

01

Вклады собственной энергии электрона в потенциалы ионизации атомов щелочных металлов: применение модельного КЭД-оператора

© Н.К. Дулаев^{1,2}, И.И. Тупицын¹, Е.А. Прохорчук¹, Д.П. Усов¹, Р. Yang^{1,3,4}, А.В. Малышев^{1,2}, В.М. Шабаев^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

³ Innovation Academy for Precision Measurement Science and Technology, Chinese Academy of Sciences, Wuhan, China

⁴ University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, China

e-mail: dusov3186@gmail.com

Поступила в редакцию 01.12.2025 г.

В окончательной редакции 01.12.25 г.

Принята к публикации 05.12.2025 г.

В рамках подхода, основанного на модельном КЭД-операторе, проведены расчеты вкладов собственной энергии электрона в потенциалы ионизации ряда щелочных металлов (натрия, калия, рубидия и цезия), а также ионов, имеющих соответствующие электронные конфигурации. Выполнено сравнение с результатами *ab initio* расчетов ведущего порядка теории возмущений при разных способах выбора начального приближения. Получено хорошее согласие между двумя подходами. Продемонстрировано, что сильная зависимость получаемых результатов от выбора гамильтониана нулевого приближения может быть устранена лишь при совмещении метода модельного КЭД-оператора с методом наложения конфигураций, который обеспечивает более аккуратный учет корреляционных эффектов.

Ключевые слова: квантовая электродинамика, модельный КЭД-оператор, собственная энергия, щелочные металлы, потенциалы ионизации.

DOI: 10.61011/OS.2026.03.62767.8839-25

1. Введение

С момента своего окончательного формирования в конце 1940-х годов квантовая электродинамика (КЭД) зарекомендовала себя как мощный инструмент для описания связанных состояний систем, состоящих из электрически заряженных частиц. Первоначально аппарат КЭД применялся преимущественно к легким системам, таким как водород, гелий, позитроний и мюоний. В середине 1980-х годов возникла экспериментальная возможность исследовать тяжелые ионы с относительно небольшим количеством электронов [1]. С теоретической стороны были предприняты значительные усилия для должного описания подобных систем [2–10].

Принципиальное отличие многозарядных ионов от легких атомов, приводящее к необходимости разрабатывать специальные методы для их исследования, связано с тем, что параметр αZ (α — постоянная тонкой структуры, Z — зарядовое число), характеризующий силу взаимодействия ядра и отдельных электронов, не является малым в этом случае и соответственно он непригоден для использования в качестве параметра разложения. Как результат это взаимодействие необходимо учитывать непертурбативно, то есть полностью релятивистским образом. Напротив, эффекты межэлек-

тронного взаимодействия для ионов со средними и большими значениями Z рассматриваются в строгих КЭД-подходах в рамках теории возмущений по $1/Z$ или ее обобщений, основанных на включении некоторых локальных экранирующих потенциалов в гамильтониан нулевого приближения. При этом самые современные и продвинутые *ab initio* методы ограничены КЭД-вкладами второго порядка. Это означает, в частности, что строгое рассмотрение поправок на межэлектронное взаимодействие к ведущим радиационным эффектам, собственной энергии и вакуумной поляризации, возможно в настоящее время только в первом порядке теории возмущений по остаточному взаимодействию [11–13]. Этого, однако, может оказаться недостаточным для описания электронной структуры систем с большим числом электронов, включая нейтральные атомы. Вместе с этим КЭД-вклады оказываются необходимым учитывать даже при рассмотрении сверхтяжелых элементов [14–21]. Более того, и для относительно простых систем, содержащих всего несколько электронов, зачастую требуется реализация весьма сложных КЭД-методов [22–24]. С этой точки зрения КЭД-расчеты представляют собой уникальный продукт и их затруднительно выполнять систематически для произвольных атомных систем. В частности, невозможно напрямую включить строгие КЭД-методы

в стандартные подходы, основанные на гамильтониане Дирака-Кулона-Брейта [25–35]. Ввиду всех вышеизложенных обстоятельств значительный интерес представляет простой и эффективный подход для приближенного учета КЭД-эффектов в релятивистских корреляционных расчетах.

За последние десятилетия был предложен ряд приближенных подходов к учету КЭД-поправок в расчетах уровней энергии [15,36–45]. Основная техническая сложность связана с представлением вкладов, обусловленных собственной энергией электрона. Вклады, соответствующие вакуумной поляризации, которые относятся к тому же порядку КЭД-теории возмущений, описываются локальным потенциалом и по этой причине без труда могут быть включены в релятивистские расчеты. В связи с этим в данной работе на примере вкладов собственной энергии в потенциалы ионизации атомов щелочных металлов (натрия, калия, рубидия и цезия), а также ионов, имеющих соответствующие электронные конфигурации, подробно исследованы возможности применения модельного КЭД-оператора лэмбовского сдвига, предложенного в работах [43,46]. Выполнено сравнение с результатами *ab initio* расчетов в ведущем порядке, а также с имеющимися в литературе оценками, полученными с помощью иных приближенных подходов к учету КЭД-эффектов.

В статье использована релятивистская система единиц ($\hbar = 1$, $c = 1$) и единицы Хэвисайда для заряда ($e^2 = 4\pi\alpha$, $e < 0$).

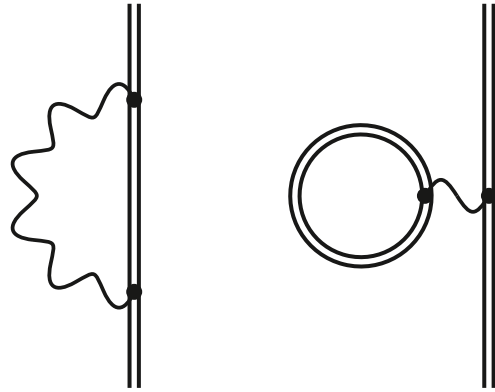
2. Теоретические методы

При исследовании атомных систем со средними и большими значениями Z естественным начальным приближением является одноэлектронное уравнение Дирака:

$$h^D\psi \equiv [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m + V]\psi = \varepsilon\psi, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$ и β — матрицы Дирака, $\mathbf{p} = -i\nabla$ — оператор импульса, V — потенциал, описывающий взаимодействие отдельных электронов с ядром и при необходимости учитывающий также в некотором приближении их взаимодействие друг с другом. В принципе оператор V может быть нелокальным. Например, он может включать прямой и обменный одночастичные потенциалы гамильтониана Дирака–Фока. В последнем случае будем использовать обозначение h^{DF} вместо h^D . Однако при построении КЭД-теории потенциал V необходимо выбирать локальным. Остаточное межэлектронное взаимодействие, а также взаимодействие с квантованным электромагнитным полем рассматривают при этом как возмущения, что приводит к КЭД в картине Фарри [47].

