

01

## Релятивистский расчёт эффекта отдачи ядра для $g$ -фактора состояния ${}^2P_{3/2}$ многозарядных бороподобных ионов

© А.В. Малышев, Д.А. Глазов, И.А. Александров, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: a.v.malyshev@spbu.ru

Поступила в редакцию 15.11.2019 г.

В окончательной редакции 15.11.2019 г.

Принята к публикации 02.12.2019 г.

Эффект отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов вычислен в первом порядке по отношению масс электрона и ядра  $m/M$  в диапазоне  $Z = 18 - 92$ . Расчёты выполнены в рамках теории возмущений по параметру  $1/Z$ . В приближении независимых электронов одно- и двухэлектронные вклады отдачи ядра вычислены во всех порядках по параметру  $\alpha Z$  с применением полностью релятивистского подхода. Поправка на межэлектронное взаимодействие первого порядка по  $1/Z$  рассмотрена в брейтовском приближении. Высшие порядки по  $1/Z$  учтены частично путём включения экранирующего потенциала в гамильтониан нулевого приближения. Получены наиболее точные на сегодняшний день теоретические предсказания для эффекта отдачи ядра в  $g$ -фактор.

**Ключевые слова:**  $g$ -фактор, эффект отдачи ядра, бороподобные ионы, КЭД для связанных состояний.

DOI: 10.21883/OS.2020.03.49056.324-19

### 1. Введение

Высокоточные эксперименты по измерению  $g$ -фактора многозарядных ионов [1–9] продемонстрировали уникальные возможности для определения фундаментальных констант и проверки квантовой электродинамики (КЭД) для связанных состояний [10–12]. В то время как водородоподобные ионы являются наиболее простыми для теоретических расчётов, системы с несколькими электронами, в частности литие- и бороподобные ионы, оказываются незаменимыми для реализации предложенных сценариев по определению постоянной тонкой структуры  $\alpha$  [13–15]. Тестирование квантовой электродинамики для связанных состояний в режиме сильной связи как в рамках картины Фарри [16], так и за её пределами [17] также опирается на исследования  $g$ -фактора ионов с несколькими электронами. Эти долгосрочные цели послужили стимулом для выполнения высокоточных экспериментов с литиеподобными ионами [5,7,9]. Установленное согласие между теорией и экспериментом на уровне  $10^{-9}$  являет собой наиболее строгую проверку многоэлектронных квантово-электродинамических эффектов в присутствии внешнего магнитного поля [9,18,19]. Недавно  $g$ -фактор основного состояния бороподобного аргона был измерен с погрешностью  $0.9 \cdot 10^{-9}$  [8]. Обнаружено прекрасное согласие с теоретическим значением, которое, однако, имеет гораздо большую погрешность:  $0.6 \cdot 10^{-6}$  [8,20–22]. Первое экспериментальное значение  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$ , достаточно точное для исследования КЭД эффектов, было получено в спектроскопическом измерении перехода между компонентами тонкой структуры в бороподобном

аргоне [23]. Недавно был выполнен аналогичный эксперимент с более высокой точностью, и получено значение  $g_{\text{exp}}[{}^{40}_{18}\text{Ar}^{13+}({}^2P_{3/2})] = 1.33214(15)$  [24], которое согласуется с теорией [20,21,25]. Более того, ожидаемые эксперименты [26–28] могут довести точность измерения  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  до уровня, имеющего место для основного состояния водородо-, литие- и бороподобных ионов, т.е. до  $10^{-9}$  и выше. Таким образом, дальнейшие теоретические исследования  $g$ -фактора как  ${}^2P_{1/2}$ -, так и  ${}^2P_{3/2}$ -состояний являются весьма востребованными.

Измерение изотопического сдвига  $g$ -фактора в литиеподобном кальции [7] инициировало недавние исследования поправки на отдачу ядра к  $g$ -фактору многозарядных литиеподобных ионов [17,29,30]. Строгий расчёт эффекта отдачи ядра впервые был выполнен для состояния  $1s$  в работе [31] в рамках КЭД подхода, разработанного в [32]. В работах [7,17,29,30] расчёты были распространены на состояние  $2s$ . В нашей недавней работе [33] эффект отдачи был рассмотрен для состояний  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_{1/2}$  и  $2p_{3/2}$  водородоподобных ионов в области малых  $Z$  ( $Z = 1 - 20$ ). Одновременно с этим в работах [29,30] был вычислен вклад межэлектронного взаимодействия в эффект отдачи ядра в литиеподобных ионах в брейтовском приближении, полученном из полностью релятивистской теории [32].

Позднее данные исследования были распространены на основное состояние  ${}^2P_{1/2}$  бороподобных ионов. Значения, включающие нулевой и первый порядки по  $1/Z$ , были получены в брейтовском приближении в широком диапазоне  $Z$  ( $Z = 10 - 92$ ) в работах [34,35] и дополнены вкладами второго и более высокого порядков по  $1/Z$  в

работе [36]. Квантово-электродинамические расчёты во всех порядках по  $\alpha Z$  были выполнены для состояния  ${}^2P_{1/2}$  в работах [35,36]. Что касается состояния  ${}^2P_{3/2}$ , то в диапазоне  $Z = 10 - 20$  доступны только результаты нулевого порядка по  $1/Z$  в брейтовском приближении [20,25]. Поправка первого порядка по  $1/Z$  была рассчитана в нерелятивистском приближении только для  $Z = 18$  [21].

