arXiv:2602.17129v1 [physics.atom-ph] 19 Feb 2026

全阶计算中中等电荷离子的布赖特修正

Andoni Skoufris 和 Benjamin M. Roberts*School of Mathematics and Physics, The University of Queensland, Brisbane QLD 4072, Australia(日期：2026年2月19日)

重、中等电荷离子的原子性质对于各种应用都很重要，包括基础物理的精密检验，以及原子钟和核钟的研究与发展。在这些系统中，已知相对论效应（如布赖特相互作用和辐射量子电动力学修正）对于准确理解原子性质至关重要。人们也已知，将关联与布赖特效应一并纳入考虑十分关键。在本研究中，我们将布赖特相互作用纳入铯和钫等电子序列离子的能级与精细结构间隔全阶计算。这需要在全阶关联势方法中修改电子格林函数，以计入布赖特相互作用；该方法利用费曼图技术，对主导微扰图级数进行精确求和。我们发现，沿这些序列的中等电离离子，其能量的布赖特修正非常大，尤其是对 f 态而言。我们还观察到，这些能级与实验结果存在显著偏差。在全阶关联势中纳入布赖特相互作用，相较于仅在二阶水平纳入布赖特相互作用，能带来显著的额外贡献。虽然这并未消除能级上的偏差，但与仅在二阶纳入布赖特相互作用相比，精细结构间隔得到了大幅改善。此外，我们将频率依赖的布赖特相互作用纳入狄拉克-福克程序，并发现，在这一近似阶次下，这不会显著改变能级。

I. 引言

准确理解原子系统的理论具有广泛的物理学应用。例如，对原子内部原子宇称破坏过程进行高精度计算，是检验标准模型之外新物理的最严格手段之一，也是对标准模型（SM）电弱部门进行的精度最高的检验之一，参见例如文献 [1–3]。在此背景下，人们已知原子结构计算通常以狄拉克-福克近似为起点，但仅靠这一近似不足以实现高精度计算，还必须考虑相关效应和相对论效应。布赖特相互作用为库仑相互作用提供了最低阶相对论修正，也是铯等重原子内部最重要的相对论效应之一。例如，将实验结果 [4] 与铯原子宇称破坏的计算结果 [5, 6] 结合后，显示出与标准模型预测存在2.5σ 的偏差。Derevianko [7, 8] 等人 [9–11] 证明，布赖特效应（以及辐射量子电动力学修正 [12–15]）消除了这一分歧。

目前的原子宇称破坏计算与标准模型的符合程度尚可 [16–18]。计算通常只纳入库仑相互作用二阶近似下的布赖特修正单体部分。虽然这种纳入程度显然已能对铯给出非常令人满意的理论预测，但目前仍在开展研究，以探究钫、镭$^+$ 及更重离子中的宇称破坏 [19–21]，；近期也取得了若干重要的实验突破，推动了利用钍原子原子核构建首个核钟的进程 [22–24]。这进一步推动了对重离子和高电荷态体系开展精密原子结构与对称性破缺研究，其中包括利用高电荷态离子作为基础物理敏感探针的设想 [25]。与此同时，基于重离子的原子钟研究 [26–28] 也凸显了这些平台在精密计量学和检验基本对称性方面的广泛潜力。

在这项工作中，我们将证明，对于此类离子，f 态的理论能量与实验值之间的偏差异常大。我们将说明，这些能级的布赖特修正非常大，其量级足以解释这一问题。这一问题与核钟项目尤为相关，因为研究钍用于核钟的长期可行性，一种途径是对其超精细结构进行高精度研究。对此，一种可行的方法是研究 Th^{3+} 离子，其基态为 $5f_{5/2}$；因此，在此类研究中，准确预测重元素中等电荷离子的 f 态至关重要。

鉴于同时处理布赖特相互作用和二阶关联的重要性，在同等基础上纳入布赖特相互作用和全阶关联，也可能在布赖特修正与全阶修正都很大的情况下带来重要修正，例如重离子中的情况。因此，在这项工作中，我们将布赖特相互作用的单体部分纳入文献 [29, 30]，中提出的全阶关联方法的格林函数，从而将布赖特相互作用纳入一系列重要的非微扰关联效应，并对其进行全阶处理（我们强调，这里指的是对剩余库仑相互作用作全阶处理；布赖特相互作用则只能按一阶处理）。我们还

* b.roberts@uq.edu.au

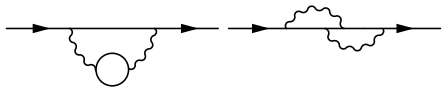

图1. 表示对单价电子态能量的二阶关联修正中直接项（左）和交换贡献（右）的费曼图。

表明，将布赖特相互作用纳入全阶关联势方法，可显著改善精细结构间隔，使其与实验结果几乎完美吻合。然而，理论与实验在能级上的巨大差异仍然存在。我们还将更高阶的相对论修正以频率依赖的布赖特相互作用形式纳入狄拉克-福克方程，但发现由此产生的修正非常小。

II. 理论

单价电子原子系统建模的出发点是狄拉克–福克方程，

$$(h_0 + V_{\rm DF})\,\psi_a = \varepsilon_a \psi_a, \tag{1}$$

其中， h_0 是包含核势的单粒子狄拉克哈密顿量， $V_{\rm DF}$ 是由 $N-1$ 个核电子产生的通常的冻结核狄拉克-福克势。通过在价电子的狄拉克-福克方程中加入非局域能量依赖算符 $\Sigma(\varepsilon)$（称为关联势），可以考虑核电子与价电子之间的关联，

$$[h_0 + V_{\rm DF} + \Sigma(\varepsilon)]\,\psi_a^{\rm (BO)} = \varepsilon_a^{\rm (BO)} \psi_a^{\rm (BO)}, \tag{2}$$

其期望值即为微扰处理剩余电子-电子相互作用所得到的能量关联修正。我们可以按照下文所述，计算 Σ的最低（第二）阶修正或全阶修正。该方程的解称为布吕克纳轨道；该方程的自洽性还包含一项额外修正，即自能算符的链式修正，且该修正取至全阶 [31, 32]。

构造狄拉克-福克势和关联势的传统方法，是假设电子仅通过瞬时库仑相互作用进行相互作用。然而，要对高度相对论性系统进行高精度计算，就需要引入电子间相互作用的相对论修正和量子电动力学修正。在量子电动力学中， $e^-e^- \to e^-e^-$ 散射的最低阶结果表明，库仑相互作用是单个虚光子交换产生的有效相互作用，其阶数为二阶，按 v/c的幂展开时取最低阶。在库仑规范下，这相当于只保留光子传播子的时间分量，而忽略电子之间横向光子的交换。