Ведущие КЭД-поправки к уровням энергии могут быть описаны при помощи диаграмм собственной энергии и вакуумной поляризации, показанных на рис. 1. Как отмечалось выше, вкладу вакуумной поляризации соответствует локальный потенциал [2]. После процедуры ультрафиолетовой (УФ) перенормировки данный



КЭД-поправки в ведущем порядке теории возмущений: собственная энергия электрона (слева) и вакуумная поляризация (справа). Двойная линия соответствует пропагатору электрона в локальном потенциале V в уравнении (1). Волнистая линия обозначает пропагатор фотона. Диаграмма, описывающая массовый контрчлен, не показана.

потенциал представляется в виде суммы потенциалов Юлинга [48] и Вичманна–Кролла [49]. Потенциал Юлинга линейно зависит от внешнего поля V , приводящего к поляризации вакуума и в сферически симметричном случае легко может быть вычислен непосредственно или с помощью приближенных формул, представленных в [50]. Потенциал Вичманна–Кролла соответствует третьей и более высоким степеням V , его вычисление в общем случае представляет существенно более сложную задачу [51–54]. Для случая, когда $V = -\alpha Z/r$, то есть для кулоновского потенциала точечного ядра, имеется удобная приближенная формула [55,56]. Кроме того, следует отметить предложенные недавно методы расчета вклада Вичманна–Кролла в рамках подходов, основанных на использовании конечных базисных наборов для уравнения Дирака [57,58]. Дальнейшее обсуждение вкладов вакуумной поляризации выходит за рамки настоящей статьи.

Вкладу диаграммы собственной энергии на рисунке соответствует нелокальный оператор [2]:

$$\Sigma_R^{SE}(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2i\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\omega D^{\mu\nu}(\omega, \mathbf{r}_{12}) \times \alpha_\mu G(\varepsilon - \omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha_\nu - \beta\delta m, \quad (2)$$

где δm — массовый контрчлен, $D^{\mu\nu}$ — пропагатор фотона, G — пропагатор электрона ($G(\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\omega - h^D)^{-1}$), $\alpha^\mu = (1, \boldsymbol{\alpha})$ и неявно предполагается, что контур интегрирования по энергетическому параметру ω выбран так, что он должным образом обходит все особенности подынтегрального выражения в комплексной плоскости. Непертурбативные по V расчеты данного вклада имеют долгую историю [59–67]. Диаграмма собственной энергии, так же как и диаграмма вакуумной поляризации, содержит УФ-расходимости, для

устранения которых мы используем метод, изложенный в [66]. Для улучшения сходимости вкладов диаграммы собственной энергии при *ab initio* расчетах мы применяем подход, предложенный недавно в [68].

Основой для релятивистских корреляционных расчетов выступает гамильтониан Дирака–Кулона–Брейта (ДКБ) [69–71]:

$$H_{\text{DCB}} = \Lambda^{(+)} [H_0 + V_{\text{int}}] \Lambda^{(+)}, \quad (3)$$

$$H_0 = \sum_i [\alpha_i \cdot \mathbf{p}_i + \beta_i m + V_i^{\text{nucl}}], \quad (4)$$

$$V_{\text{int}} = \sum_{i < j} [V_{ij}^{\text{C}} + V_{ij}^{\text{B}}], \quad (5)$$

где индексы *i* и *j* нумеруют электроны, V^{nucl} — потенциал ядра, кулоновская и брейтовская части оператора межэлектронного взаимодействия V_{int} имеют вид ($\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$)

$$V_{ij}^{\text{C}} = \frac{\alpha}{r_{ij}}, \quad (6)$$

$$V_{ij}^{\text{B}} = -\frac{\alpha}{2} \left[\frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{r_{ij}} + \frac{(\alpha_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\alpha_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (7)$$

Оператор $\Lambda^{(+)}$ в (3) — проектор на многоэлектронные состояния, построенные из положительно-энергетических собственных функций некоторого одноэлектронного релятивистского гамильтониана h^Λ . Гамильтониан (3) можно вывести в рамках строгого КЭД-подхода [72]. При этом оказывается, что одноэлектронный оператор h^Λ должен совпадать с гамильтонианом h^{D} из (1), который определяет нулевой порядок КЭД-теории возмущений. Однако в релятивистских атомных расчетах оператор h^Λ зачастую выбирают независимо. В частности, распространенным выбором для h^Λ является нелокальный оператор h^{DF} .

В данной работе для решения уравнения ДКБ,

$$H_{\text{DCB}}\Psi = E\Psi, \quad (8)$$

мы используем метод наложения конфигураций в базисе одноэлектронных орбиталей Дирака–Штурма (ДШ) [30,73]. Кратко изложим основные аспекты данного метода. Многоэлектронная волновая функция $\Psi(JM)$ с полным угловым моментом *J* и его проекцией *M* ищется в виде разложения по конфигурационным функциям $\Phi_I(JM)$ с теми же угловыми квантовыми числами:

$$\Psi(JM) = \sum_I C_I^{JM} \Phi_I(JM). \quad (9)$$

Вариационный принцип Ритца в пространстве конфигурационных функций сводит решение уравнения (8) к задаче на собственные значения матрицы соответствующего гамильтониана:

$$\sum_I H_{KI} C_I^{JM} = E(J) C_K^{JM}. \quad (10)$$

Конфигурационные функции представляют собой линейные комбинации детерминантов Слейтера, соответствующих одной релятивистской конфигурации:

$$\Phi_I(JM) = \sum_\gamma A_{\gamma I}^{JM} \det_\gamma \{ \phi_i(x_j) \}. \quad (11)$$

Одноэлектронные волновые функции ϕ_i в (11) находятся как собственные функции оператора h^{D} в конечном базисном наборе орбиталей ДШ [74]. В свою очередь, базис ДШ строится следующим образом. В качестве орбиталей ϕ_i , занятых в основном и низко лежащих возбужденных состояниях рассматриваемой атомной системы, используются решения уравнения (1). Орбитали ДШ для виртуальных, то есть высоко лежащих вакантных одноэлектронных состояний, определяются путем численного решения уравнений ДШ:

$$[h^{\text{D}} - \varepsilon_0] \phi_i = \mu_i W(r) \phi_i, \quad (12)$$

где ε_0 — ссылочная одноэлектронная энергия, $W(r)$ — положительная весовая функция, стремящаяся к нулю на бесконечности, μ_i — дискретный спектр обобщенной задачи на собственные функции (12). Особенностью базиса ДШ является то, что все орбитали ϕ_i имеют примерно один размер и одну и ту же асимптотику на бесконечности, определяемую ссылочной энергией ε_0 . В наших расчетах в качестве весовой функции мы, как правило, используем функцию

$$W(r) = \frac{1 - \exp(-(\xi r)^2)}{(\xi r)^2}. \quad (13)$$

Конкретные значения параметров ε_0 и ξ подбираются так, чтобы добиться оптимальной сходимости результатов расчетов по размеру одноэлектронного базиса. Отметим также, что при необходимости гамильтониан h^{D} , используемый при построении одноэлектронных функций ϕ_i и/или ϕ_i , может быть заменен на оператор h^{DF} .