В настоящей работе мы заполняем имеющийся пробел путём вычисления как брейтовской, так и КЭД частей поправки на отдачу ядра к  $g$ -фактору состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов. Результаты в брейтовском приближении включают нулевой и первый порядки по  $1/Z$ , полученные с экранирующим потенциалом, для того чтобы частично учесть вклады более высокого порядка. Одно- и двухэлектронные КЭД вклады вычислены во всех порядках по  $\alpha Z$  для нулевого порядка по  $1/Z$  с экранирующим потенциалом. В результате представлены наиболее точные на сегодняшний день теоретические значения поправки на отдачу ядра к  $g$ -фактору состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов в диапазоне  $Z = 18 - 92$ , включая бороподобный аргон, который является предметом настоящих и будущих экспериментальных исследований. Полученные результаты являются важным вкладом в дальнейшее улучшение теоретического значения  $g$ -фактора.

В работе использованы релятивистская система единиц ( $\hbar = 1, c = 1$ ) и единицы Хэвисайда для заряда ( $e^2 = 4\pi\alpha, e < 0$ ),  $\mu_0 = |e|/2m$  — магнетон Бора.

## 2. Теоретические методы

Квантово-электродинамическая теория эффекта отдачи ядра для атомного  $g$ -фактора в первом порядке по отношению масс электрона и ядра  $m/M$  была сформулирована в работе [32]. Для случая одного электрона сверх замкнутых оболочек формула для поправки на отдачу ядра к  $g$ -фактору связанного электрона во всех порядках по  $\alpha Z$  имеет вид

$$\Delta g = \frac{1}{\mu_0 m_a} \frac{1}{M} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[ \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \langle \tilde{a} | [p^k - D^k(\omega) + eA_{cl}^k] \right. \\ \left. \times \tilde{G}(\omega + \tilde{\varepsilon}_a) [p^k - D^k(\omega) + eA_{cl}^k] \tilde{a} \right]_{\mathcal{H}=0}. \quad (1)$$

Волновая функция  $|\tilde{a}\rangle$  валентного электрона является собственным состоянием гамильтониана Дирака для сферически симметричного потенциала  $V(r)$  в присутствии внешнего однородного магнитного поля  $\mathcal{H} = \mathcal{H}e$ :

$$\tilde{h}_D = h_D + \mu_0 \mathcal{H} m [\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z, \quad (2)$$

$$h_D = -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m + V(r), \quad (3)$$

$$\tilde{h}_D |\tilde{a}\rangle = \tilde{\varepsilon}_a |\tilde{a}\rangle. \quad (4)$$

В уравнении (1)  $m_a$  — проекция углового момента на ось  $z$ ,  $\mathbf{p} = -i\nabla$  — оператор импульса,  $\mathbf{A}_{cl}(\mathbf{r}) = \mathcal{H} \times \mathbf{r} / r$  — классический векторный потенциал, а вектор  $D^k(\omega) = -4\pi\alpha Z \alpha^l D^{lk}(\omega)$  возникает из поперечной части фотонного пропагатора в кулоновской калибровке:

$$D^{lk}(\omega, \mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \left[ \frac{\exp(i|\omega|r)}{r} \delta_{lk} \right. \\ \left. + \nabla^l \nabla^k \frac{(\exp(i|\omega|r) - 1)}{\omega^2 r} \right]. \quad (5)$$

Кулоновская функция Грина  $\tilde{G}$  для уравнения Дирака в присутствии магнитного поля определяется выражением

$$\tilde{G}(\omega) = \sum_n \frac{|\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}|}{\omega - \tilde{\varepsilon}_n + i\tilde{\eta}_n 0}, \quad (6)$$

где  $\tilde{\eta}_n = \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_F$ ,  $\tilde{\varepsilon}_F$  — энергия Ферми, которая выбрана таким образом, чтобы быть больше, чем одноэлектронные энергии замкнутых оболочек, и меньше энергии валентного электрона  $\tilde{\varepsilon}_a$ . В уравнении (1) и на протяжении всей работы принято соглашение о суммировании по повторяющимся индексам. Использование потенциала протяженного ядра  $V_{nucl}(r)$  в качестве  $V(r)$  в уравнении (3) позволяет частично учесть поправку на конечный размер ядра к эффекту отдачи для  $g$ -фактора [32]. Для того чтобы уже в нулевом приближении частично принять во внимание эффекты межэлектронного взаимодействия, можно взять в качестве  $V(r)$  эффективный потенциал  $V_{eff}(r) = V_{nucl}(r) + V_{scr}(r)$ , где  $V_{scr}(r)$  — некоторый локальный экранирующий потенциал.