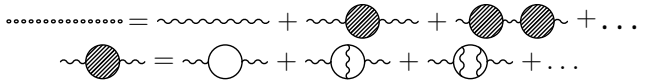

图2. 库仑算符（上）和空穴–粒子相互作用（下）的全阶屏蔽。

当保留传播子的横向分量，但仅取到 $(v/c)^2$, 阶时，得到的有效算符为:

$$B(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = -\frac{e^2}{2r_{12}}\left[\boldsymbol{\alpha}_1\cdot\boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2\cdot\boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2}\right], \tag{3}$$

称为布赖特相互作用，其中 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 是作用于第 i 个电子的狄拉克矩阵，而 $\boldsymbol{r}_{12}$ 是两个电子之间的分离矢量。在费曼规范下，布赖特相互作用则被解释为按 v/c [33] 的幂展开时，库仑相互作用的最低阶相对论修正。

为了高精度计算相对论系统，还必须考虑由真空极化和电子自能引起的量子电动力学辐射效应，我们采用量子电动力学辐射势方法 [15]将其纳入计算。在该方法中，向哈密顿量中加入一个有效局域势，从而能够将量子电动力学辐射修正纳入原子波函数。

A. 将布赖特相互作用纳入关联：二阶

为了更准确地处理相对论系统，应在原子结构计算中纳入布赖特相互作用，主要有两种方法。第一种方法是使用通常的 DF 势求解芯层和价电子波函数，然后将布赖特相互作用简单地作为微扰处理，此时二次量子化哈密顿量为 [8]

$$\begin{aligned} H_C = &\sum_i \varepsilon_i :a_i^\dagger a_i: + \sum_{ij} b_{ij} :a_i^\dagger a_j: \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{ijkl}(g_{ijkl} + b_{ijkl}) :a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k:, \end{aligned} \tag{4}$$

其中 a_i （$a_i^\dagger$ ）从Slater行列式波函数中移除（向其添加）处于态 ψ_i 的一个电子， g_{ijkl} 是二体库仑矩阵元， b_{ijkl} 是二体Breit矩阵元，而 $g_{ij} = \sum_a^{\rm core}$ （$g_{iaja} - g_{iaaj}$）是有效的单体库仑矩阵元， b_{ij}亦然。第二种方法是通过将一体有效Breit算符（$V_{\rm Br}$）$_{ij} = b_{ij}$ 加到DF势中，在Dirac-Fock方程的层面上纳入布赖特相互作用。这样做会在Dirac-Fock方程的层面上修正芯态波函数和激发态波函数，并得到哈密顿量，

$$H_{C+B} = \sum_i \bar{\varepsilon}_i :\bar{a}_i^\dagger \bar{a}_i: + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}(\bar{g}_{ijkl} + \bar{b}_{ijkl}) :\bar{a}_i^\dagger \bar{a}_j^\dagger \bar{a}_l \bar{a}_k: \tag{5}$$

其中我们采用了文献 [8] 的记号，并用上划线表示布赖特-狄拉克-福克（BDF）轨道、波函数、能量等，而通常的Dirac-Fock对应量则不加横线。在第一种方法（4）中，哈密顿量的对角部分将同时受到布赖特相互作用的单体部分和两体部分的修正，这些修正可在微扰理论中逐阶处理。然而，在第二种方法（5）中，在纳入V_{Br} 的情况下迭代Dirac-Fock方程，会捕获将布赖特相互作用的单体部分求和至所有阶的无穷图系列，因此单体布雷特项不会出现在式（5）的哈密顿量中。这意味着，通过在狄拉克–福克程序的层面上纳入布赖特，我们捕获了一组主导图系列，从而确保布赖特相互作用引起的一阶修正恒为零，这也使微扰程序在数值上简单得多。

值得注意的是，虽然这会将布赖特相互作用纳入对布赖特相互作用呈非线性的图中，但布赖特相互作用在各阶产生的效应变化并非源于这些项。任何关于布赖特相互作用的非线性项都纯属非物理项，其影响可通过数值计算 $\partial\varepsilon/\partial\lambda$ 来理解，其中 ε 是布赖特相互作用引起的能量移动，而 λ 是布雷特算符的标度参数（关于此问题的讨论以及严格保持布赖特相互作用线性的另一种处理方法，另见参考文献 [8]）。我们发现，所得修正与 λ 呈线性关系，因此非线性项并无贡献。

参考文献 [8, 34, 35] 已表明，将布赖特相互作用纳入 DF 势所产生的能量和矩阵元修正，其量级或符号可能与仅在同一（第二）阶微扰理论中将其视为微扰所得到的修正不同。这是因为将 V_{Br} 纳入狄拉克–福克程序时会考虑弛豫效应，从而改变之后用于多体微扰理论（MBPT）表达式的芯态和激发态波函数（以及 DF 势本身）。因此，计算关联修正时，必须在 DF 势层面纳入布赖特相互作用，因为这会使布赖特相互作用成为关联计算中的主导贡献。在本研究中，我们沿用参考文献 [8] 的做法，将源自布赖特相互作用纳入 DF 势的修正称为单体布雷特修正。

在二阶关联层面上，构造用于二阶 MBPT 表达式的基组时，将 V_{Br} 加入 DF 势，即可计入单体布赖特修正。尽管影响非常小，我们仍按照二阶关联的常规 MBPT 表达式，计入布赖特相互作用的两体部分；具体做法是将二体库仑矩阵元替换为库仑 $+$ 布赖特矩阵元，$g_{ijkl} \to g_{ijkl} + b_{ijkl}$，如参考文献 [36] 所述。

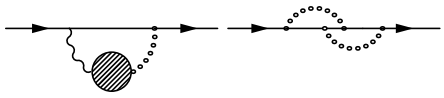

图 3. 直接项（左）和交换（右）的全阶关联修正费曼图。

B. 将布赖特相互作用纳入全阶关联

由于布赖特相互作用在二阶关联中影响很大，将其纳入更高阶关联可能会带来重要的额外修正。尽管关联势可以按库仑相互作用的阶数逐阶展开计算，但要获得精确结果，必须采用全阶方法。因此，本研究将布赖特相互作用纳入微扰理论的费曼图方法，从而能够将布赖特的单体部分纳入一系列重要的多体图中，并对这些图按库仑相互作用的所有阶精确求和。在二阶时，Goldstone 方法与费曼方法在物理上等价；费曼方法中的直接项图和交换图见图 1。对于直接项图，这对应于以下表达式：

$$\Sigma_{\mathrm{d}}^{(2)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\varepsilon) = \int d^3r_i\, d^3r_j \int \frac{d\omega}{2\pi}\, G_{12}(\varepsilon+\omega) \times Q_{1i}\Pi_{ij}(\omega)Q_{j2}, \tag{6}$$

其中 $G_{ij}(\varepsilon) \equiv G(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j;\varepsilon)$ 是狄拉克–福克算符的时间序费曼格林函数，满足：

$$(\varepsilon - h_0 - V^{\mathrm{DF}})G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\varepsilon) = \delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2), \tag{7}$$

