20至105电子伏特区间之外具有高得多的统计精度。

在这些条件下，可以将从头算模拟拟合到实验光谱，其约化卡方为 $\chi^2_{red} \approx 1.4$ （图9）。与直接将模拟能谱同数据进行比较相比，拟合结果之所以更为吻合，主要是因为调整了各种SU和SO贡献的强度。这并不出乎意料，尤其是在L俘获之后，因为从头算能谱是使用原子波函数（第II.C节）归一化的，而这些波函数在固体内部仅是近似的。最明显的是，计算得到的K基态 K层摇激峰强度比实际值低 ~3.4倍，而K基态 K层摇脱尾强度比实际值高 ~50%。因此，在 ~200 电子伏特处可以清晰地观察到K基态 K层摇激峰。另一方面，测得的K基态 L层摇激峰强度为2.04(4)%，约为计算值7.5(5%的的3.5分之一，其中包括L基态 K层摇激贡献的0.79(6)%。

实验数据与计算得到的 SO 谱之间的定量比较颇为复杂，因为观察发现，使用一系列不同参数都能很好地拟合数据（图10）。K层摇脱谱在 ~200 电子伏特以上占主导，因此受到实验数据的约束；而 L 壳层 SO 谱与其他拟合函数重叠，后者可以补偿拟合参数的差异。图10展示了 L俘获后 SO 函数的范围，这些函数都能很好地拟合数据。最佳全局拟合（黑色）与实验数据非常吻合，但在主K-GS峰区域内的 [95,115] 电子伏特区间除外；由此拟合得到的各通道 L俘获 L 壳层 SO 形状以蓝色阴影表示，展示了对全部16个通道拟合结果的最大值、最小值和中位数（深蓝色）。尽管该分量本身变化显著，但总拟合得出的 χ^2_{red} 值同样出色，各通道的 χ^2_{red} 变化均小于0.03。这些形状与电离阈值以上能量范围内的从头算结果（绿色）吻合良好，斜率相符即为明证。在此能量范围内，基质效应应当较小；而已知化学环境会在接近电离阈值时显著影响跃迁概率 [42]。此外，对于能量较高的出射电子，突然近似预期能给出更好的结果。蓝色曲线表明，对 SO 曲线采用其他参数化方式也能很好地拟合数据；甚至早期不含电子相关的非相对论函数（Levinger）也能很好地重现数据（红色）。