Полностью релятивистское выражение (1) даёт вклад отдачи ядра в  $g$ -фактор иона в приближении независимых электронов, т. е. в нулевом порядке по  $1/Z$ . В то же время оно позволяет вывести эффективные операторы, которые могут быть использованы для расчёта эффекта отдачи ядра в низшем релятивистском (брейтовском) приближении во всех порядках по  $1/Z$  [29]. Данные релятивистские операторы имеют вид

$$H_M^{magn} = -\mu_0 \mathcal{H} \frac{m}{M} \sum_{ij} \left\{ [\mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_j]_z - [\mathbf{r}_i \times \mathbf{D}_j(0)]_z \right\}, \quad (7)$$

$$H_M = \frac{1}{2M} \sum_{ij} \left\{ \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j - 2\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{D}_j(0) \right\}, \quad (8)$$

где

$$\mathbf{D}(0) = \frac{\alpha Z}{2r} \left[ \boldsymbol{\alpha} + \frac{(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})}{r^2} \mathbf{r} \right] \quad (9)$$

представляет собой предел вектора  $\mathbf{D}(\omega)$  при нулевой переданной энергии  $\omega \rightarrow 0$ . Первый член в фигурных скобках в уравнении (7) соответствует нерелятивистскому пределу оператора  $H_M^{magn}$ , он был получен впервые Филлипсом [37]. Массовый оператор (8) описывает также эффект отдачи ядра для энергий связи в отсутствие

магнитного поля [38]. Для того чтобы получить соответствующий вклад в атомный  $g$ -фактор, его необходимо использовать совместно с оператором взаимодействия с магнитным полем

$$H_{\text{magn}} = \mu_0 \mathcal{H} m \sum_j [\mathbf{r}_j \times \boldsymbol{\alpha}_j]_z. \quad (10)$$

Отметим, что во вкладах отдачи ядра, включающих операторы  $H_M$  и  $H_{\text{magn}}$ , следует должным образом учитывать одночастичные возбуждения в отрицательный континуум [39,40]. В дальнейшем брейтовскую часть вклада отдачи ядра, которая может быть получена с применением эффективных операторов, мы будем также называть вкладом низших порядков (L).

Наиболее простой способ построения теории возмущений по  $1/Z$  в брейтовском приближении для вклада отдачи ядра в  $g$ -фактор основан на гамильтониане Дирака-Кулона-Брейта (DCB) для иона, помещённого в магнитное поле:

$$\tilde{H}_{\text{DCB}} = \tilde{\Lambda}^{(+)} [\tilde{H}_0 + H_{\text{int}}] \tilde{\Lambda}^{(+)}, \quad (11)$$

$$\tilde{H}_0 = \sum_j \tilde{h}_D(j), \quad (12)$$

$$H_{\text{int}} = \alpha \sum_{i < j} \left[ \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla_i) (\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \nabla_j) r_{ij} \right]. \quad (13)$$

Если в гамильтониан Дирака включён экранирующий потенциал, то к  $H_{\text{int}}$  необходимо добавить контрчлен  $\delta H_{\text{int}} = -\sum_j V_{\text{scr}}(r_j)$ . Проекционный оператор  $\tilde{\Lambda}^{(+)}$  в уравнении (11) строится как произведение одноэлектронных проекторов на состояния с положительной энергией, которые соответствуют гамильтониану  $\tilde{h}_D$  в (2). Обычный гамильтониан DCB (в отсутствие магнитного поля) может быть записан как

$$H_{\text{DCB}} = \Lambda^{(+)} [H_0 + H_{\text{int}}] \Lambda^{(+)}, \quad (14)$$

$$H_0 = \sum_j h_D(j), \quad (15)$$

где проектор  $\Lambda^{(+)}$  соответствует одноэлектронному оператору Дирака  $h_D$  в (3). Подчеркнём, что гамильтонианы  $\tilde{H}_{\text{DCB}}$  и  $H_{\text{DCB}}$  различаются не только вкладом, описывающим взаимодействие с магнитным полем,  $\tilde{H}_0 = H_0 + H_{\text{magn}}$ , но и определением проекционных операторов в (11) и (14).

В нулевом порядке по  $1/Z$  вклад отдачи в  $g$ -фактор связанного электрона в брейтовском приближении может быть записан, используя операторы (7), (8), (10)

следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta g_L^{(0)} &= \frac{1}{\mu_0 m_a} \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \langle \tilde{A} | [H_M^{\text{magn}} + H_M] | \tilde{A} \rangle \Big|_{\mathcal{H}=0} \\ &= \frac{1}{\mu_0 \mathcal{H} m_a} \left\{ \langle A | H_M^{\text{magn}} | A \rangle \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_N' \frac{\langle A | H_M | N \rangle \langle N | H_{\text{magn}} | A \rangle}{E_A - E_N} \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь  $|\tilde{A}\rangle$  и  $|A\rangle$  обозначают многоэлектронные волновые функции исследуемого состояния, вычисленные в присутствии магнитного поля,  $\tilde{H}_0|\tilde{A}\rangle = \tilde{E}_A|\tilde{A}\rangle$ , и без поля,  $H_0|A\rangle = E_A|A\rangle$ , соответственно. Они построены из собственных функций соответствующих одноэлектронных гамильтонианов Дирака  $\tilde{h}_D$  и  $h_D$ . Многоэлектронные энергии  $\tilde{E}_A$  и  $E_A$  равны сумме одноэлектронных энергий Дирака. Например,  $E_A = \varepsilon_a + \sum_c \varepsilon_c$ , где введено суммирование по всем электронным состояниям  $|c\rangle$  замкнутых оболочек. В свою очередь, суммирование по  $|N\rangle$  в уравнении (16) выполняется по полному многоэлектронному спектру гамильтониана  $H_0$ , т.е.  $H_0|N\rangle = E_N|N\rangle$ . В суммирование включены одноэлектронные возбуждения из состояния  $|A\rangle$  в отрицательный спектр. Штрих у знака суммы в уравнении (16) и далее указывает на то, что члены с обращающимися в ноль знаменателями должны быть опущены из суммирования. Выражение  $\Delta g_L^{(0)}$  удобно разделить на одноэлектронную (вклады с  $i = j$  в  $H_M^{\text{magn}}$  и  $H_M$ ) и двухэлектронную (вклады с  $i \neq j$ ) части:

$$\Delta g_L^{(0)} = \Delta g_{L-1\text{el}}^{(0)} + \Delta g_{L-2\text{el}}^{(0)}. \quad (17)$$