$Q_{ij} \equiv |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^{-1}$ 是库仑算符，

$$\Pi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\omega) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\mathrm{Tr}[G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\varepsilon)G(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1;\varepsilon+\omega)] \tag{8}$$

是（核）极化算符，迹是对旋量指标求和。

在全阶关联势方法中，我们通过精确计算图 2 所示的一系列图，将无限多个屏蔽图纳入计算，具体方法见文献 [29, 30, 37]。其中，第一个也是最重要的图对应于原子实对库仑相互作用的屏蔽；第二个称为空穴–粒子相互作用，其物理意义是空穴–粒子环路中的激发电子偏离 V^{N-1} 势。将这一系列图代入二阶费曼图，即可得到全阶关联势，如图 3 所示，从而精确纳入占主导地位的一系列关联修正。由于交换项中的双频率积分计算代价高昂，且交换项相较于直接项较小，我们仅计算直接费曼图，并且

改用包含屏蔽因子的戈德斯通方法计算全阶交换图，具体方法见文献 [29]。

局域势（例如不含交换的DF）的格林函数， G_0 可以用标准格林函数技术精确计算（无需使用基组）。随后可通过求解戴森方程，以非微扰方式计入非局域交换势，

$$G = (1 - G_0 V_{\mathrm{x}})^{-1} G_0, \tag{9}$$

其中 $V_{\mathrm{DF}} = V_{\mathrm{l}} + V_{\mathrm{x}}$ 包含局域直接势和非局域交换项。为了将布赖特相互作用的单体部分纳入关联，我们需要将式（6）中的DF格林函数以及交换图替换为布赖特-狄拉克-福克（BDF）¯格林函数， G，它满足

$$(\varepsilon - h_0 - V_{\mathrm{DF}} - V_{\mathrm{Br}})\bar{G}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; \varepsilon) = \delta^3(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \tag{10}$$

由于有效单体布赖特算符 V_{Br} 只是对DF势的一项附加，我们可以利用戴森方程，以与处理交换势完全相同的方式将其纳入格林函数：

$$\bar{G} = [1 - G_0(V_{\mathrm{x}} + V_{\mathrm{Br}})]^{-1} G_0. \tag{11}$$

¯用 G 而非G 构造费曼图，从而将布赖特相互作用的单体部分纳入关联势。

通过戴森方程将布赖特相互作用纳入格林函数，需要构造 V_{Br} 的坐标表象。构造方式既可以直接根据式（3）进行，也可以利用一组完备的波函数来完成，

$$V_{\mathrm{Br}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \sum_i \langle \boldsymbol{r}|V_{\mathrm{Br}}|i\rangle\langle i|\boldsymbol{r}'\rangle = \sum_i [V_{\mathrm{Br}}\psi_i](\boldsymbol{r})\psi_i^\dagger(\boldsymbol{r}'). \tag{12}$$

实际计算中，我们在半径为90 a.u.的腔体内，使用90个氢样基态对分波 $l = 0$ 至 $l = 6$ 进行求和。这也使我们能够轻松考虑 V_{Br}的旋量结构，如下文所述。

本文采用狄拉克表象，并假设可分离波函数具有如下形式：

$$\psi_{n\kappa m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} f_{n\kappa}(r)\Omega_{\kappa m}(\boldsymbol{n}) \\ i g_{n\kappa}(r)\Omega_{-\kappa, m}(\boldsymbol{n}) \end{pmatrix}, \tag{13}$$

其中， f 和 g 分别是波函数的大分量和小分量，Ω 是二分量旋量。实际上，角积分可以解析地完成，因此我们只需对径向积分进行数值计算。同样，格林函数以及交换（和布赖特）势都可以表示为径向旋量矩阵，其分量可记为

$$G(r_i, r_j) \equiv \begin{pmatrix} G_{ff}(r_i, r_j) & G_{fg}(r_i, r_j) \\ G_{fg}(r_i, r_j) & G_{gg}(r_i, r_j) \end{pmatrix}, \tag{14}$$

与库仑相互作用不同，布赖特相互作用会混合波函数的相对论和非相对论旋量分量。符号上，交换势的结构为

$$V_{\mathrm{x}}(r, r') \sim \sum_b \begin{pmatrix} f_b(r)f_b(r') & f_b(r)g_b(r') \\ g_b(r)f_b(r') & g_b(r)g_b(r') \end{pmatrix}, \tag{15}$$

而一体有效Breit算符的形式为

$$V_{\mathrm{Br}}(r, r') \sim \sum_b \begin{pmatrix} g_b(r)f_b(r') & g_b(r)g_b(r') \\ \pm f_b(r)f_b(r') & f_b(r)g_b(r') \end{pmatrix}, \tag{16}$$

可以看出，对于交换势，交换势的 ff 部分最大；而对于单体布赖特算符，最重要的贡献来自非对角（fg 和 gf）分量。通常，只包含格林函数的非相对论（ff）部分是合理的近似，但这样会忽略单体布赖特算符的最大贡献。因此，在利用布赖特相互作用求解戴森方程时，我们使用了完整的格林函数。此外，由于极化算符包含对两个格林函数乘积的旋量指标求迹，我们在该迹运算中纳入了格林函数的所有分量。

需要指出的是，采用 BDF 轨道时，双体 Breit 修正仅在剩余电子-电子相互作用的二阶中才首次出现非零值 [参见公式（5）]。由于已知双体 Breit 修正比单体修正小一个数量级或更多，因此我们在构造全阶关联势时不将其纳入，不过，我们使用戈德斯通方法在二阶层面纳入这些修正（参见文献 [38, 39]）。

III. 结果与讨论

A. 能量

表I 展示了我们计算得到的钫最低能级价态的理论能量。可以看出，除 $6d$ 能级外，所有能级的理论结果与实验都符合得非常好。对于这些能级，偏差源于相应价态与原子实的强重叠，这意味着价电子-原子实相互作用尤为重要。通过纳入所谓的梯形图 [41], 可以改善能级计算结果；这些图计及了上述相互作用。需要注意的是，对于几乎所有价态，最重要的布赖特修正都出现在 $\Sigma^{(2)}$ 能级 [的 $\delta B(\Sigma^{(2)})$列], ，而将布赖特相互作用纳入 $\Sigma^{(\infty)}$ [所带来的额外修正显示在 $\delta B(\Sigma^{(\infty)})$列] ，在大多数情况下只产生很小的修正。对于某些能级，例如$7s_{1/2}$，将布赖特相互作用纳入$\Sigma^{(\infty)}$ 所带来的额外修正十分重要，几乎完全抵消了二阶水平上的修正。然而，在这些情况下，

表 I. 钫理论电离能与实验能量（cm^{-1}）的比较，并列出狄拉克-福克（DF）层次以上的贡献细目：全阶关联 $\Sigma^{(\infty)}$、二阶（$\Sigma^{(2)}$）和全阶（$\Sigma^{(\infty)}$）布赖特修正，以及量子电动力学修正。列 δB（$\Sigma^{(2)}$）表示将布赖特相互作用的单体和两体部分纳入 $\Sigma^{(2)}$ 所产生的布赖特修正，而列 δB（$\Sigma^{(\infty)}$）表示将布赖特相互作用纳入 $\Sigma^{(\infty)}$ 中的格林函数所产生的额外修正。理论总能量为各列之和。