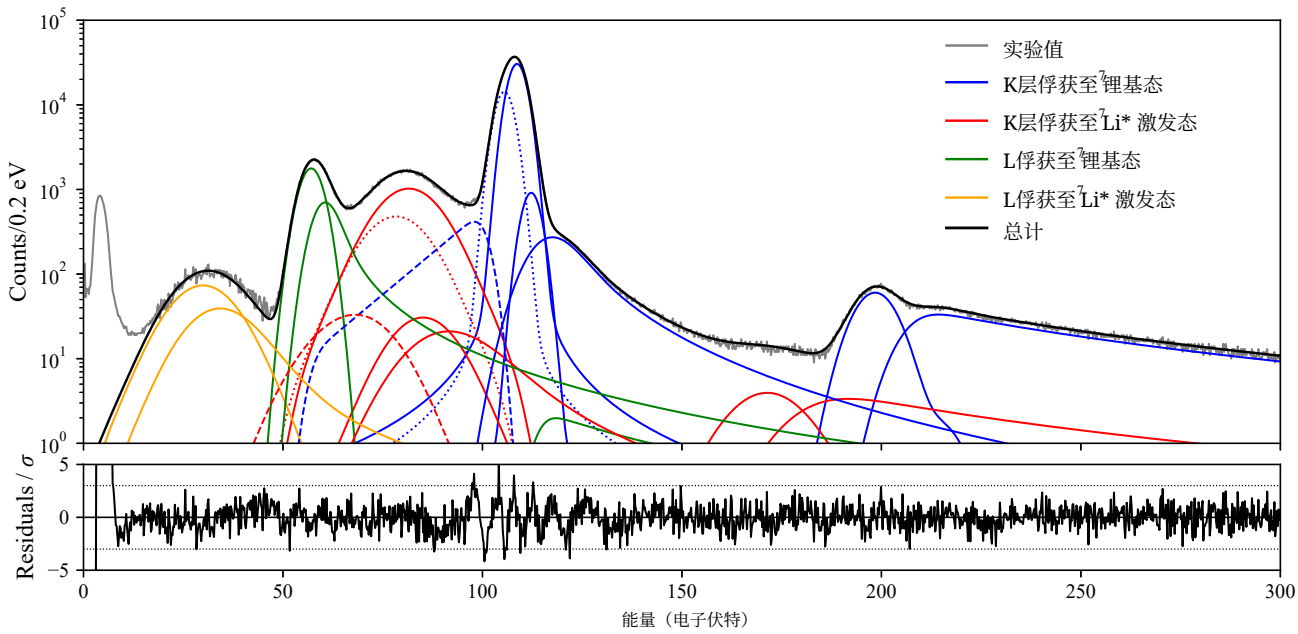

图9. 将摇激和摇脱谱（实线）拟合到第三阶段数据（实线）。为了准确模拟谱，必须在K俘获峰中加入第三分量（点线）和电子逃逸尾（虚线）。在20–300电子伏特的拟合范围内，拟合为$\chi^2_{red} \approx 1.4$。由于L俘获K摇脱曲线与K俘获L摇脱曲线高度简并，且在拟合中变得很小，因此无法看到该曲线。

。我们发现，调整拟合函数的衰变尺度，可以作为描述基质效应对 SO 概率影响的一种可接受的近似。此外，无摇激L俘获和 L-SO 尾的起始部分都对~57 电子伏特处的 L-GS峰有所贡献，而实验数据对二者相对贡献的约束较弱（图10）。这使总 L壳层摇脱概率产生 ±4.9 %的系统不确定度。对于 L-GS LSO+摇激概率在20%至40%之间的情形，我们可以用 $\chi^2_{red} \approx 1$ 拟合 >120 电子伏特区间；相比之下，计算得到的总单次摇激概率为18.7(9)%，因为该 L-GS LSO+摇激拟合同时包含了摇激和双空穴激发。第三阶段拟合与本研究原子结构计算所得的所有摇激过程概率对比见表V。

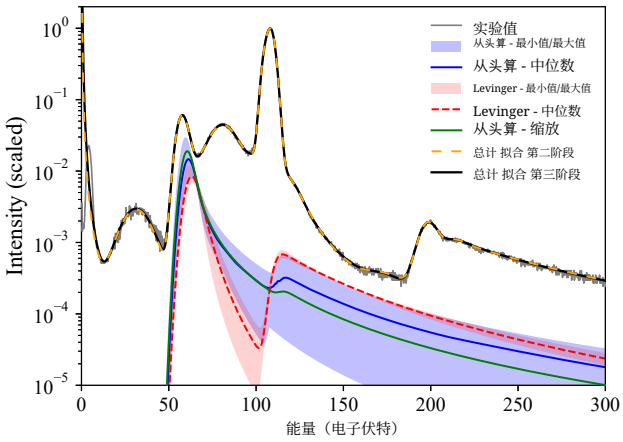

图10. L俘获后摇脱函数的不同解析近似：对第三阶段通道0未盲化数据的最佳拟合（绿色）。图中还展示了使用第二阶段所用 Levinger 函数对实验数据的拟合（红色）。对全部16个通道的拟合以蓝色表示，阴影区域表示对L俘获摇脱峰拟合结果的最小值和最大值。当前，这种模型依赖性是系统不确定度的主要来源。

一个不一致之处在于，当前不受能量约束的拟合预测，L-GS的K壳层摇脱阈值比主K-GS峰高12.7(6)电子伏特，而K-GS的L壳层摇脱起始仅比主K-GS峰高0.17电子伏特。这不符合物理实际，因为这两个通道具有相同的中间态 $1s2s$，因此它们应具有相同的能量阈值。这很可能反映了模型在电离阈值附近失效，而在该处钽基质的影响最为显著。因此，我们将L-GS的K-SO和K-GS的L-SO阈值约束为相同。由于