В случае основного состояния  $(1s)^2 2s$  литиеподобных ионов двухэлектронная часть равна нулю в нулевом порядке по  $1/Z$ , в то время как одноэлектронная часть имеет чисто релятивистское происхождение [29,30]. Для бороподобных ионов вклады отдачи ядра  $\Delta g_{L-1\text{el}}^{(0)}$  и  $\Delta g_{L-2\text{el}}^{(0)}$  обладают ненулевым нерелятивистским пределом, и соответствующие  $\alpha Z$ -разложения начинаются, следовательно, с  $(m/M)(\alpha Z)^0$  [35]. Отметим, что вклад  $\Delta g_L^{(0)}$  можно получить непосредственно из уравнения (1), если ограничиться брейтовским приближением.

Первый порядок теории возмущений по  $H_{\text{int}}$  приводит к следующей поправке к вкладу отдачи ядра:

$$\begin{aligned} \Delta g_L^{(1)} &= \frac{2}{\mu_0 m_a} \\ &\times \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \sum_N^{(+)} \frac{\langle \tilde{A} | [H_M^{\text{magn}} + H_M] | \tilde{N} \rangle \langle \tilde{N} | H_{\text{int}} | \tilde{A} \rangle}{\tilde{E}_A - \tilde{E}_N} \Big|_{\mathcal{H}=0}, \end{aligned} \quad (18)$$

где знак плюс над суммой указывает, что промежуточные состояния  $|\tilde{N}\rangle$  строятся только из собственных функций гамильтониана Дирака  $\tilde{h}_D$  с положительными

энергиями, т.е.  $[\tilde{\Lambda}^{(+)}\tilde{H}_0\tilde{\Lambda}^{(+)}]|\tilde{N}\rangle = \tilde{E}_N|\tilde{N}\rangle$ . Часть выражения (18), соответствующую оператору  $H_M^{\text{magn}}$ , можно легко переписать в явном виде. Действительно, получаем

$$\Delta g_{L-\text{magn}}^{(1)} = \frac{2}{\mu_0 \mathcal{H} m_a} \sum_N^{(+)} \frac{\langle A|H_M^{\text{magn}}|N\rangle \langle N|H_{\text{int}}|A\rangle}{E_A - E_N}, \quad (19)$$

где  $[\Lambda^{(+)}H_0\Lambda^{(+)}]|N\rangle = E_N|N\rangle$ . Явная запись второй части уравнения (18) довольно громоздка, и мы не приводим её здесь. Вклад  $\Delta g_L^{(1)}$  вычислен в настоящей работе. Поправки более высокого порядка по межэлектронному взаимодействию к эффекту отдачи ядра для  $g$ -фактора иона могут быть получены, например, методом взаимодействия конфигураций [36] или с использованием рекурсивного представления теории возмущений [29,30,41]. Однако эта задача лежит за рамками настоящего исследования.

Вернёмся теперь к исходной полностью релятивистской формуле (1) и обсудим вклад высших порядков (Н) по  $\alpha Z$ , который не учитывается эффективными операторами  $H_M^{\text{magn}}$  и  $H_M$ . Вывод данного выражения требует применения квантовой электродинамики для связанных состояний за рамками приближения Брейта. По этой причине мы будем называть этот вклад также КЭД вкладом. Одноэлектронная часть вклада высших порядков в эффект отдачи ядра для электрона в состоянии  $|a\rangle$  имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta g_{H-1\text{el}}^{(0)} &= \frac{1}{m_a} \frac{m}{M} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \\ &\times \left\{ \langle \delta a|B_{-}^k(\omega)G(\omega + \varepsilon_a)B_{+}^k(\omega)|a\rangle \right. \\ &+ \langle a|B_{-}^k(\omega)G(\omega + \varepsilon_a)B_{+}^k(\omega)|\delta a\rangle \\ &+ \langle a|B_{-}^k(\omega)G(\omega + \varepsilon_a) \left( [\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z - \langle a|[\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z|a\rangle \right) \\ &\left. \times G(\omega + \varepsilon_a)B_{+}^k(\omega)|a\rangle \right\}, \quad (20) \end{aligned}$$

где  $|\delta a\rangle = \sum_n^{\varepsilon_n \neq \varepsilon_a} |n\rangle \langle n|[\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z|a\rangle (\varepsilon_a - \varepsilon_n)^{-1}$  — поправка к волновой функции за счёт внешнего магнитного поля,  $B_{\pm}^k(\omega) = D^k(\omega) \pm [p^k, V]/(\omega + i0)$ ,  $[A, B] = AB - BA$ , и стандартная кулоновская функция Грина для уравнения Дирака (в отсутствие  $\mathcal{H}$ ) может быть записана в виде

$$G(\omega) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{\omega - \varepsilon_n(1 - i0)}. \quad (21)$$