Fr	DF	$\delta\Sigma^{(\infty)}$	$\delta B(\Sigma^{(2)})$	$\delta B(\Sigma^{(\infty)})$	QED	总计	实验值 [40]	Δ	Δ (%)
$7s_{1/2}$	28767.1	4076.3	5.7	−5.4	−45.3	32798.3	32848.9	−50.6	−0.15
$7p_{1/2}$	18855.2	1769.9	−14.4	−1.2	0.9	20610.3	20611.5	−1.1	−0.01
$7p_{3/2}$	17655.3	1255.2	−0.5	−1.6	−0.4	18908.0	18924.9	−16.9	−0.09
$6d_{3/2}$	13825.5	2796.2	33.9	−4.1	11.5	16663.1	16619.0	44.1	0.27
$6d_{5/2}$	13924.5	2515.8	37.0	−4.1	8.9	16482.1	16419.2	62.9	0.38
$8s_{1/2}$	12281.5	813.9	−0.1	−0.9	−9.8	13084.6	13108.9	−24.3	−0.18
$8p_{1/2}$	9240.3	494.3	−4.8	−0.4	0.3	9729.7	9735.9	−6.3	−0.06
$8p_{3/2}$	8811.2	375.6	−0.5	−0.5	−0.1	9185.8	9190.6	−4.8	−0.05

TABLE II. 镧$^{2+}$ 理论电离能与实验能量的比较（cm^{-1}）.

La^{2+}	DF	$\delta\Sigma^{(\infty)}$	$\delta B(\Sigma^{(2)})$	$\delta B(\Sigma^{(\infty)})$	QED	总计	实验值 [40]	Δ	Δ (%)
$5d_{3/2}$	144973	10417.1	62.6	−2.1	35.6	155487	154675	812	0.52
$5d_{5/2}$	143712	10022.0	110.2	−3.9	29.4	153870	153072	798	0.52
$4f_{5/2}$	114362	33114.6	748.1	−29.0	119.1	148315	147480	835	0.57
$4f_{7/2}$	113259	32599.3	889.6	−40.2	109.5	146817	145980	837	0.57
$6s_{1/2}$	134360	6849.9	−17.3	−5.2	−68.1	141119	141084	35	0.02
$6p_{1/2}$	108013	4774.9	−55.4	−1.9	6.0	112737	112660	77	0.07
$6p_{3/2}$	105315	4330.3	−19.0	−2.8	0.4	109624	109564	60	0.05
$7s_{1/2}$	70190	2119.6	−8.3	−1.6	−23.3	72276	72328	−52	−0.07
$6d_{3/2}$	69863	2315.8	8.1	−1.7	6.4	72192	72294	−102	−0.14
$6d_{5/2}$	69464	2277.9	19.2	−2.1	5.2	71765	71861	−96	−0.13

与实验结果的偏差并未受到这一额外修正的显著影响。

同样，表 II 展示了我们计算得到的 La^{2+} 能级，并与实验结果进行了比较。可以看到，除 $5d$and $4f$ 态外，所有最低能态的结果都与实验非常吻合，偏差不超过 0.1%。 $5d$ 态的偏差源于遗漏了梯形图，这一点在讨论钫时已经提到。$5f_{5/2}$ 能级与实验结果的偏差为 835 cm^{-1}，与该能级处 748 cm^{-1} 的布赖特修正量级相同。Ce^{3+}、Ac^{2+} 和 Th^{3+} 等离子也有相同的情况： f 态在 $\Sigma^{(2)}$ 能级处受到非常大的布赖特修正，其量级与这些态相对于实验结果的较大偏差相同。这对于 Ce^{3+} 和 Th^{3+} 这类体系尤其是个重要问题，因为这两种离子的基态分别为 $4f_{5/2}$ 和 $5f_{5/2}$。表 II 还显示，虽然在 $\Sigma^{(\infty)}$ 中纳入布赖特相互作用会带来重要修正，使 $\Sigma^{(2)}$ 处很大的布赖特修正从 748.1 cm^{-1} 降至 719 cm^{-1}，但这仍不足以消除与实验结果之间的巨大差异。Ce^{3+}、Ac^{2+} 和 Th^{3+} 也有同样的情况。因此，尽管将布赖特相互作用纳入全阶关联势后，二阶计算中非常大的布赖特修正有所减小，但额外的修正仍不足以消除与实验结果之间的偏差。同样，文献 [42] 使用较简单的布赖特相互作用处理方法，也发现 f 态存在较大的布赖特修正。

另一个重要的补充说明是，在镭中，$7d_{5/2}$ 能级的电离能低于 $5f_{5/2}$能级，但在 $\Sigma^{(\infty)}$能级计算中，这种能级顺序的预测有误；加入布赖特修正后，这一问题得到纠正。这进一步表明，布赖特相互作用在纳入关联效应时发挥着重要作用，因为只有将布赖特相互作用纳入 $\Sigma^{(2)}$ 或 $\Sigma^{(\infty)}$后，这种能级顺序才得到纠正。表III 详细列出了布赖特修正在微扰理论各阶的贡献。由此可以更清楚地看到，纳入 $\Sigma^{(\infty)}$后布赖特修正如何发生变化，但这还不足以大幅缩小与实验值的偏差。最后，表V 给出了我们对铯和钫等电子序列中若干离子能级的计算结果，并与实验值进行了比较。

B. 精细结构间隔

表IV 给出了我们在 $\Sigma^{(\infty)}$ 阶计算得到的精细结构间隔，随后各列显示了在每一阶纳入布赖特所带来的修正

表 III. 微扰理论各阶对 La^{2+} 能级的累积布赖特修正与总量子电动力学修正（cm^{-1}）。标记为 $\langle B\rangle$ 的列给出一阶布赖特修正，Dirac-Fock 给出将 $V_{\rm Br}$ 纳入狄拉克–福克程序时对 Dirac-Fock 能量的修正， $\Sigma^{(2)}$ 和 $\Sigma^{(\infty)}$ 列分别是仅将布赖特的单体部分纳入 $\Sigma^{(2)}$ 和 $\Sigma^{(\infty)}$时对 $\Sigma^{(2)}$ 和 $\Sigma^{(\infty)}$ 能量的修正。最后， $B^{(2)}$ 给出因将布赖特相互作用的两体部分纳入 $\Sigma^{(2)}$而对相应能量的修正，该修正采用戈德斯通方法计算。