由于这两条曲线与 L-GS、L-SO 以及俄歇逃逸尾高度重叠，拟合结果

表V. ^{7}铍中 K 层和 L 壳层电子俘获后单电子激发和摇脱通道总概率的计算值与实验值比较。括号内的数字表示末位有效数字处的绝对统计不确定度。

过程	摇激概率	
	理论值	实验值
K 层俘获K 层摇激	0.00066(5)	0.00278(3)
K层俘获L层激发	0.067(5)	0.0204(4)
L层俘获K层激发	0.0079(6)	—
L层俘获L层激发	0.067(5)	—
K层俘获K层电离	0.0251(10)	0.0118(8)
K俘获L电子震离	0.016(8)	0.0197(4)
L俘获K电子震离	0.114(4)	0.0203(4)
L俘获L电子震离	0.120(11)	0.314(3)[a]

[a] 实验性L俘获L摇出应与理论总单L俘获L摇出概率0.187(9)%进行比较。

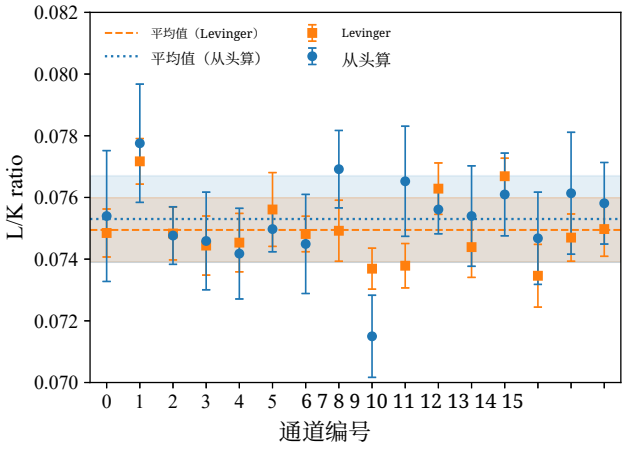

图11. BeEST实验第三阶段中不同STJ探测器像素的L/K俘获比。从头算（蓝色）所得的L/K比值略高于过去使用的Levinger函数（橙色） [38]。

之间存在很强的相关性。对俄歇逃逸尾进行蒙特卡罗模拟，使我们能够约束拟合参数，从而得到图9所示的拟合值。未来关于基质效应的研究将确定哪一组拟合值最准确地描述 ^{7}铍-^{7}锂-钽体系。

尽管如此，拟合质量表明，在本次测量的精度范围内，解析函数可作为从头算SO谱的有效近似，不过，为了考虑基质效应，其参数必须相对于从头算值稍作调整。拟合结果显示，L俘获后的K-SO不可忽略，并且会对160至190电子伏特范围内的实验光谱产生贡献。同样，只要将能谱展宽至远大于2电子伏特半高全宽的探测器分辨率，便可用适当宽度的单个高斯函数近似SO谱。这表明K-GS峰的高能分量源于L SU，并解答了BeEST实验中的一个悬而未决的问题。

C. L/K俘获比

SU 和 SO 计算使得能够更准确地评估 ^{7}Be 在钽中的衰变的 L/K俘获比。该比值非常重要，因为它会用于计算恒星环境中 ^{7}Be 的衰变，而后者是宇宙学 ^{7}Li 产生的主要来源 [8]。我们早先基于 BeEST实验 II期光谱的分析 [38]受到 SO 谱和本底系统不确定性的限制，这些本底源于 STJ探测器下方硅衬底中的伽马相互作用。通过在第三阶段采用符合反符合剔除，这种衬底本底已被去除 [7]。此外，现在对 SO 谱的计算还纳入了此前被忽略的相对论效应和多电子效应。

尽管迄今为止摇激光谱只针对孤立原子进行了计算，但这些计算揭示了我们先前分析中的若干错误。首先，计算表明，L俘获后的摇激效应强于K层俘获后（表 II 和表 IV），这与早期计算结果一致 [32, 43]。因此，在先前的分析中，不应纳入那些将L俘获和K层俘获后的SO谱设定为相同相对强度的拟合，因为这会得到较低的L/K比值。其次，L层SO谱延伸至比我们在早期分析中采用的Levinger函数所预测的更高能量（图5）。由于L俘获后的摇激效应更强，L/K比值也因此更高，因为现在60至100电子伏特之间的事件中有更大一部分归因于L-SO（图10）。第三，早期计算未纳入L俘获后的K层SO光谱 [39], ，因此我们曾假设其可以忽略。新的计算表明，这一假设并不成立（图5）。最后，第二阶段只使用了一个超导隧道结像素，因此无法通过符合反符合剔除来排除衬底事件。这导致我们错误地将160电子伏特以上的光谱本底归因于硅衬底中的伽马相互作用 [38]。在第三阶段数据中通过反符合剔除排除所有衬底事件后，可以看出，该能谱区间实际上由SU和SO事件主导。