Явная формула для двухэлектронной части  $\Delta g_{H-2\text{el}}^{(0)}$  вклада высших порядков в эффект отдачи ядра для  $g$ -фактора исследуемого состояния довольно длинная. Поэтому мы приводим полностью более компактное выражение для релятивистского двухэлектронного вклада  $\Delta g_{2\text{el}}^{(0)}$ , который возникает из уравнения (1) и включает в себя соответствующую часть вклада

низших порядков. В рамках приближения независимых электронов формула для двухэлектронного вклада отдачи ядра, справедливая во всех порядках по  $\alpha Z$ , может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Delta g_{2\text{el}}^{(0)} &= \Delta g_{L-2\text{el}}^{(0)} + \Delta g_{H-2\text{el}}^{(0)} \\ &= \frac{1}{m_a} \frac{m}{M} \sum_c \left\{ \epsilon_{3kl} \left( \langle a|r^k|c\rangle \langle c|[p^l - D^l(\Delta)]|a\rangle \right. \right. \\ &+ \langle a|[p^l - D^l(\Delta)]|c\rangle \langle c|r^k|a\rangle \left. \right) \\ &- \langle \delta a|[p^k - D^k(\Delta)]|c\rangle \langle c|[p^k - D^k(\Delta)]|a\rangle \\ &- \langle a|[p^k - D^k(\Delta)]|\delta c\rangle \langle c|[p^k - D^k(\Delta)]|a\rangle \\ &- \langle a|[p^k - D^k(\Delta)]|c\rangle \langle \delta c|[p^k - D^k(\Delta)]|a\rangle \\ &- \langle a|[p^k - D^k(\Delta)]|c\rangle \langle c|[p^k - D^k(\Delta)]|\delta a\rangle \\ &+ \left( \langle a|\frac{dD^k(\omega)}{d\omega}\Big|_{\omega=\Delta}|c\rangle \langle c|[p^k - D^k(\Delta)]|a\rangle \right. \\ &+ \langle a|[p^k - D^k(\Delta)]|c\rangle \langle c|\frac{dD^k(\omega)}{d\omega}\Big|_{\omega=\Delta}|a\rangle \left. \right) \\ &\times \left( \langle a|[\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z|a\rangle - \langle c|[\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z|c\rangle \right) \left. \right\}, \quad (22) \end{aligned}$$

где  $\epsilon_{ikl}$  — символ Леви-Чивиты, суммирование выполняется по электронным состояниям  $|c\rangle$  замкнутых оболочек,  $\Delta = \varepsilon_a - \varepsilon_c$  и  $|\delta c\rangle = \sum_n^{\varepsilon_n \neq \varepsilon_c} |n\rangle \langle n|[\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}]_z|c\rangle (\varepsilon_c - \varepsilon_n)^{-1}$ . Выражение (22) сводится к вкладу низших порядков  $\Delta g_{L-2\text{el}}^{(0)}$ , если положить  $\Delta = 0$  (в этом пределе члены с  $d\mathbf{D}/d\omega$  обращаются в ноль) и отбросить слагаемые с произведением  $\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}$ . Вклад высших порядков  $\Delta g_{H-2\text{el}}^{(0)}$  соответствует остатку,  $\Delta g_{2\text{el}}^{(0)} - \Delta g_{L-2\text{el}}^{(0)}$ .

### 3. Результаты и обсуждение

В этом разделе представлены результаты наших расчётов эффекта отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  борopodobных ионов. Начальное приближение определяется гамильтонианом Дирака  $h_D$  со сферически симметричным потенциалом  $V(r)$ . Расчёты выполнены как для кулоновского потенциала в качестве  $V(r)$  в уравнении (3), так и для некоторых эффективных потенциалов. А именно мы используем потенциал Хартри (СН), потенциал Пердью-Цунгера (PZ) [42], потенциал Кона-Шэма (KS) [43] и локальный потенциал Дирака-Фока (LDF) [44]. Эти эффективные потенциалы совпадают с потенциалами, использованными в работе [35]. Расчёты с эффективным потенциалом позволяют частично учесть поправки на межэлектронное взаимодействие более высокого порядка. Использование различных начальных приближений даёт некоторую оценку неучтённых вкладов более высокого порядка. Для описания распределения заряда ядра мы используем

**Таблица 1.** Одноэлектронный вклад низших порядков  $\Delta g_{L-1el}^{(0)}$  в эффект отдачи для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$ . Результаты представлены в терминах функции  $A(\alpha Z)$ , определённой уравнением (23). Обозначения Coul, CH, PZ, KS и LDF относятся к расчётам с кулоновским и различными экранирующими потенциалами (см. текст)

Z	$A_{1el}(\alpha Z)$				
	Coul	CH	PZ	KS	LDF
18	-0.662641	-0.663435	-0.663311	-0.663310	-0.663384
20	-0.661697	-0.662583	-0.662444	-0.662445	-0.662525
30	-0.655489	-0.656845	-0.656628	-0.656637	-0.656752
40	-0.646801	-0.648643	-0.648349	-0.648369	-0.648520
50	-0.635641	-0.637990	-0.637621	-0.637655	-0.637842
60	-0.622014	-0.624900	-0.624457	-0.624512	-0.624733
70	-0.605929	-0.609395	-0.608877	-0.608961	-0.609212
80	-0.587398	-0.591498	-0.590907	-0.591032	-0.591303
82	-0.583399	-0.587635	-0.587028	-0.587164	-0.587438
90	-0.566432	-0.571244	-0.570578	-0.570763	-0.571038
92	-0.561948	-0.566914	-0.566232	-0.566432	-0.566706

модель Ферми, среднеквадратичные зарядовые радиусы взяты из работы [45]. Суммирование по промежуточным электронным состояниям осуществлено с применением конечных базисных наборов, построенных в рамках метода дуального кинетического балланса [46] из  $B$ -сплайнов [47].