	布赖特					QED
	$\langle B\rangle$	DF	$\Sigma^{(2)}$	$\Sigma^{(2)}+B^{(2)}$	$\Sigma^{(\infty)}+B^{(2)}$	
$5d_{3/2}$	−196.9	48.5	57.3	62.6	60.6	35.6
$5d_{5/2}$	−147.6	88.0	105.1	110.2	106.3	29.4
$4f_{5/2}$	−406.5	619.6	727.6	748.1	719.1	119.1
$4f_{7/2}$	−275.7	722.9	868.5	889.6	849.4	109.5
$6s_{1/2}$	−116.3	−30.2	−20.6	−17.3	−22.5	−68.1
$6p_{1/2}$	−105.5	−58.5	−57.9	−55.4	−57.3	6.0
$6p_{3/2}$	−75.4	−27.7	−21.1	−19.0	−21.9	0.4
$7s_{1/2}$	−42.2	−12.2	−9.5	−8.3	−9.9	−23.3
$6d_{3/2}$	−41.5	2.8	7.1	8.1	6.4	6.4
$6d_{5/2}$	−31.7	12.7	18.2	19.2	17.1	5.2

表 IV. 将 La^{2+}的理论精细结构间隔，以及 Ce^{3+}、Ac^{2+} 和 Th^{3+}的最低 f 间隔与实验值（cm^{-1}）进行比较，并给出各近似层级上贡献的分解。每列之和给出总的理论精细结构间隔。

		$\Sigma^{(\infty)}$	$\delta B^{(\rm DF)}$	$\delta B(\Sigma^{(2)})$	$\delta B(\Sigma^{(\infty)})$	QED	总计	实验值	Δ
La^{2+}	$6p$	3143	−30.8	−5.6	1.0	5.6	3113.1	3095.9	17.2
	$7p$	1199	−12.6	−1.5	−0.6	1.5	1186.5	1229.1	−42.6
	$5d$	1656	−39.5	−8.0	1.8	6.2	1616.7	1603.2	13.5
	$6d$	436	−9.9	−1.2	0.4	1.3	427.4	433.5	−6.1
	$4f$	1618	−103.4	−38.1	11.1	9.6	1497.8	1500.3	−2.5
Ce^{3+}	$4f$	−2421	166.4	28.6	−9.4	−13.1	−2248.2	−2253.0	4.8
Ac^{2+}	$5f$	−2675	44.7	37.9	−10.3	−18.1	−2620.9	−2625.8	4.9
Th^{3+}	$5f$	−4433	110.5	30.7	−9.5	−24.0	−4325.3	−4325.0	−0.3

微扰理论。由于精细结构分裂是高度相对论性效应，与关联修正相比，布赖特对精细结构间隔精度的影响应当大得多。我们可以看到，对于 p 和 d间隔，在每一阶纳入布赖特通常既不会改善也不会恶化与实验的符合程度：对于 $6p$、 $7p$和 $5d$，在$\Sigma^{(\infty)}$ 阶由布赖特贡献引起的精细结构间隔修正偏离实验，而对于 $6d$ 和$5f$ 间隔，该修正使理论值更接近实验。然而，对于 $4f$ 间隔，$B^{(\infty)}$ 修正使理论预测与实验值的相对差处于0.2%以内。 $\Sigma^{(\infty)}$ 修正对 $4f$ 间隔（Ce^{3+} ）以及$5f$ 间隔（Th^{3+}）同样重要，这可在表IV底部看到。因此，虽然f 态（中等电荷离子）的能级仅因将布赖特相互作用纳入全阶关联势而略有改善， f 精细结构间隔则得到显著改善。

IV. 额外的相对论修正

显然，将（单体）布赖特相互作用纳入全阶关联势，虽能改善精细结构间隔，却无助于实质性地缩小类铯和类钫离子的理论能量与实验能量之间的显著差异。鉴于布赖特修正的量级似乎足以解决这一问题，我们因此可以尝试纳入布赖特相互作用以外的其他相对论修正。理论上，可以在量子电动力学中将单光子交换按二阶处理，并保留v/c的阶数项[3]。不过，也可以保留光子传播子相对论展开中的所有项，由此得到式（3）的一种推广，称为频率依赖的布赖特相互作用。当光子场在库仑规范下量子化时，所得表达式为

表 V. 所选铯类和钫类离子的能级（cm^{-1}）。第一列 $\Sigma^{(\infty)}$ 显示使用全阶关联势方法得到的能级，后面两列分别显示纳入布赖特相互作用和量子电动力学辐射势方法后产生的修正，其中布赖特列为 $\Sigma^{(\infty)}$ 阶的布赖特修正。Δ 显示与取自参考文献 [40]的实验值之间的百分比偏差。