去除伽马背景后，对新 SO 谱采用解析近似，在L/K电子俘获比为 0.0756 ± 0.0020时，能对图9中的能谱实现最佳拟合。令人惊讶的是，这一数值

与采用 Levinger 拟合函数处理第三阶段未盲数据所得的 L/K比值平均值一致，这种做法与第二阶段相同（图11）。该值高于我们先前测得的 0.070 ± 0.007 ，主要是因为 SU 谱有所改进，且拟合中纳入了新的摇激特征，不过仍处于先前测量的误差范围内。这表明，由于 50 至 120 电子伏特区域的能谱复杂，即使摇脱分布模型差异很大，也能得到良好的拟合。因此，新 L/K比值的系统不确定度取决于拟合函数的选择，以及其参数中能够对数据产生合理拟合的取值范围。事实证明，这一范围不可忽略，因为摇脱概率较小，而且摇脱谱的大部分被主峰掩盖（图10）。在不同的拟合中，我们认为最合理的是那些在远高于摇脱阈值的能量处与从头算能谱形状相符的拟合，因为该处的基质效应预计较小。这些拟合用于 [7]。它们显示，在电离阈值附近的摇脱概率与基于自由电子近似的从头算计算结果不同。这似乎合理，因为X射线吸收谱中也观察到了这一现象 [42]，而采用突然近似会妨碍获得正确的阈值附近摇脱概率。我们不能排除基质效应会进一步改变摇脱谱的可能性，不过预计其对 L/K比值的影响仍在当前不确定度范围内。因此，我们现在建议将 0.0756 ± 0.0020 作为钽中 ^{7}铍的 L/K 俘获比新值。

D. 展望

目前关于电子俘获（EC）衰变中摇激（SU）和双空穴激发（SO）谱的计算，包括本研究所呈现的计算，都仅限于孤立原子 [8, 25, 44]。尽管这种方法能够高精度计算多电子波函数，但它未考虑探测器材料带来的基质效应，而这些效应不可避免地会改变波函数及相关原子参数，例如能级、跃迁率以及摇激和摇脱概率。因此，将这些基质效应纳入未来的计算是至关重要的下一步。Be和Li波函数的位点特定性质，以及它们与探测器基质之间的轨道杂化，可能是实现所需精度的关键，从而建立基于理论约束的BeEST谱本底模型。

近年来，BeEST合作组开展了密度泛函理论（DFT）计算，以改进电子结合能 [32] 以及核电子俘获率和摇激过程 [43]。这些结果已经增强了第三阶段数据分析能力，未来的进展也将对第四阶段发挥关键作用。对超出突然近似适用范围的摇激概率进行计算也可能十分重要，尤其是在SO阈值附近，此时电子逃逸的时间尺度与晶格中的电子弛豫时间相当。我们计划采用含时方法或连续态畸变波方法研究低能（$\lesssim$10–20电子伏特）连续态电子，或者采用含时密度泛函理论嵌入框架，以约束电离阈值附近突然近似可能带来的偏差。

类似的建模对于其他高分辨率探测器中的精确电子俘获测量也可能很重要，包括用于中微子质量实验的探测器；这些实验基于将 ^{163}Ho植入低温金[45] 或锡 [46] 探测器中的电子俘获衰变。尽管这些实验的主要目标是测量端点能谱，但双空穴激发效应可能会改变该区域的能谱形状。要达到这些合作组所追求的亚电子伏特不确定度，就必须透彻理解不同材料中的双空穴激发摇脱概率。