Сложность учета поправок на собственную энергию электрона в релятивистских корреляционных расчетах связана с тем, что оператор (2) не может быть непосредственно включен в методы, основанные на гамильтониане (3). Чтобы преодолеть данные трудности, в [43] был предложен модельный КЭД-оператор, который удобен в использовании и позволяет приближенно учитывать КЭД-эффекты для уровней энергии. Данный оператор основан на результатах *ab initio* расчетов диагональных и недиагональных матричных элементов оператора (2) в „водородном“ базисе, то есть в картине Фарри с $V = V^{\text{nucl}}$. В сферически симметричном потенциале V оператор (2) сохраняет все угловые квантовые числа, поэтому модельный оператор h^{SE} для Σ_R^{SE} можно строить независимо для каждого значения релятивистского углового квантового числа $\kappa = (-1)^{j+l+1/2}(j+1/2)$. Согласно [43], оператор h^{SE} представляется в виде суммы пулокальной и нелокальной частей:

$$h^{\text{SE}} = \sum_\kappa V_{\text{loc}}^\kappa P_\kappa + \sum_{j,l} |\phi_j\rangle B_{jl} \langle \phi_l|, \quad (14)$$

где P_κ — проектор на состояния с определенной угловой симметрией, а форма локальных потенциалов V_{loc}^κ и вид проекционных функций ϕ_j определяется тем, что КЭД-поправки набираются главным образом на малых расстояниях [75]. В частности, в [43] было предложено использовать

$$V_{\text{loc}}(r) = A_\kappa e^{-r/\lambda}, \quad (15)$$

где $\lambda = \hbar/(mc)$, а значение параметра A_κ выбирается так, чтобы воспроизвести вклад диаграммы собственной энергии в лэмбовский сдвиг уровня с наименьшим возможным значением главного квантового числа n для заданного κ . Проекционные функции ϕ_j строятся из водородных функций с помощью масштабных множителей, которые обеспечивают более сильную их локализацию. Конкретные выражения для проекционных функций приведены в [43] и мы не будем повторять их здесь. Отметим только, что для каждого рассматриваемого релятивистского углового квантового числа κ достаточно использовать не более трех-четырёх проекционных функций, а значения параметров B_{jl} определяются из того условия, чтобы воспроизвести результаты соответствующих *ab initio* расчетов.

3. Результаты и обсуждение

В работе [76] в рамках строго КЭД-подхода были вычислены поправки на собственную энергию электрона к потенциалам ионизации нейтральных щелочных металлов. Расчеты выполнялись для пяти различных локальных потенциалов нулевого приближения V в уравнении (1): для потенциала Хартри (СН) и четырех x_α -потенциалов. Кратко опишем процедуру построения данных потенциалов. Все эти потенциалы могут быть выражены через зарядовую плотность валентного электрона,

$$\rho_v(r) = G_v^2(r) + F_v^2(r), \quad (16)$$

и электронов замкнутых оболочек,

$$\rho_{\text{core}}(r) = \sum_c (2j_c + 1) [G_c^2(r) + F_c^2(r)]. \quad (17)$$

Здесь G и F — большие и малые компоненты дираковских волновых функций ψ , которые нормированы согласно $\int (G^2 + F^2) dr = 1$ и определены самосогласованно из уравнения (1) с потенциалом

$$V(r) = -\frac{\alpha Z_{\text{ef}}(r)}{r}, \quad (18)$$

где $Z_{\text{ef}}(r)$ — эффективный заряд. Для СН-потенциала имеем

$$Z_{\text{ef}}^{\text{CH}}(r) = Z_{\text{nucl}}(r) - r \int_0^\infty dr' \frac{\rho_{\text{core}}(r')}{\max\{r, r'\}}. \quad (19)$$

Величина $Z_{\text{nucl}}(r)$ в (19) введена с тем, чтобы учесть конечный размер ядра: для точечного ядра $Z_{\text{nucl}} \equiv Z$. Если определить полную зарядовую плотность $\rho_{\text{tot}} = \rho_{\text{core}} + \rho_v$, то эффективный заряд для x_α -потенциалов может быть записан в виде:

$$Z_{\text{eff}}^{x_\alpha}(r) = Z_{\text{nucl}}(r) - r \int_0^\infty dr' \frac{\rho_{\text{tot}}(r')}{\max\{r, r'\}} + x_\alpha \left[\frac{81}{32\pi^2} r \rho_{\text{tot}}(r) \right]^{1/3}. \quad (20)$$

В работе [76] были использованы значения параметра x_α , равные 0, 1/3, 2/3, и 1. Выбор $x_\alpha = 0$ приводит к потенциалу Дирака–Хартри, значение $x_\alpha = 2/3$ соответствует потенциалу Кона–Шэма [77], а $x_\alpha = 1$ определяет потенциал Дирака–Слейтера [78]. Отметим, что при построении x_α -потенциалов в [76] вводилась поправка Лэттера [79], чтобы обеспечить правильную асимптотику на больших расстояниях. В дальнейшем мы будем называть данные потенциалы X0, X1, X2 и X3 соответственно.

Результаты для КЭД-вкладов, полученные в [76], демонстрируют сильную зависимость от способа выбора потенциала V . Это является естественным следствием того, что расчеты КЭД-вкладов лишь в ведущем порядке теории возмущений недостаточны для должного описания подобных сложных систем с большим количеством электронов. Корреляционные эффекты имеют значительный вклад и *a priori* невозможно аккуратно учесть их каким-то выбором локального потенциала V в (1).