Fr	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)	Ra^+	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)
$7s_{1/2}$	32843	0.3	−45.3	32798	32849	−0.15	$7s_{1/2}$	81958	−16.3	−86.3	81855	81843	0.02
$7p_{1/2}$	20625	−15.6	0.9	20610	20611	−0.01	$6d_{3/2}$	70124	66.5	42.7	70233	69758	0.68
$7p_{3/2}$	18910	−2.1	−0.4	18908	18925	−0.09	$6d_{5/2}$	68438	91.5	33.1	68562	68100	0.68
$6d_{3/2}$	16622	29.9	11.5	16663	16619	0.27	$7p_{1/2}$	60606	−53.5	2.3	60555	60491	0.11
$6d_{5/2}$	16440	32.9	8.9	16482	16419	0.38	$7p_{3/2}$	55669	−13.3	−1.7	55654	55634	0.04
$8s_{1/2}$	13095	−0.9	−9.8	13085	13109	−0.18	$8s_{1/2}$	38427	−7.1	−24.7	38395	38437	−0.11
$8p_{1/2}$	9735	−5.2	0.3	9730	9736	−0.06	$7d_{3/2}$	33070	9.1	8.3	33088	33098	−0.03
$8p_{3/2}$	9187	−0.9	−0.1	9186	9191	−0.05	$5f_{5/2}$	32489	127.9	30.4	32647	32855	−0.63
$7d_{3/2}$	8611	7.8	3.4	8622	8605	0.20	$7d_{5/2}$	32577	16.2	6.5	32599	32602	−0.01
$7d_{5/2}$	8525	9.1	2.7	8537	8516	0.25	$5f_{7/2}$	32262	124.8	25.0	32411	32570	−0.49
$5f_{7/2}$	6951	0.4	0.0	6952			$8p_{1/2}$	31244	−19.9	0.8	31225	31236	−0.04
$5f_{5/2}$	6949	0.9	0.1	6950			$8p_{3/2}$	29449	−5.7	−0.6	29443	29450	−0.03
La^{2+}	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)	Ac^{2+}	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)
$5d_{3/2}$	155391	60.6	35.6	155487	154675	0.52	$7s_{1/2}$	141159	−41.6	−130.0	140987	140630	0.25
$5d_{5/2}$	153734	106.3	29.4	153870	153072	0.52	$6d_{3/2}$	140622	68.7	67.1	140758	139829	0.66
$4f_{5/2}$	147476	719.1	119.1	148315	147480	0.57	$6d_{5/2}$	137166	120.0	51.5	137337	136426	0.67
$4f_{7/2}$	145858	849.4	109.5	146817	145980	0.57	$5f_{5/2}$	117194	594.4	157.6	117946	117176	0.66
$6s_{1/2}$	141210	−22.5	−68.1	141119	141084	0.02	$5f_{7/2}$	114519	666.7	139.5	115325	114550	0.68
$6p_{1/2}$	112788	−57.3	6.0	112737	112660	0.07	$7p_{1/2}$	111680	−103.5	3.0	111579	111164	0.37
$6p_{3/2}$	109645	−21.9	0.4	109624	109564	0.05	$7p_{3/2}$	102949	−31.8	−4.0	102913	102567	0.34
$7s_{1/2}$	72309	−9.9	−23.3	72276	72328	−0.07	$8s_{1/2}$	71860	−17.7	−43.0	71800		
$6d_{3/2}$	72179	6.4	6.4	72192	72294	−0.14	$7d_{3/2}$	68031	6.7	13.9	68051		
$6d_{5/2}$	71742	17.1	5.2	71765	71861	−0.13	$7d_{5/2}$	66975	21.6	10.7	67007		
Ce^{3+}	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)	Th^{3+}	$\Sigma^{(\infty)}$	布赖特	QED	总计	实验值	Δ (%)
$4f_{5/2}$	298087	869.7	153.3	299110	297670	0.48	$5f_{5/2}$	231687	760.3	215.1	232663	231065	0.69
$4f_{7/2}$	295666	1055.2	140.2	296862	295417	0.49	$5f_{7/2}$	227254	892.1	191。1	228337	226740	0.70
$5d_{3/2}$	248771	54.5	48.2	248874	247933	0.38	$6d_{3/2}$	223190	55.8	88.9	223334	221872	0.66
$5d_{5/2}$	246208	122.4	39.2	246369	245444	0.38	$6d_{5/2}$	217816	135.3	67.6	218018	216579	0.66
$6s_{1/2}$	211329	−41.8	−95.4	211192	211068	0.06	$7s_{1/2}$	209030	−73.9	−177.1	208779	207934	0.41
$6p_{1/2}$	174690	−111.0	6.7	174586	175085	−0.29	$7p_{1/2}$	171877	−163.4	2。8	171717	170826	0.52
$6p_{3/2}$	169840	−48.2	−0.9	169791	170378	−0.34	$7p_{3/2}$	158860	−55.7	−7.3	158797	158009	0.50
$6d_{3/2}$	117790	−1.2	9.9	117799	120472	−2.22	$8s_{1/2}$	111292	−34.3	−62.6	111195	111443	−0.22
$6d_{5/2}$	117073	16.9	7.5	117097	118757	−1.40	$7d_{3/2}$	110011	−4.9	17.9	110024	111380	−1.22
$7s_{1/2}$	113015	−19.7	−34.3	112962	114168	−1.06	$7d_{5/2}$	108328	18.3	13。1	108359	109638	−1.17

为

$$B_C(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\omega) = -e^2\left\{\frac{\boldsymbol{\alpha}_1\cdot\boldsymbol{\alpha}_2}{r} + (\boldsymbol{\alpha}_1\cdot\nabla_1)(\boldsymbol{\alpha}_2\cdot\nabla_2)\left[\frac{\cos(\omega r)-1}{\omega^2 r}\right]\right\}, \tag{17}$$

而在洛伦兹规范下，相应的结果为 [39, 43]

$$B_L(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\omega) = -\frac{e^2}{r}\left[(\boldsymbol{\alpha}_1\cdot\boldsymbol{\alpha}_2-1)\cos(\omega r)+1\right], \tag{18}$$

这有时也称为莫勒相互作用。可以证明，只有在局域势中求解波函数时，不同规范下两个不同算符的矩阵元才会一致，因此在使用狄拉克–福克近似计算波函数时，它们并不相等。然而，通常认为应使用库仑规范表达式，因为洛伦兹规范表达式会导致错误项，而这些错误项只有在更高阶微扰理论中才能得到修正{v1}

，这也是我们将在本文中采用的表达式。尽管已有多项数值研究将频率相关的布赖特相互作用作为一阶微扰加以使用，但将频率相关的布赖特相互作用纳入狄拉克-福克程序的研究却很少。已有研究预测，与使用 B 相比，使用 $B_C(\omega)$对狄拉克–福克能量的贡献在文献 [34]中被认为很小。

A. 数值结果

表VI 展示了将频率依赖的布赖特相互作用纳入狄拉克-福克程序后，对重离子能级的影响。在这

表 VI. 频率无关的布赖特相互作用 B 和频率依赖的布赖特相互作用 B_ω对选定离子的价能级产生的累积一阶修正和 DF 级修正（cm^{-1}）的比较。

Cs	$\langle B\rangle$	$\langle B_\omega\rangle$	$B^{(\mathrm{DF})}$	$B_\omega^{(\mathrm{DF})}$	Ce^{3+}	$\langle B\rangle$	$\langle B_\omega\rangle$	$B^{(\mathrm{DF})}$	$B_\omega^{(\mathrm{DF})}$
$6s_{1/2}$	29.19	29.37	3.20	3.88	$6s_{1/2}$	167.9	168.4	51.5	54.5
$6p_{1/2}$	15.01	14.99	7.49	7.66	$6p_{1/2}$	167.5	167.2	96.3	97.6
$6p_{3/2}$	10.84	10.49	2.87	2.59	$6p_{3/2}$	119.6	115.4	47.9	44.3
$5d_{3/2}$	12.47	12.41	−10.15	−9.85	$5d_{3/2}$	291.9	291.0	−39.3	−35.4
$5d_{5/2}$	9.42	9.39	−11.69	−11.21	$5d_{5/2}$	219.5	219.4	−101.0	−96.1
$4f_{5/2}$	0.00	0.00	−0.02	−0.02	$4f_{5/2}$	616.7	613.8	−806.3	−789.4
$4f_{7/2}$	0.00	0.00	−0.02	−0.02	$4f_{7/2}$	423.6	423.2	−972.7	−953.3
Fr	$\langle B\rangle$	$\langle B_\omega\rangle$	$\langle B\rangle$	$B_\omega^{(\mathrm{DF})}$	Th^{3+}	$\langle B\rangle$	$\langle B_\omega\rangle$	$B^{(\mathrm{DF})}$	$B_\omega^{(\mathrm{DF})}$
$7s_{1/2}$	66.94	67.39	6.34	10.15	$7s_{1/2}$	324.8	327.3	88.5	102.3
$7p_{1/2}$	29.63	29.80	14.26	15.39	$7p_{1/2}$	298.5	301.3	164.3	173.6
$7p_{3/2}$	18.50	17.16	4.40	3.26	$7p_{3/2}$	184.1	169.9	66.6	54.3
$6d_{3/2}$	18.81	18.72	−12.50	−11.46	$6d_{3/2}$	438.9	436.3	−42.9	−30.1
$6d_{5/2}$	14.90	14.76	−14.08	−12.45	$6d_{5/2}$	324.8	322.3	−111.3	−97.8
$5f_{5/2}$	0.01	0.01	−0.05	−0.05	$5f_{5/2}$	704.5	702.1	−698.1	−660.2
$5f_{7/2}$	0.01	0.01	−0.05	−0.04	$5f_{7/2}$	520.2	520.3	−808.6	−770.0