V. 总结

我们利用截至 4s轨道的关联波函数，计算了原子 ^{7}铍电子俘获衰变的首个完整能谱。计算包含所有单次摇激、双空穴激发和双重摇跃激发。计算结果表明，L俘获后的摇激概率远高于相应的K层俘获概率，约占所有L俘获事件的30%。具体而言，在电子俘获能谱中，L俘获后的K层摇脱不可忽略。在BeEST实验中，摇激跃迁表现为K层和L俘获峰的高能分量，可用展宽的高斯分布或Voigt 函数建模。SO 谱可用幂律和对数正态分布近似，从而减少拟合中的自由参数数量，进而降低搜索超出标准模型的物理学时的系统不确定性。在 $\sim$60 至 $\sim$108电子伏特的关注能区内，预计不会出现可能模拟惰性中微子信号的能谱特征。即使在高统计量能谱中，双重摇激概率目前也太低而无法观测；尽管双重 SO 的贡献仍低于当前探测阈值，将其纳入模拟后，在约136电子伏特处会产生约24%的相对能谱差异，在225电子伏特附近则会产生约12%的差异。这表明，随着第四阶段数据预期带来的统计量提升，此类结构有望在实验上得以探测。

目前，这些计算仅针对孤立原子的波函数。这或许解释了计算所得与测得的摇激和摇出概率之间的差异，因为波函数会受到基质效应的影响，而这些效应来自植入{v1}铍的探测器材料。

这也可能影响能谱形状的细节，尤其是在电离阈值附近，因为基质效应在此处预计更为显著。将这些效应纳入计算将是未来工作的重点。基质效应或许也有助于解释钼5d电子摇激至未占据空态时出现的意外峰展宽；类似地，在原子 ^{7}铍中发现的低能L壳层电子俘获跃迁也更强。不过，这些计算使我们能够重新评估 ^{7}铍中的L/K俘获比；现在，我们建议钼的该比值取0.0756(20)。

致谢

本研究获得葡萄牙科学与技术基金会（FCT）通过研究中心资助 UIDB/04559/2025（LIB-Phys）和 LA/P/0117/2020（关联实验室 LA-REAL）提供的经费支持。J. M 和 J.P.S 感谢德国 EMPIR 根据合同编号 20FUN04 PrimA-LTD 提供的支持。EMPIR 计划由欧盟地平线2020研究与创新计划以及参与该计划的 EMPIR 成员国共同资助。本研究的部分工作是在高性能计算讲席——一项研发基础设施（设于埃武拉大学；首席研究员：M. Avillez）的支持下完成。该基础设施获惠普企业（HPE）认可，并由高等教育机构（阿尔加维大学、埃武拉大学、里斯本新大学和波尔图大学）、研究中心（CIAC、CIDEHUS、CHRC）、企业（HPE、ANIET、ASSIMAGRA、Cluster Portugal Mineral Resources、DECSIS、FastCompChem、GeoSense、GEOtek、Health Tech、Starkdata）以及公共/私人组织（阿连特茹旅游-ERT、KIPT Colab）组成的联盟参与建设。BeEST实验部分经费由戈登与贝蒂·摩尔基金会（10.37807/GBMF11571）、能源部科学办公室核物理处（资助编号 DE-SC0021245 和 DE-FG02-93ER40789）以及 LLNL 实验室指导研发计划（资助编号 19-FS-027 和 20-LW-006）提供。TRIUMF 通过与加拿大国家研究委员会签订的出资协议获得联邦资金。理论工作是欧洲计量创新与研究计划（EMPIR）项目（编号 17FUN02 MetroMMC 和 20FUN09 PrimA-LTD）的一部分。本研究由美国能源部主持，在合同编号 DE-AC52-07NA27344 项下由劳伦斯利弗莫尔国家实验室开展。

[1] S. Dodelson 和 L. M. Widrow，Physical Review Letters **72**, 17（1994）。[2] V. Barger、D. Marfatia 和 K. Whisnant，《中微子物理学》（普林斯顿大学出版社，2012）。[3] A. Y. Smirnov，载于莱苏什，第84卷，D. Kazakov、S. Lavignac 和 J. Dalibard 编（Elsevier，2006），第573–653页。[4] S. Friedrich、G. B. Kim、C. Bray、R. Cantor、J. Dilling、S. Fretwell、J. A. Hall、A. Lennarz、V. Lordi、P. Machule、D. McKeen、X. Mougeot、F. Ponce、C. Ruiz、A. Samanta、W. K. Warburton 和 K. G. Leach，Physical Review Letters **126**, 021803（2021）。[5] C. Santonastaso、N. Casali、L. D. Benedetto、V. Boldrini、R. Buompane、M. Canino、V. Carrano、A. Formicola、L. Gialanella、M. Laubenstein、H. C. Neitzert、M. Pieruccini、G. Porzio 和 A. Rubino，《G辑物理学杂志：核与粒子物理学》**52**，035101（2025）。[6] R. Bhandari、G. Bollen、T. Brunner、N. D. Gamage、A. Hamaker、Z. Hockenbery、M. H. Gamage、D. K. Keblbeck、K. G. Leach、D. Puentes、M. Redshaw、R. Ringle、S. Schwarz、C. S. Sumithrarachchi 和 I. Yandow，《物理评论C》**109**，L022501（2024）。[7] I. Kim、C. Bray、A. Marino、C. Stone-Whitehead、A. Lamm、R. Abells、P. Amaro、A. Andoche、R. Cantor、D. Diercks、S. Fretwell、A. Gillespie、M. Guerra、A. Hall、C. N. Harris、J. T. Harris、C. Hinkle、L. M. Hayen,