В связи с этим в табл. 1–4 мы исследуем поправки на собственную энергию к потенциалам ионизации натрия, калия, рубидия и цезия, а также ионов, имеющих соответствующие электронные конфигурации, и сравниваем результаты, которые могут быть получены в рамках строгого КЭД-подхода и с помощью модельного КЭД-оператора. Все результаты представлены в терминах безразмерной функции $F(\alpha Z)$, определенной согласно

$$\Delta E_{\text{SE}} = \frac{\alpha}{\pi} \frac{(\alpha Z)^4}{n^3} F(\alpha Z) mc^2. \quad (21)$$

В работе использованы те же пять потенциалов СН, X0, X1, X2 и X3, что применялись в [76]. Помимо значений F_i , соответствующих расчетам для отдельных потенциалов $i = 1, 2, \dots, 5$, в таблицах для удобства также показаны средние значения $\bar{F} = (\sum_{i=1}^5 F_i)/5$ по пяти расчетам, оценки стандартных отклонений $S = \sqrt{\sum_{i=1}^5 (F_i - \bar{F})^2/5}$ и максимальные отличия между результатами $D = \max F_i - \min F_i$.

В табл. 1–4 для каждого рассмотренного значения заряда ядра Z в первой строке, помеченной „QED“, приведены результаты наших *ab initio* расчетов вклада диаграммы собственной энергии ведущего порядка теории возмущений. Для нейтральных атомов натрия ($Z = 11$), калия ($Z = 19$), рубидия ($Z = 37$) и цезия

Таблица 1. Вклад собственной энергии (с обратным знаком) в потенциал ионизации нейтрального натрия и натриеподобных ионов (в терминах безразмерной функции $F(\alpha Z)$, определенной в уравнении (21), $n = 3$): „QED“ — расчет одноэлектронного вклада в рамках строго КЭД-подхода, „QEDMOD“ — модельный оператор лэмбовского сдвига [43], „FGRP“ — радиационный потенциал, предложенный в работе [39], „PT1“ — поправка первого порядка теории возмущений по остаточному взаимодействию, „CI“ — метод наложения конфигураций, „DHF“ — релятивистский метод Дирака–Хартри–Фока, „DHF“ — релятивистский метод Дирака–Хартри–Фока, „CR“ — поправка на релаксацию замкнутых оболочек („core relaxation“), „CC“ — корреляционные поправки („correlation corrections“), $\bar{F} = (\sum_{i=1}^5 F_i)/5$ — среднее по пяти расчетам с потенциалами CH, X0, X1, X2 и X3, $S = \sqrt{\sum_{i=1}^5 (F_i - \bar{F})^2/5}$ — оценка стандартного отклонения по пяти расчетам, $D = \max F_i - \min F_i$ — максимальное отличие между результатами пяти расчетов

Z	Метод	CH	X0	X1	X2	X3	\bar{F}	S	D
11	QED	0.1904	0.1694	0.1671	0.1823	0.2230	0.1865	0.0202	0.0559
	QED [76]	0.1908	0.1693	0.1674	0.1814	0.2233			
	QEDMOD	0.1908	0.1696	0.1675	0.1829	0.2239	0.1869	0.0204	0.0564
	FGRP [15]	0.196			0.185				
	QEDMOD + PT1	0.1557	0.1414	0.1457	0.1366	0.0907	0.1340	0.0226	0.0650
	QEDMOD + CI	0.1866	0.1866	0.1866	0.1866	0.1865	0.1866	0.0000	0.0001
	FGRP + CR + CC [15] FGRP + DF [40]						0.1901 0.1666		
30	QED	1.6362	1.6323	1.6366	1.6512	1.6925	1.6497	0.0223	0.0602
	QEDMOD	1.6346	1.6300	1.6351	1.6511	1.6935	1.6489	0.0234	0.0635
	QEDMOD + PT1	1.5438	1.5416	1.5397	1.5390	1.5333	1.5395	0.0035	0.0104
	QEDMOD + CI	1.5573	1.5573	1.5573	1.5573	1.5573	1.5573	0.0000	0.0000
50	QED	1.6446	1.6410	1.6463	1.6565	1.6807	1.6538	0.0144	0.0396
	QEDMOD	1.6430	1.6390	1.6449	1.6561	1.6812	1.6529	0.0153	0.0422
	QEDMOD + PT1	1.5885	1.5882	1.5872	1.5866	0.5847	1.5870	0.0014	0.0038
	QEDMOD + CI	1.5920	1.5920	1.5920	1.5920	1.5920	1.5920	0.0000	0.0000
70	QED	1.6538	1.6503	1.6553	1.6641	1.6825	1.6612	0.0116	0.0322
	QEDMOD	1.6517	1.6479	1.6537	1.6635	1.6828	1.6599	0.0125	0.0349
	QEDMOD + PT1	1.6084	1.6083	1.6077	1.6072	1.6061	1.6075	0.0008	0.0023
	QEDMOD + CI	1.6097	1.6097	1.6097	1.6097	1.6097	1.6097	0.0000	0.0000
92	QED	1.8369	1.8326	1.8383	1.8479	1.8655	1.8442	0.0117	0.0328
	QEDMOD	1.8320	1.8274	1.8347	1.8461	1.8653	1.8411	0.0136	0.0380
	QEDMOD + PT1	1.7892	1.7892	1.7887	1.7882	1.7872	1.7885	0.0008	0.0020
	QEDMOD+CI	1.7935	1.7935	1.7935	1.7935	1.7935	1.7935	0.0000	0.0000

($Z = 55$), строкой ниже показаны результаты из работы [76]. В целом, наблюдается хорошее согласие. В работе [76] погрешность расчетов поправки на собственную энергию оценена в единицу четвертой значащей цифры. Мы предполагаем, что все цифры, приведенные в результатах наших *ab initio* вычислений, являются точными. Причины незначительных расхождений нам не ясны. Значения, представленные в трех последних столбцах в строках „QED“, показывают, что результаты в ведущем порядке теории возмущений действительно существенно зависят от выбора начального приближения. Для заданной электронной конфигурации с ростом Z относительный разброс результатов постепенно уменьшается, что связано со снижением относительной роли корреляционных эффектов.

В строках, помеченных „QEDMOD“, показаны результаты, рассчитанные путем усреднения модельного оператора (14) на волновых функция валентного электрона.

Сами функции найдены как решения уравнения (1) в соответствующих потенциалах. Из табл. 1–4 видно, что значения, которые можно получить таким образом с помощью модельного КЭД-оператора, находятся в прекрасном согласии с результатами *ab initio* расчетов, но им, естественно, присуща схожая зависимость от способа выбора гамильтониана нулевого приближения.