张表中，我们还展示了将 $B_C(\omega)$ 简单视为系统的一阶微扰时，对相同能级产生的修正。首先可以看出，与将布赖特相互作用视为微扰相比，将其纳入 DF 程序会导致截然不同的修正，差异不仅体现在量级上，对 d 和 f 态而言，符号也不同。例如，在钪中，将 B 视为一阶微扰，或将其纳入 DF 程序处理时，对 $5d$ 能级产生的修正大小相等、符号相反。有些情况下，这种差异甚至更大；在 Ce^{3+} 中，DF 对 $4f$ 能级的修正（ B 和B_ω两种情况均如此）与一阶修正符号相反，且数值是后者的两倍。

比较由 B 和$B(\omega$引起的一阶修正，可以发现两者的差异通常很小，约为 $\sim$ 0.01% 的 $\langle B\rangle$ 修正量；不过，随着离子变重，这一差异会增大。文献 [39, 46] 中对闭壳层原子基态能量的研究也观察到了这一现象。相应的 DF 修正也呈现这一规律，但与一阶修正相比，差异更为明显。例如，对于 Th $5f_{5/2}$中的能级$^{3+}$， $\langle B_\omega\rangle$和 $\langle B\rangle$之间的差异仅为该阶总计 B_ω 布赖特修正（即包含频率依赖效应）的 0.34%；而在 DF 级别，差异则占总计 $B_\omega^{(\mathrm{DF})}$ 布赖特修正的 5.7%。因此，与仅将布赖特相互作用作为一阶微扰处理相比，将其纳入 DF 程序时，频率依赖效应更为重要。

尽管如此，对我们的研究而言，重要的是，在类铯离子中，将 B 而非 $B(\omega)$纳入狄拉克–福克程序所产生的差异非常小；而对于类钪离子，这一差异虽然有所增大，但似乎仍不足以消除 B 在能级计算中造成的较大偏差——。例如，由 B 引起的$5f_{5/2}$ 能级的狄拉克–福克修正为 $-698.1\mathrm{cm}^{-1}$，而由 $B(\omega)$引起的相应修正略小，为 $-660.2\mathrm{cm}^{-1}$。虽然这一修正使理论值更接近实验值，但其幅度仍不足以弥合两者之间的较大偏差。

V. 结论

本研究展示了在全阶关联势方法中纳入布赖特相互作用后，它对中等电荷重离子原子性质计算的影响。在 Fr 和 Cs 等电子序列中，布赖特相互作用在剩余电子相互作用的二阶近似下，对 f 态能级的影响很大，其量级与理论能量和实验能量之间显著的实验偏差相当。将布赖特相互作用纳入全阶关联势方法中的费曼格林函数后，我们发现精细结构间隔的理论值与实验值极为吻合；然而，能级与实验值之间的较大偏差依然存在。此外，我们将频率依赖的布赖特相互作用纳入狄拉克-福克方程，发现其贡献可以忽略不计，这与预期一致。