Для представления вклада низших порядков (в брейтовском приближении)  $\Delta g_L^{(0)}$  в  $g$ -фактор бороподобных ионов в нулевом порядке по  $1/Z$  введём функцию  $A(\alpha Z)$ , определённую согласно

$$\Delta g_L^{(0)} = \frac{m}{M} A(\alpha Z). \quad (23)$$

Одноэлектронная часть  $\Delta g_{L-1el}^{(0)}$  вклада низших порядков приведена в табл. 1 в терминах данной функции  $A(\alpha Z)$ . Результаты, полученные для кулоновского потенциала ядра, представлены во втором столбце, а значения для эффективных потенциалов, показаны в последующих столбцах. Двухэлектронная часть эффекта отдачи ядра  $\Delta g_{2el}^{(0)}$  в  $g$ -фактор состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов в нулевом порядке по  $1/Z$  представлена в терминах функции  $A(\alpha Z)$  в табл. 2. Для каждого  $Z$  отдельно показаны двухэлектронные вклады низших порядков  $\Delta g_{L-2el}^{(0)}$  и высших порядков  $\Delta g_{H-2el}^{(0)}$ . Видно, что последний быстро растёт и для бороподобного урана достигает уровня порядка 5% от вклада низших порядков.

Поправку высших порядков (КЭД)  $\Delta g_{H-1el}^{(0)}$  к одноэлектронной части вклада отдачи ядра  $\Delta g_{L-1el}^{(0)}$  удобно представить посредством функции  $P(\alpha Z)$ :

$$\Delta g_{H-1el}^{(0)} = \frac{m}{M} \frac{(\alpha Z)^3}{8} P(\alpha Z). \quad (24)$$

Недавно было показано [33], что для  $p$ -состояний данный вклад ведет себя как  $(m/M)(\alpha Z)^3$ , в отличие от  $s$ -

состояний, где он проявляет поведение  $(m/M)(\alpha Z)^5$ . Результаты для валентного состояния  ${}^2P_{3/2}$ , полученные для кулоновского и четырёх эффективных потенциалов, представлены в табл. 3 в терминах функции  $P(\alpha Z)$ . Сравнивая данные в табл. 1 и 3 и принимая во внимание уравнения (23) и (24), можно заметить, что КЭД поправка к одноэлектронному вкладу отдачи ядра монотонно растёт и достигает приблизительно 3% для  $Z = 92$ .

Поправка первого порядка по  $1/Z$  на межэлектронное взаимодействие к эффекту отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  представлена в табл. 4 в терминах функции  $B(\alpha Z)$ :

$$\Delta g_L^{(1)} = \frac{m}{M} \frac{B(\alpha Z)}{Z}. \quad (25)$$

Можно видеть, что отдельные вклады, приведённые в табл. 1, 2 и 4, могут существенно варьироваться от одного начального приближения к другому. Однако полное значение в брейтовском приближении, которое является суммой вкладов низших порядков в нулевом и

**Таблица 2.** Двухэлектронный вклад эффекта отдачи ядра  $\Delta g_{2el}^{(0)}$  в  $g$ -фактор состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов в нулевом порядке по  $1/Z$ . Вклад низших порядков  $\Delta g_{L-2el}^{(0)}$  и вклад высших порядков  $\Delta g_{H-2el}^{(0)}$  показаны по отдельности в строках, помеченных L и H соответственно. Результаты представлены в терминах функции  $A(\alpha Z)$ , определённой уравнением (23)

Z	Часть	$A_{2el}(\alpha Z)$				
		Coul	CH	PZ	KS	LDF
18	L	0.278294	0.302879	0.303671	0.307182	0.303870
	H	-0.000026	-0.000018	-0.000019	-0.000018	-0.000018
20	L	0.278503	0.300270	0.300992	0.304014	0.301128
	H	-0.000039	-0.000028	-0.000030	-0.000028	-0.000029
30	L	0.280022	0.294232	0.294709	0.296513	0.294702
	H	-0.000197	-0.000160	-0.000164	-0.000160	-0.000162
40	L	0.282575	0.293564	0.293909	0.295237	0.293858
	H	-0.000616	-0.000528	-0.000538	-0.000530	-0.000533
50	L	0.286619	0.295912	0.296182	0.297274	0.296116
	H	-0.001486	-0.001316	-0.001336	-0.001320	-0.001326
60	L	0.292789	0.301078	0.301312	0.302277	0.301235
	H	-0.003050	-0.002756	-0.002791	-0.002764	-0.002774
70	L	0.301922	0.309554	0.309782	0.310681	0.309691
	H	-0.005605	-0.005137	-0.005195	-0.005153	-0.005166
80	L	0.315116	0.322255	0.322507	0.323375	0.322391
	H	-0.009534	-0.008825	-0.008916	-0.008854	-0.008868
82	L	0.318355	0.325403	0.325663	0.326529	0.325540
	H	-0.010526	-0.009759	-0.009858	-0.009792	-0.009805
90	L	0.333669	0.340352	0.340654	0.341516	0.340499
	H	-0.015348	-0.014306	-0.014442	-0.014356	-0.014367
92	L	0.338148	0.344735	0.345051	0.345912	0.344886
	H	-0.016795	-0.015673	-0.015821	-0.015728	-0.015738