P.-A. Hervieux, G.-B. Kim, K. G. Leach, A. Lennarz, V. Lordi, J. Machado, D. McKeen, X. Mougeot, F. Ponce, C. Ruiz, A. Samanta, J. P. Santos, J. Smol- sky, J. Taylor, J. Templet, S. Upadhyayula, L. Wagner, W. K. Warburton, B. Waters, 和 S. Friedrich，《物理评论D》**111**, 052010 (2025)。[8] P. Das 和 A. Ray，《物理评论C》**71**, 025801 (2005)。[9] A. Faessler、L. Gastaldo 和 F. Šimkovic，《物理评论C》**95**, 045502 (2017)。[10] T. A. Carlson、C. W. Nestor、T. C. Tucker 和 F. B. Malik，《物理评论》**169**, 27 (1968)。[11] J. P. Desclaux，《计算物理学通讯》**9**, 31 1975( )。[12] P. Indelicato 和 J. P. Desclaux，《物理评论A》**42**, 5139 1990( )。[13] P. Indelicato，《B辑物理学杂志：原子、分子与光学物理学》**52**, 232001 (2019)。[14] P. J. Mohr，《物理评论A》**46**, 4421 (1992)。[15] P. J. Mohr 和 Y.-K. Kim，《物理评论A》**45**, 2727 (1992)。[16] P. J. Mohr 和 G. Soff，Physical Review Letters**70**, 158 (1993)。[17] T. A. Welton，《物理评论》**74**, 1157 (1948)。[18] P. Indelicato，《物理评论A》**87**, 022501 (2013)。[19] P. Indelicato，“mdfgme 多组态狄拉克-福克代码”，。