致谢

本研究得到澳大利亚研究委员会通过DECRA奖学金DE210101026和Discovery项目DP230101685的资助。

[1]J. S. M. Ginges 和 V. V. Flambaum，《原子中基本对称性的破坏及对基本粒子统一理论的检验》，《物理报告》397，63（2004），arXiv:physics/0309054。[2] B. M. Roberts、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum，《原子系统中的宇称与时间反演破坏》，《核科学年度评论》65，63（2015），arXiv:1412.6644。[3] M. S. Safronova、D. Budker、D. Demille、D. F. J. Kimball、A. Derevianko 和 C. W. Clark，《利用原子和分子探索新物理》，《现代物理评论》90，025008（2018），arXiv:1710.01833。[4] C. S. Wood、S. C. Bennett、D. Cho、B. P. Masterson、J. L. Roberts、C. E. Tanner 和 C. E. Wieman，《铯中的宇称不守恒和环偶极矩测量》，《科学》275，1759（1997）。[5] V. A. Dzuba、V. V. Flambaum 和 O. P. Sushkov，《对铯原子中 $6s-7s$ 跃迁的宇称不守恒E1振幅进行高阶微扰理论求和》，《物理快报A》141，147（1989）。[6] S. A. Blundell、W. R. Johnson 和 J. Sapirstein，《铯原子能量和矩阵元的相对论全阶计算》，《物理评论A》43，3407（1991）。[7] A. Derevianko，《铯中宇称不守恒测量结果与标准模型的协调》，物理评论快报85，1618（2000），arXiv:hep-ph/0005274。[8] A. Derevianko，《布赖特相互作用的关联多体处理及其在铯原子性质和宇称破坏中的应用》，《物理评论A》65，012106（2001），arXiv:physics/0108033。[9] O. P. Sushkov，《布赖特相互作用对多电子原子中外部 s 电子超精细常数的修正》，《物理评论A》63，042504（2001），arXiv:physics/0010028。[10] V. A. Dzuba、C. Harabati、W. R. Johnson 和 M. S. Safronova，《布赖特修正对铯中宇称不守恒振幅的影响》，《物理评论A》63，044103（2001）。[11] M. G. Kozlov、S. G. Porsev 和 I. I. Tupitsyn，《铯中 $6s \to 7s$ 宇称不守恒振幅的高精度计算》，物理评论快报86，3260（2001），arXiv:physics/0101053。[12]W. R. Johnson、I. Bednyakov 和 G. Soff，《真空极化对铯中宇称不守恒 ^{133} $6s-7s$ 跃迁振幅的修正》，物理评论快报87，233001 2001 0110262（），arXiv:hep-ph/。[13] M. Yu. Kuchiev 和 V. V. Flambaum，《量子电动力学辐射修正对重原子宇称不守恒的影响》，物理评论快报89，283002（2002），arXiv:hep-ph/0206124。[14] A. I. Milstein、O. P. Sushkov 和 I. S. Terekhov，《重原子的辐射修正与宇称不守恒》，物理评论快报89，283003（2002），arXiv:hep-ph/0208227。[15] V. V. Flambaum 和 J. S. M. Ginges，《辐射势及多电子原子能级和电磁振幅的量子电动力学辐射修正计算》，《物理评论A》72，052115（2005），arXiv:physics/0507067。[16] V. A. Dzuba、V. V. Flambaum 和 J. S. M. Ginges，《铯中宇称不守恒的高精度计算及标准模型检验》，物理评论D 66，076013 2002 0204134（），arXiv:hep-ph/。[17]S. G. Porsev、K. Beloy和A. Derevianko，由原子宇称破坏精确测定电弱耦合及其对粒子物理学的意义，物理评论快报102，181601（2009年），arXiv:0902.0335；由原子宇称破坏精确测定 ^{133}铯的弱电荷，物理评论D 82, 036008（2010年），arXiv:1006.4193。[18] V. A. Dzuba、J. C. Berengut、V. V. Flambaum和B. M. Roberts，重新审视铯中的宇称不守恒，物理评论快报109, 203003（2012年），arXiv:1207.5864。[19] M. Nu˜nez Portela、E. A. Dijck、A. Mohanty、H. Bekker、J. E. van den Berg、G. S. Giri、S. Hoekstra、C. J. G. Onderwater、S. Schlesser、R. G. E. Timmermans、O. O. Versolato、L. Willmann、H. W. Wilschut和K. Jungmann，Ra^+ 离子囚禁：迈向原子宇称破坏测量与光学钟，应用物理B 114, 173（2014年）。[20] G. Gwinner 和 L. A. Orozco，原子系统中弱相互作用的研究：迈向钫中原子宇称不守恒的测量，量子科学与技术7, 024001（2022年）。[21] B. M. Roberts、V. A. Dzuba和V. V. Flambaum，类钫锕系离子和类Cs稀土金属离子中的宇称不守恒，《物理评论A》88, 012510（2013年），arXiv:1304.7591。[22] J. Tiedau、M. V. Okhapkin、K. Zhang、J. Thielking、G. Zitzer、E. Peik、F. Schaden、T. Pronebner、I. Morawetz、L. T. De Col、F. Schneider、A. Leitner、M. Pressler、G. A. Kazakov、K. Beeks、T. Sikorsky和T. Schumm，Th-229原子核的激光激发，物理评论快报132, 182501（2024年）。[23] C. Zhang、T. Ooi、J. S. Higgins、J. F. Doyle、L. von der Wense、K. Beeks、A. Leitner、G. A. Kazakov、P. Li、P. G. Thirolf、T. Schumm和J. Ye，^{229m}Th核同核异能跃迁与 ^{87}Sr原子钟的频率比，自然633, 63（2024年），arXiv:2406.18719。[24] R. Elwell、C. Schneider、J. Jeet、J. E. S. Terhune、H. W. T. Morgan、A. N. Alexandrova、H. B. Tran Tan、A. Derevianko和E. R. Hudson，固态基质中^{229}Th核同核异能跃迁的激光激发，物理评论快报133, 013201（2024年），arXiv:2404.12311。[25] M. G. Kozlov、M. S. Safronova、J. R. Crespo L´opez-Urrutia和P. O. Schmidt，高电荷态离子：光学钟及其在基础物理中的应用，《现代物理评论》90, 045005（2018年），arXiv:1803.06532。[26] O. O. Versolato、L. W. Wansbeek、K. Jungmann、R. G. E. Timmermans、L. Willmann和H. W. Wilschut，镭同位素中电四极跃迁用于单离子光学频率标准的潜力，《物理评论A》83, 043829（2011年）。[27] C. A. Holliman、M. Fan、A. Contractor、S. M. Brewer和A. M. Jayich，镭离子光学钟，物理评论快报128, 033202（2022年），arXiv:2201.07330。[28] R. B. Cserveny和B. M. Roberts，二价钡离子和二价镭离子的理论表征，《物理评论A》112，032816（2025年），arXiv:2505.05230。[29] V. Dzuba、V. Flambaum、P. Silverstrov和O. Sushkov，原子中库仑相互作用的屏蔽与多体微扰理论，《物理快报A》131, 461（1988年）。[30] V. Dzuba、V. Flambaum和O. Sushkov，微扰理论高阶贡献的求和，对于

铯原子能级的关联修正，《物理快报A》140, 493（1989年）。[31] V. Dzuba、V. Flambaum、P. Silvestrov和O. Sushkov，铯原子中6S → 7S跃迁的宇称破坏的E1振幅的相对论多体计算，《物理快报A》103, 265（1984年）。[32] V. A. Dzuba、V. V. Flambaum、P. G. Silvestrov和O. P. Sushkov，原子中的相对论多体计算与铯中的宇称破坏，《物理学杂志B：原子与分子物理》18, 597（1985年）。[33] W. Greiner和J. Reinhardt编，*Quantum Electrodynamics*，第四版，SpringerLink Bucher（Springer Berlin Heidelberg，2009年）。[34] E. Lindroth、A.-M. Martensson-Pendrill、A. Ynnerman和P. Oster，布赖特相互作用的自洽处理及其在铊电偶极矩中的应用，《物理学杂志B》22, 2447（1989年）。[35] M. G. Kozlov 、 S. G. Porsev 和 I. I. Tupitsyn，重原子中的布赖特相互作用（2000年），arXiv:physics/0004076。[36] W. R. Johnson、S. A. Blundell和J. Sapirstein，沿锂等电子序列的能级多体微扰理论计算，《物理评论A》37, 2764（1988年）。[37] B. M. Roberts、C. J. Fairhall和J. S. M. Ginges，具有一个价电子的原子和离子的电偶极跃迁振幅，《物理评论A》107, 052812（2023年），arXiv:2211.11134。[38]S. A. Blundell、D. S. Guo、W. R. Johnson和J. Sapirstein，一阶、二阶和三阶的公式阶微扰理论，适用于具有一个价电子的原子，《原子数据与核数据表》37，103（1987）。[39] J. B. Mann 和 W. R. Johnson，《多电子原子中的布赖特相互作用》，《物理评论A》4，41（1971）。[40] A. Kramida、Yu. Ralchenko、J. Reader 和 NIST ASD团队，NIST原子光谱数据库（版本5.12），[在线]。网址：https://physics.nist.gov/asd [2025, 11月 25]。美国国家标准与技术研究院，马里兰州盖瑟斯堡。（2024年）。[41] V. A. Dzuba，《关联势与梯形图》，《物理评论A》78，042502（2008）。[42] U. I. Safronova、W. R. Johnson 和 M. S. Safronova，《钫等电子序列中离子的激发能、极化率、多极跃迁率和寿命》，《物理评论A》76，042504（2007），arXiv:0706.1816。[43] I. P. Grant，编者，*Relativistic Quantum Theory of Atomsand Molecules*，《Springer原子、光学与等离子体物理丛书》第40卷（Springer纽约，2007年）。[44] C. T. Chantler、T. V. B. Nguyen、J. A. Lowe 和 I. P. Grant，《自洽方法和组态相互作用方法中布赖特相互作用的收敛性》，《物理评论A》90，062504（2014年）。[45] I. Lindgren，《电子间势的规范依赖性》，《物理学杂志B》23，1085（1990）。[46] I. P. Grant 和 B. J. McKenzie，《原子结构计算中的横向电子-电子相互作用》，《物理学杂志B》13，2671（1980）。