**Таблица 3.** Одноэлектронный вклад высших порядков (КЭД вклад)  $\Delta g_{H-1el}^{(0)}$  в эффект отдачи для  $g$ -фактора состояния  $2p_{3/2}$ . Результаты представлены в терминах функции  $P(\alpha Z)$ , определённой уравнением (24)

Z	$P(\alpha Z)$				
	Coul	CH	PZ	KS	LDF
18	0.26965	0.20958	0.21643	0.20984	0.21363
20	0.27637	0.22021	0.22667	0.22056	0.22403
30	0.30917	0.26450	0.26966	0.26490	0.26749
40	0.33996	0.30103	0.30546	0.30136	0.30354
50	0.36816	0.33285	0.33678	0.33309	0.33502
60	0.39352	0.36080	0.36438	0.36099	0.36271
70	0.41619	0.38543	0.38875	0.38560	0.38714
80	0.43681	0.40752	0.41065	0.40770	0.40908
82	0.44079	0.41173	0.41483	0.41192	0.41326
90	0.45666	0.42830	0.43133	0.42854	0.42975
92	0.46070	0.43246	0.43548	0.43271	0.43389

**Таблица 4.** Поправка первого порядка по  $1/Z$  на межэлектронное взаимодействие к эффекту отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  $2P_{3/2}$  бороподобных ионов в брейтовском приближении. Результаты представлены в терминах функции  $B(\alpha Z)$ , определённой уравнением (25)

Z	$B(\alpha Z)$				
	Coul	CH	PZ	KS	LDF
18	0.91674	0.59705	0.57342	0.50157	0.57305
20	0.91361	0.59287	0.56908	0.50150	0.56983
30	0.89264	0.57019	0.54475	0.48712	0.55026
40	0.86203	0.54328	0.51416	0.45917	0.52443
50	0.82029	0.51093	0.47593	0.42089	0.49170
60	0.76513	0.47277	0.42939	0.37288	0.45195
70	0.69329	0.42913	0.37436	0.31560	0.40559
80	0.60022	0.38145	0.31155	0.25043	0.35401
82	0.57862	0.37174	0.29829	0.23678	0.34337
90	0.48131	0.33448	0.24491	0.18249	0.30185
92	0.45417	0.32607	0.23196	0.16958	0.29224

первом порядке по  $1/Z$ ,

$$\Delta g_{Breit} = \Delta g_L^{(0)} + \Delta g_L^{(1)}, \quad (26)$$

гораздо более стабильно. Это продемонстрировано для  $Z = 18, 50$  и  $92$  в табл. 5, где вклад нулевого порядка  $A = A_{1el} + A_{2el}$  и поправка первого порядка  $B/Z$  показаны вместе с их суммой. Данные взяты из табл. 1, 2 (строки, помеченные L) и 4.

Окончательное значение вклада отдачи ядра в  $g$ -фактор состояния  $2P_{3/2}$  представлено в табл. 6. Оно найдено путём суммирования всех рассмотренных выше поправок. В качестве конечных значений для каждого вклада использованы результаты, полученные для потенциала LDF. В табл. 6 полное значение представлено как сумма вклада низших порядков (в брейтовском

приближении), заданного уравнением (26), и вклада высших порядков (КЭД):

$$\Delta g_{rec} = \Delta g_{Breit} + \Delta g_{QED}. \quad (27)$$

Квантово-электродинамический вклад объединяет данные, приведённые в табл. 2 (строки H) и 3:

$$\Delta g_{QED} = \Delta g_{H-1el}^{(0)} + \Delta g_{H-2el}^{(0)}. \quad (28)$$

Все результаты в табл. 6 показаны в терминах не зависящей от отношения масс  $m/M$  функции  $F(\alpha Z)$ :

$$\Delta g = \frac{m}{M} F(\alpha Z), \quad (29)$$

так что

$$F_{rec}(\alpha Z) = F_{Breit}(\alpha Z) + F_{QED}(\alpha Z). \quad (30)$$

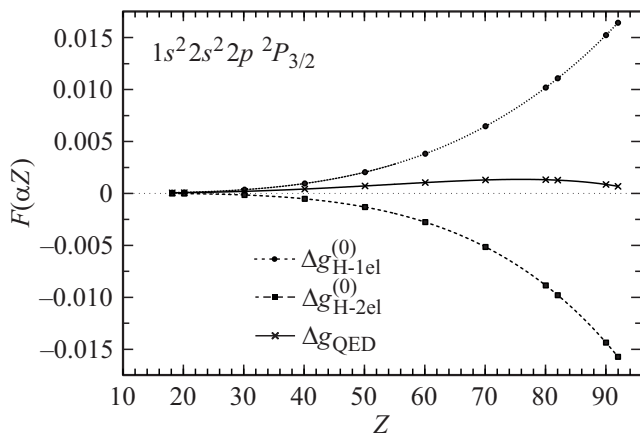
Можно видеть, что во всём рассматриваемом диапазоне  $Z$  полученный КЭД вклад в эффект отдачи ядра довольно