В работе [15] радиационный потенциал FGRP, предложенный в [39], был применен для вычисления поправки на собственную энергию к потенциалам ионизации нейтральных атомов щелочных металлов. В частности, с целью сравнения с результатами работы [76] были рассчитаны средние значения оператора FGRP на волновых функция валентного электрона в потенциалах CH и X2. Соответствующие данные показаны в строках „FGRP“ в табл. 1–4. Сравнивая значения в строках „QEDMOD“ и „FGRP“ для натрия, калия, рубидия и цезия, можно прийти к выводу, что модельный КЭД-оператор способен более точно воспроизводить результаты *ab initio* рас-

Таблица 2. Вклад собственной энергии (с обратным знаком) в потенциал ионизации нейтрального калия и калиепоподобных ионов (в терминах безразмерной функции $F(\alpha Z)$, определенной в уравнении (21), $n = 4$), обозначения, как в табл. 1

Z	Метод	CH	X0	X1	X2	X3	\bar{F}	S	D
19	QED	0.08562	0.07204	0.07218	0.08250	0.10923	0.08431	0.01359	0.03719
	QED [76]	0.08560	0.07202	0.07205	0.08286	0.10966			
	QEDMOD	0.08569	0.07208	0.07229	0.08270	0.10952	0.08446	0.01367	0.03744
	FGRP [15]	0.088			0.084				
	QEDMOD + PT1	0.08464	0.07789	0.07585	0.06619	0.02951	0.06681	0.01957	0.05513
	QEDMOD + CI	0.09401	0.09409	0.09402	0.09397	0.09392	0.09400	0.00006	0.00017
	FGRP + CR + CC [15] FGRP + DF [40]						0.1010 0.07993		
30	QED	0.85518	0.84857	0.84645	0.86200	0.91013	0.86447	0.02347	0.06367
	QEDMOD	0.85539	0.84861	0.84695	0.86292	0.91128	0.86503	0.02380	0.06432
	QEDMOD + PT1	0.76012	0.75394	0.75395	0.75234	0.73678	0.75143	0.00779	0.02334
	QEDMOD + CI	0.78164	0.78164	0.78163	0.78162	0.78161	0.78163	0.00001	0.00003
50	QED	1.2237	1.2184	1.2220	1.2346	1.2668	1.2331	0.0177	0.0484
	QEDMOD	1.2230	1.2176	1.2214	1.2343	1.2667	1.2326	0.0179	0.0491
	QEDMOD + PT1	1.1477	1.1468	1.1454	1.1442	1.1394	1.1447	0.0029	0.0083
	QEDMOD + CI	1.1526	1.1526	1.1526	1.1526	1.1526	1.1526	0.0000	0.0000
70	QED	1.3550	1.3502	1.3546	1.3655	1.3902	1.3631	0.0144	0.0399
	QEDMOD	1.3531	1.3483	1.3530	1.3642	1.3891	1.3615	0.0147	0.0407
	QEDMOD + PT1	1.2893	1.2891	1.2881	1.2873	1.2847	1.2877	0.0017	0.0047
	QEDMOD + CI	1.2901	1.2901	1.2901	1.2901	1.2901	1.2901	0.0000	0.0000
92	QED	1.5637	1.5586	1.5638	1.5753	1.5979	1.5719	0.0141	0.0393
	QEDMOD	1.5600	1.5548	1.5610	1.5735	1.5970	1.5693	0.0152	0.0422
	QEDMOD + PT1	1.4968	1.4967	1.4960	1.4951	1.4931	1.4955	0.0014	0.0037
	QEDMOD + CI	1.4996	1.4996	1.4996	1.4996	1.4997	1.4996	0.0000	0.0000

Таблица 3. Вклад собственной энергии (с обратным знаком) в потенциал ионизации нейтрального рубидия и рубидиеподобных ионов (в терминах безразмерной функции $F(\alpha Z)$, определенной в уравнении (21), $n = 5$), обозначения, как в табл. 1

Z	Метод	CH	X0	X1	X2	X3	\bar{F}	S	D
37	QED	0.02861	0.02285	0.02366	0.02833	0.03957	0.02860	0.00597	0.01672
	QED [76]	0.02860	0.02282	0.02359	0.02834	0.03959			
	QEDMOD	0.02866	0.02288	0.02371	0.02840	0.03968	0.02867	0.00599	0.01679
	FGRP [15]	0.0291			0.0287				
	QEDMOD + PT1	0.03325	0.03018	0.02885	0.02425	0.00742	0.02479	0.00916	0.02583
	QEDMOD + CI	0.03374	0.03373	0.03367	0.03366	0.03364	0.03369	0.00004	0.00010
	FGRP + CR + CC [15]						0.03667		
	FGRP + DF [40]						0.02857		
50	QED	0.42416	0.41937	0.41984	0.43081	0.45844	0.43052	0.01455	0.03907
	QEDMOD	0.42455	0.41973	0.42033	0.43144	0.45915	0.43104	0.01466	0.03942
	QEDMOD + PT1	0.37704	0.37402	0.37332	0.37059	0.35987	0.37097	0.00592	0.01717
	QEDMOD + CI	0.38982	0.39000	0.38983	0.38980	0.38976	0.38984	0.00008	0.00024
70	QED	0.76463	0.75990	0.76332	0.77512	0.80077	0.77275	0.01491	0.04087
	QEDMOD	0.76451	0.75975	0.76333	0.77533	0.80109	0.77280	0.01507	0.04133
	QEDMOD + PT1	0.70601	0.70529	0.70384	0.70186	0.69632	0.70266	0.00347	0.00969
	QEDMOD + CI	0.71291	0.71291	0.71290	0.71289	0.71288	0.71290	0.00001	0.00003
92	QED	1.0526	1.0474	1.0523	1.0653	1.0900	1.0615	0.0154	0.0426
	QEDMOD	1.0513	1.0461	1.0517	1.0653	1.0905	1.0609	0.0161	0.0444
	QEDMOD + PT1	0.9872	0.9869	0.9857	0.9840	0.9801	0.9848	0.0026	0.0071
	QEDMOD + CI	0.9940	0.9941	0.9940	0.9940	0.9940	0.9940	0.0001	0.0001

Таблица 4. Вклад собственной энергии (с обратным знаком) в потенциал ионизации нейтрального цезия и цезиеподобных ионов (в терминах безразмерной функции $F(\alpha Z)$, определенной в уравнении (21)), $n = 6$), обозначения, как в табл. 1