[20] R. Loetzsch、H. F. Beyer、L. Duval、U. Spillmann、D. Banaś、P. Dergham、F. M. Kröger、J. Glorius、R. E. Grisenti、M. Guerra、A. Gumberidze、R. Heß、P. M. Hillenbrand、P. Indelicato、P. Jagodzinski、E. Lamour、B. Lorentz、S. Litvinov、Y. A. Litvinov、J. Machado、N. Paul、G. G. Paulus、N. Petridis、J. P. Santos、M. Scheidel、R. S. Sidhu、M. Steck、S. Steydli、K. Szary、S. Trotsenko、I. Uschmann、G. Weber、T. Stöhlker 和 M. Trassinelli, 《自然》**625**, 673 (2024)。[21] G. Audi、A. H. Wapstra 和 C. Thibault, 《核物理A》**729**, 337 (2003)。[22] I. Angeli, 《原子数据与核数据表》**87**, 185 2004( )。[23] T. A. Carlson 和 C. W. Nestor, 《物理评论A》**8**, 2887 1973( )。[24] T. V. B. Nguyen、H. A. Melia、F. I. Janssens 和 C. T. Chantler, 《物理评论A》**105**, 022811 (2022)。[25] A. G. Kochur 和 V. A. Popov, 《B辑物理学杂志：原子、分子与光学物理学》**39**, 3335 (2006)。[26] P. Pyykko 和 M. Atsumi, 《化学——欧洲期刊》**15**, 186 (2009)。[27] M. Guerra、P. Amaro、J. P. Santos 和 P. Indelicato, 《原子数据与核数据表》(2017)。[28] E. Clementi、D. L. Raimondi 和 W. P. Reinhard, 《化学物理学杂志》**47**, 1300 (1967)。[29] J. A. Detwiler 和 R. G. H. Robertson, 《物理评论C》**107**, L042501 (2023)。[30] F. F. Karpeshin 和 M. B. Trzhaskovskaya, 《物理评论C》**107**, 045502 (2023)。[31] V. A. Sevestrean、O. Niţescu、S. Ghinescu 和 S. Sto- ica, 《物理评论A》**108**, 012810 (2023)。[32] A. Samanta、S. Friedrich、K. G. Leach 和 V. Lordi, 《物理评论应用》**19**, 014032 (2023)。[33] I. Angeli 和 K. P. Marinova, 《原子数据与核数据表》**99**, 69 (2013)。[34] I. Hornyák、L. Adamowicz 和 S. Bubin, 《物理评论A》**100**, 032504 (2019)。[35] M. Przybytek 和 M. Lesiuk, 《物理评论A》**98**, 062507 2018( )。[36] A. G. Kochur 和 V. A. Popov, 《光学与光谱学》**100**, 645 (2006)。[37] B. Crasemann、M. H. Chen、J. P. Briand、P. Chevallier、A. Chetioui 和 M. Tavernier, 《物理评论C》**19**, 1042 1979( )。[38] S. Fretwell, K. G. Leach, C. Bray, G. B. Kim, J. Dilling, A. Lennarz, X. Mougeot, F. Ponce, C. Ruiz, J. Stack- house 和 S. Friedrich, 《Physical Review Letters》**125**, 032701 (2020)。[39] J. S. Levinger, 《物理评论》**90**, 11 (1953)。[40] R. G. H. Robertson 和 V. Venkatapathy, 《物理评论 C》**102**, 035502 (2020)。[41] D. R. Tilley, C. M. Cheves, J. L. Godwin, G. M. Hale, H. M. Hofmann, J. H. Kelley, C. G. Sheu 和 H. R. Weller, 《核物理A》**708**, 3 (2002)。[42] A. Braun, H. Wang, J. Shim, S. S. Lee 和 E. J. Cairns, 《电源学报》**170**, 173 (2007)。[43] A. Andoche, L. Mouawad, P. A. Hervieux, X. Mougeot, J. Machado 和 J. P. Santos, 《物理评论A》**109**, 032826 (2024)。[44] A. S. Kheifets 和 B. Igor, 《B辑物理学杂志：原子、分子与光学物理学》**36**, L211 (2003)。[45] L. Gastaldo, K. Blaum, K. Chrysalidis, T. D. Goodacre, A. Domula, M. Door, H. Dorrer, C. E. Düllmann, K. Eberhardt, S. Eliseev, C. Enss, A. Faessler, P. Fil- ianin, A. Fleischmann, D. Fonnesu, L. Gamer, R. Haas, C. Hassel, D. Hengstler, J. Jochum, K. Johnston, U. Kebschull, S. Kempf, T. Kieck, U. Köster, S. Lahiri, M. Maiti, F. Mantegazzini, B. Marsh, P. Nerout- sos, Y. N. Novikov, P. C. O. Ranitzsch, S. Rothe, A. Rischka, A. Saenz, O. Sander, F. Schneider, S. Scholl, R. X. Schüssler, C. Schweiger, F. Simkovic, T. Stora, Z. Szücs, A. Türler, M. Veinhard, M. Weber, M. Wegner, K. Wendt 和 K. Zuber, 《欧洲物理学杂志专题》**226**, 1623 (2017)。[46] M. Faverzani, B. Alpert, D. Backer, D. Bennet, M. Bi- asotti, C. Brofferio, V. Ceriale, G. Ceruti, D. Corsini, P. K. Day, M. D. Gerone, R. Dressler, E. Ferri, J. Fowler, E. Fumagalli, J. Gard, F. Gatti, A. Gi- achero, J. Hays-Wehle, S. Heinitz, G. Hilton, U. Köster, M. Lusignoli, M. Maino, J. Mates, S. Nisi, R. Niz- zolo, A. Nucciotti, A. Orlando, L. Parodi, G. Pessina, G. Pizzigoni, A. Puiu, S. Ragazzi, C. Reintsema, M. Ribeiro-Gomez, D. Schmidt, D. Schuman, F. Sic- cardi, M. Sisti, D. Swetz, F. Terranova, J. Ullom 和 L. Vale, 《低温物理学杂志》**184**, 922 (2016)。