Z	Метод	CH	X0	X1	X2	X3	\bar{F}	S	D
55	QED	0.01618	0.01265	0.01322	0.01624	0.02354	0.01637	0.00388	0.01089
	QED [76]	0.01616	0.01263	0.01321	0.01621	0.02349			
	QEDMOD	0.01620	0.01265	0.01325	0.01627	0.02359	0.01639	0.00389	0.01093
	FGRP [15]	0.0164			0.0164				
	QEDMOD + PT1	0.01948	0.01689	0.01658	0.01377	0.00222	0.01379	0.00606	0.01726
	QEDMOD + CI	0.01962	0.01952	0.01964	0.01963	0.01960	0.01960	0.00004	0.00012
	FGRP + CR + CC [15]						0.02198		
	FGRP + DF [40]						0.01667		
70	QED	0.29795	0.29400	0.29505	0.30446	0.32539	0.30337	0.01160	0.03139
	QEDMOD	0.29814	0.29418	0.29531	0.30480	0.32579	0.30364	0.01167	0.03161
	QEDMOD + PT1	0.26317	0.26128	0.26028	0.25744	0.24869	0.25817	0.00509	0.01448
	QEDMOD + CI	0.27266	0.27315	0.27273	0.27268	0.27263	0.27277	0.00020	0.00053
92	QED	0.62882	0.62392	0.62756	0.64004	0.66348	0.63677	0.01440	0.03955
	QEDMOD	0.62855	0.62363	0.62765	0.64052	0.66426	0.63692	0.01479	0.04063
	QEDMOD + PT1	0.57450	0.57400	0.57251	0.56992	0.56408	0.57100	0.00381	0.01041
	QEDMOD + CI	0.58407	0.58527	0.58415	0.58409	0.58402	0.58432	0.00047	0.00124

четов, чем оператор FGRP. Следует также в очередной раз подчеркнуть, что модельный оператор был построен на основе КЭД-расчетов в водородном базисе и никак специально не адаптировался под щелочные металлы. Напротив, оператор FGRP был изначально выведен для точечного ядра, а малую поправку на конечный размер ядра предполагалось учитывать путем его свертки с плотностью распределения заряда в ядре [39]. В [15] вместо зарядовой плотности ядра была использована плотность, соответствующая потенциалу CH для атомов щелочных металлов.

Осознавая роль корреляционных эффектов для исследуемых величин, в рамках подхода, основанного на модельном КЭД-операторе, нами были рассчитаны соответствующие поправки. Модельный оператор по построению не обязан точно воспроизводить КЭД-вклады более высокого порядка теории возмущений. Тем не менее он способен частично учитывать данные поправки [80,81]. В первую очередь нами были вычислены поправки первого порядка по остаточному взаимодействию в брейтовском приближении. С этой целью операторы H_0 и V_{int} в (3) были переопределены так, что первый стал включать V вместо V^{nucl} , а второй соответственно стал равен

$$\tilde{V}_{int} = \sum_{i < j} [V_{ij}^C + V_{ij}^B] - \sum_i [V_i - V_i^{nucl}]. \quad (22)$$

Результаты расчетов с учетом поправки первого порядке по \tilde{V}_{int} к вкладу собственной энергии в потенциалы ионизации, то есть суммы ведущих вкладов из строк „QEDMOD“ и обсуждаемых поправок, приведены в строках, помеченных „QEDMOD + PT1“. Первое, на что следует обратить внимание, это увеличение значений в последних столбцах S и D для нейтральных

щелочных металлов. Применимость теории возмущений по остаточному взаимодействию в этих случаях остается неясной и учет только первого порядка „PT1“ явно оказывается недостаточным. Вместе с тем, как уже отмечалось, в рамках строгого КЭД-подхода на текущий момент не представляется возможным рассмотреть поправки на межэлектронное взаимодействие более высокого порядка. Следовательно, применение приближенных методов, таких как модельный КЭД-оператор, видится единственной возможностью для аккуратного рассмотрения КЭД-эффектов в подобных системах.

В связи с вышесказанным, мы выполнили расчеты корреляционных поправок к вкладу собственной энергии методом наложения конфигураций, описанным в предыдущем разделе. Соответствующие результаты показаны в табл. 1–4 в строках „QEDMOD + CI“. В данном методе остаточное взаимодействие в брейтовском приближении \tilde{V}_{int} учитывается непертурбативно. Из табл. 1–4 видно, что результаты в строках „QEDMOD + CI“ существенно менее чувствительны к выбору начального приближения. Для заданной электронной конфигурации результаты расчетов по теории возмущений, „QEDMOD + PT1“, с ростом Z постепенно приближаются к результатам, рассчитанным методом наложения конфигураций, „QEDMOD + CI“. Следует также отметить, что в общем случае разброс значений, полученных для различных потенциалов в ведущем порядке, не покрывает результаты, полностью учитывающие эффекты корреляций. Таким образом, данный разброс недооценивает погрешность рассмотрения КЭД-эффектов только в ведущем порядке.

В работе [15] был вычислен также ряд поправок с целью учета эффектов межэлектронного взаимодействия на вклад собственной энергии в потенциалы ионизации.

Во-первых, была рассмотрена поправка на релаксацию замкнутых оболочек, и, во-вторых, в некотором приближении была учтена корреляционная поправка в [15]. Результаты из работы [15] с учетом этих двух поправок показаны в табл. 1–4 в строках „FGRP + CR + CC“. Эти результаты находятся в хорошем согласии с нашими значениями, полученными методом наложения конфигураций, но мы полагаем, что наш метод дает более аккуратную оценку соответствующих величин.

Завершая обсуждение, отметим, что в работе [40] также была использована некоторая модификация оператора FGRP для учета КЭД-поправок к потенциалам ионизации атомов щелочных металлов. Расчеты выполнялись по теории возмущений, и вклад собственной энергии был вычислен как среднее от оператора FGRP на собственных функциях оператора h^{DF} . Для полноты соответствующие результаты приведены в табл. 1–4 в строках „FGRP + DF“. Наблюдается качественное согласие с результатами наших расчетов.

4. Заключение

Выполнены расчеты вкладов собственной энергии в потенциалы ионизации атомов натрия, калия, рубидия и цезия, а также ионов, имеющих аналогичные электронные конфигурации. В ведущем порядке расчеты проведены двумя способами: в рамках строго КЭД-подхода и приближенно с помощью модельного КЭД-оператора. Обнаружено хорошее согласие между результатами обоих методов. Однако вследствие значительного влияния корреляционных эффектов, получаемые результаты проявляют сильную зависимость от выбора начального приближения для теории возмущений. Показано, что совмещение подхода, основанного на модельном КЭД-операторе, и метода наложения конфигураций позволяет получить результаты, которые практически не чувствительны к данному выбору. Соответствующий метод обеспечивает более точный учет электронных корреляций в расчетах КЭД-вкладов в потенциалы ионизации щелочных металлов.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 22-62-00004, <https://rscf.ru/project/22-62-00004/>. *Ab initio* расчеты вкладов собственной энергии выполнены при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики „БАЗИС“ (проект № 24-1-2-74-1).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H.F. Beyer, V.P. Shevelko. *Introduction to the Physics of Highly Charged Ions* (Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 2003).
- [2] P.J. Mohr, G. Plunien, G. Soff. *Phys. Rep.*, **293**, 227 (1998). DOI: 10.1016/S0370-1573(97)00046-X
- [3] V.M. Shabaev, A.N. Artemyev, V.A. Yerokhin. *Phys. Scr.*, **2000**, 7 (2000). DOI: 10.1238/Physica.Topical.086a00007
- [4] V.A. Yerokhin, A.N. Artemyev, P. Indelicato, V.M. Shabaev. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*, **205**, 47 (2003). DOI: 10.1016/S0168-583X(02)01927-4
- [5] J. Sapirstein, K.T. Cheng. *Can. J. Phys.*, **86**, 25 (2008). DOI: 10.1139/p07-098.
- [6] D.A. Glazov, Y.S. Kozhedub, A.V. Maiorova, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, A.V. Volotka, C. Kozhuharov, G. Plunien, Th. Stöhlker. *Hyp. Interact.*, **199**, 71 (2011). DOI: 10.1007/s10751-011-0302-z
- [7] A.V. Volotka, D.A. Glazov, G. Plunien, V.M. Shabaev. *Ann. Phys. (Berlin)*, **525**, 636 (2013). DOI: 10.1002/andp.201300079.
- [8] V.M. Shabaev, A.I. Bondarev, D.A. Glazov, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, I.A. Maltsev, A.V. Malyshev, R.V. Popov, I.I. Tupitsyn, N.A. Zubova. *Hyp. Interact.*, **239**, 60 (2018). DOI: 10.1007/s10751-018-1537-8
- [9] M.G. Kozlov, M.S. Safronova, J.R. Crespo López-Urrutia, P.O. Schmidt. *Rev. Mod. Phys.*, **90**, 045005 (2018). DOI: 10.1103/RevModPhys.90.045005
- [10] P. Indelicato. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **52**, 232001 (2019). DOI: 10.1088/1361-6455/ab42c9
- [11] H. Persson, I. Lindgren, L.N. Labzowsky, G. Plunien, T. Beier, G. Soff. *Phys. Rev. A*, **54**, 2805 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevA.54.2805
- [12] V.A. Yerokhin, A.N. Artemyev, V.M. Shabaev. *Phys. Lett. A*, **234**, 361 (1997). DOI: 10.1016/S0375-9601(97)00612-9
- [13] A.N. Artemyev, V.M. Shabaev, V.A. Yerokhin. *Phys. Rev. A*, **56**, 3529 (1997). DOI: 10.1103/PhysRevA.56.3529
- [14] J.S.M. Ginges, J.C. Berengut. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **49**, 095001 (2016). DOI: 10.1088/0953-4075/49/9/095001
- [15] J.S.M. Ginges, J.C. Berengut. *Phys. Rev. A*, **93**, 052509 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevA.93.052509
- [16] B.G.C. Lackenby, V.A. Dzuba, V.V. Flambaum. *Phys. Rev. A*, **98**, 042512 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevA.98.042512
- [17] Y. Guo, L.F. Pašteka, E. Eliav, A. Borschevsky. *Adv. Quantum Chem.*, **83**, 107 (2021). DOI: 10.1016/bs.aiq.2021.05.007
- [18] M.Y. Kaygorodov, L.V. Skripnikov, I.I. Tupitsyn, E. Eliav, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, A.V. Oleynichenko, V.M. Shabaev, A.V. Titov, A.V. Zaitsevskii. *Phys. Rev. A*, **104**, 012819 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.104.012819
- [19] M.Y. Kaygorodov, D.P. Usov, E. Eliav, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, A.V. Oleynichenko, V.M. Shabaev, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, I.I. Tupitsyn, A.V. Zaitsevskii. *Phys. Rev. A*, **105**, 062805 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevA.105.062805
- [20] I.M. Savelyev, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev. *Phys. Rev. A*, **107**, 042803 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.107.042803
- [21] V.A. Dzuba, V.V. Flambaum, G.K. Vong. *Phys. Rev. A*, **112**, 012822 (2025). DOI: 10.1103/7nqz-3ddv
- [22] A.N. Artemyev, V.M. Shabaev, V.A. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff. *Phys. Rev. A*, **71**, 062104 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevA.71.062104

- [23] A.V. Malyshev, D.A. Glazov, Y.S. Kozhedub, I.S. Anisimova, M.Y. Kaygorodov, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn. *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 183001 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.183001
- [24] A.V. Malyshev, Y.S. Kozhedub, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn. *Phys. Rev. A*, **110**, 062824 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.062824
- [25] I.P. Grant. *Adv. Phys.*, **19**, 747 (1970). DOI: 10.1080/00018737000101191
- [26] J.P. Desclaux. *Comput. Phys. Commun.*, **9**, 31 (1975). DOI: 10.1016/0010-4655(75)90054-5
- [27] P. Indelicato, E. Lindroth. *Phys. Rev. A*, **46**, 2426 (1992). DOI: 10.1103/PhysRevA.46.2426
- [28] V.A. Dzuba, V.V. Flambaum, M.G. Kozlov. *Phys. Rev. A*, **54**, 3948 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevA.54.3948
- [29] M.S. Safronova, W.R. Johnson, A. Derevianko. *Phys. Rev. A*, **60**, 4476 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevA.60.4476
- [30] I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev, J.R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, J. Ullrich. *Phys. Rev. A*, **68**, 022511 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevA.68.022511
- [31] M.G. Kozlov, S.G. Porsev, M.S. Safronova, I.I. Tupitsyn. *Comput. Phys. Commun.*, **195**, 199 (2015). DOI: 10.1016/j.cpc.2015.05.007
- [32] V.A. Dzuba, J.C. Berengut, C. Harabati, V.V. Flambaum. *Phys. Rev. A*, **95**, 012503 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevA.95.012503
- [33] D.A. Glazov, A.V. Malyshev, A.V. Volotka, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, G. Plunien. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*, **408**, 46 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.04.089
- [34] 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. Hedegård, B. Helmich-Paris, M. Iliaš, C.R. Jacob, S. Knecht, J.K. Laerdahl, M.L. Vidal, M.K. Nayak, M. Olejniczak, J.M.H. Olsen, M. Pernpointner, B. Senjean, A. Shee, A. Sunaga, J.N.P. van Stralen. *J. Chem. Phys.*, **152**, 204104 (2020). DOI: 10.1063/5.0004844
- [35] M.G. Kozlov, I.I. Tupitsyn, A.I. Bondarev, D.V. Mironova. *Phys. Rev. A*, **105**, 052805 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevA.105.052805
- [36] P. Indelicato, J.P. Desclaux. *Phys. Rev. A*, **42**, 5139 (1990). DOI: 10.1103/PhysRevA.42.5139
- [37] P. Pyykkö, L.B. Zhao. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **36**, 1469 (2003). DOI: 10.1088/0953-4075/36/8/302
- [38] I. Draganić, J.R. Crespo López-Urrutia, R. DuBois, S. Fritzsche, V.M. Shabaev, R. Soria Orts, I.I. Tupitsyn, Y. Zou, J. Ullrich. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 183001 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.183001
- [39] V.V. Flambaum, J.S.M. Ginges. *Phys. Rev. A*, **72**, 052115 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevA.72.052115
- [40] C. Thierfelder, P. Schwerdtfeger. *Phys. Rev. A*, **82**, 062503 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevA.82.062503
- [41] P. Pyykkö. *Chem. Rev.*, **112**, 371 (2012). DOI: 10.1021/cr200042e
- [42] I.I. Tupitsyn, E.V. Berseneva. *Opt. Spectrosc.*, **114**, 682 (2013). DOI: 10.1134/S0030400X13050214
- [43] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Phys. Rev. A*, **88**, 012513 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevA.88.012513
- [44] L.V. Skripnikov. *J. Chem. Phys.*, **154**, 201101 (2021). DOI: 10.1063/5.0053659
- [45] A.V. Malyshev, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin, V.A. Zaytsev. *Phys. Rev. A*, **106**, 012806 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevA.106.012806
- [46] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Comput. Phys. Commun.*, **189**, 175 (2015). DOI: 10.1016/j.cpc.2014.12.002
- [47] W.H. Furry. *Phys. Rev.*, **81**, 115 (1951). DOI: 10.1103/PhysRev.81.115
- [48] E.A. Uehling. *Phys. Rev.*, **48**, 55 (1935). DOI: 10.1103/PhysRev.48.55
- [49] E.H. Wichmann, N.M. Kroll. *Phys. Rev.*, **101**, 843 (1956). DOI: 10.1103/PhysRev.101.843
- [50] L.W. Fullerton, G.A. Rinker, Jr. *Phys. Rev. A*, **13**, 1283 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevA.13.1283
- [51] G. Soff, P.J. Mohr. *Phys. Rev. A*, **38**, 5066 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevA.38.5066
- [52] N.L. Manakov, A.A. Nekipelov, A.G. Fainshtein. *Sov. Phys. JETP*, **68**, 673 (1989). [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **95**, 1167 (1989)].
- [53] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, P. Sunnergren. *Phys. Rev. A*, **48**, 2772 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevA.48.2772
- [54] J. Sapirstein, K.T. Cheng. *Phys. Rev. A*, **68**, 042111 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevA.68.042111
- [55] A.G. Fainshtein, N.L. Manakov, A.A. Nekipelov. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**, 559 (1991). DOI: 10.1088/0953-4075/24/3/012
- [56] H.I. Манакон, А.А. Некипелов. *Вестник ВГУ: Физика. Математика*, **2**, 53 (2012).
- [57] M. Salman, T. Saue. *Phys. Rev. A*, **108**, 012808 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.108.012808
- [58] V.K. Ivanov, S.S. Baturin, D.A. Glazov, A.V. Volotka. *Phys. Rev. A*, **110**, 032815 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.032815
- [59] P.J. Mohr. *Ann. Phys. (NY)*, **88**, 26 (1974). DOI: 10.1016/0003-4916(74)90398-4
- [60] P.J. Mohr. *Ann. Phys. (NY)*, **88**, 52 (1974). DOI: 10.1016/0003-4916(74)90399-6
- [61] N.J. Snyderman. *Ann. Phys. (NY)*, **211**, 43 (1991). DOI: 10.1016/0003-4916(91)90192-B
- [62] S.A. Blundell, N.J. Snyderman. *Phys. Rev. A*, **44**, R1427 (1991). DOI: 10.1103/PhysRevA.44.R1427
- [63] P.J. Mohr, G. Soff. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 158 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.158
- [64] U.D. Jentschura, P.J. Mohr, G. Soff. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 53 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.53
- [65] K.T. Cheng, W.R. Johnson, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **47**, 1817 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevA.47.1817
- [66] V.A. Yerokhin, V.M. Shabaev. *Phys. Rev. A*, **60**, 800 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevA.60.800
- [67] V.A. Yerokhin, Z. Harman, C.H. Keitel. *Phys. Rev. A*, **111**, 012802 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.012802
- [68] J. Sapirstein, K.T. Cheng. *Phys. Rev. A*, **108**, 042804 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.108.042804
- [69] R.N. Faustov. *Theor. Math. Phys.*, **3**, 478 (1970). [*Teor. Mat. Fiz.*, **3**, 240 (1970). DOI: 10.1007/BF01046512].
- [70] J. Sucher. *Phys. Rev. A*, **22**, 348 (1980). DOI: 10.1103/PhysRevA.22.348
- [71] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, **24**, 1167 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevA.24.1167
- [72] V.M. Shabaev. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **26**, 4703 (1993). DOI: 10.1088/0953-4075/26/24/006
- [73] V.F. Bratzev, G.B. Deyneka, I.I. Tupitsyn. *Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser.*, **41**, 173 (1977). [V.F. Bratzev, G.B. Deyneka, I.I. Tupitsyn. *Izv. Acad. Nauk SSSR, Ser. Fiz.*, **41**, 2655 (1977)].
- [74] Y.K. Kim. *Phys. Rev.*, **154**, 17 (1967). DOI: 10.1103/PhysRev.154.17

- [75] T.A. Welton. Phys. Rev., **74**, 1157 (1948).
DOI: 10.1103/PhysRev.74.1157
- [76] J. Sapirstein, K.T. Cheng. Phys. Rev. A, **66**, 042501 (2002).
DOI: 10.1103/PhysRevA.66.042501
- [77] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev., **140**, A1133 (1965).
DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133
- [78] J.C. Slater. Phys. Rev., **81**, 385 (1951).
DOI: 10.1103/PhysRev.81.385
- [79] R. Latter. Phys. Rev., **99**, 510 (1955).
DOI: 10.1103/PhysRev.99.510
- [80] V.A. Yerokhin, M. Puchalski, K. Pachucki. Phys. Rev. A, **102**, 042816 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.102.042816
- [81] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, D.V. Mironova. Phys. Rev. A, **101**, 052502 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.101.052502