**Таблица 5.** Эффект отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  $2P_{3/2}$  бороподобных ионов в брейтовском приближении для кулоновского и различных эффективных потенциалов. Вклады нулевого ( $A(\alpha Z)$ , уравнение (23)) и первого ( $B(\alpha Z)/Z$ , уравнение (25)) порядков по межэлектронному взаимодействию показаны вместе с их суммой

Z	Вклад	Coul	CH	PZ	KS	LDF
18	A	-0.384348	-0.360555	-0.359640	-0.356128	-0.359513
	B/Z	0.050930	0.033170	0.031857	0.027865	0.031836
	A+B/Z	-0.333417	-0.327386	-0.327783	-0.328264	-0.327677
50	A	-0.349022	-0.342078	-0.341439	-0.340381	-0.341727
	B/Z	0.016406	0.010219	0.009519	0.008418	0.009834
	A+B/Z	-0.332616	-0.331859	-0.331920	-0.331963	-0.331893
92	A	-0.223800	-0.222179	-0.221182	-0.220520	-0.221820
	B/Z	0.004937	0.003544	0.002521	0.001843	0.003177
	A+B/Z	-0.218864	-0.218635	-0.218660	-0.218677	-0.218644

**Таблица 6.** Брейтовский, КЭД и полный вклады эффекта отдачи ядра в  $g$ -фактор состояния  $2P_{3/2}$  бороподобных ионов, выраженные в терминах функции  $F(\alpha Z)$ , которая определена уравнением (29)

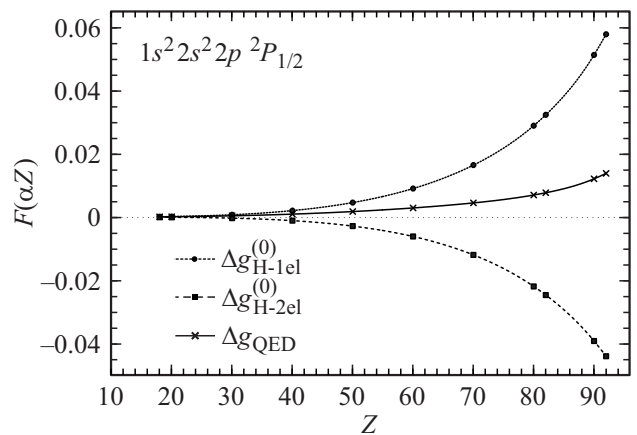
Z	$F_{Breit}(\alpha Z)$	$F_{QED}(\alpha Z)$	$F_{rec}(\alpha Z)$
18	-0.3277(68)	0.00004(1)	-0.3276(68)
20	-0.3329(55)	0.00006(1)	-0.3328(55)
30	-0.3437(24)	0.00019(3)	-0.3435(24)
40	-0.3416(13)	0.00041(5)	-0.3411(13)
50	-0.33189(78)	0.00071(9)	-0.33118(78)
60	-0.31597(50)	0.00103(14)	-0.31493(52)
70	-0.29373(33)	0.00128(20)	-0.29244(38)
80	-0.26449(21)	0.00131(27)	-0.26318(35)
82	-0.25771(20)	0.00126(29)	-0.25645(35)
90	-0.22718(14)	0.00085(36)	-0.22633(39)
92	-0.21864(13)	0.00067(38)	-0.21797(40)



**Рис. 1.** Вклад высших порядков (КЭД вклад) в эффект отдачи для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобных ионов. Одноэлектронная часть  $\Delta g_{H-1el}^{(0)}$  и двухэлектронная часть  $\Delta g_{H-2el}^{(0)}$ , составляющие полный КЭД вклад  $\Delta g_{QED} = \Delta g_{H-1el}^{(0)} + \Delta g_{H-2el}^{(0)}$ , показаны по отдельности. Результаты представлены в терминах функции  $F(\alpha Z)$ , определённой уравнением (29).

мал по сравнению с вкладом, полученным в брейтовском приближении. Более того, его абсолютное значение начинает уменьшаться при  $Z \gtrsim 80$ . Это является результатом сильного сокращения между одно- и двухэлектронными вкладами высших порядков, что показано на рис. 1, где эти вклады построены в терминах  $F(\alpha Z)$  вместе с их суммой. Аналогичная ситуация имеет место для основного состояния  ${}^2P_{1/2}$  бороподобных ионов, которое было исследовано в работе [35]. Одноэлектронный и двухэлектронный КЭД вклады, а также суммарная КЭД часть эффекта отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{1/2}$  показаны на рис. 2 в терминах функции  $F(\alpha Z)$ . Видно, что отдельные вклады значительно сокращаются в сумме. Тем не менее, в отличие от состояния  ${}^2P_{3/2}$  для основного состояния общий КЭД вклад остается монотонной функцией  $Z$ .

Теоретическая погрешность, указанная в табл. 6 в скобках, имеет несколько источников происхождения. Прежде всего мы оцениваем погрешность, связанную с неполным учётом поправки на межэлектронное взаимодействие к эффекту отдачи ядра. Для брейтовского вклада в дополнение к разбросу результатов, полученных в расчётах с различными эффективными потенциалами, мы добавляем в погрешность величину  $(\Delta g_L^{(1)}/\Delta g_L^{(0)}) \cdot \Delta g_L^{(1)}$  рассчитанную для кулоновского потенциала. Это делается для того, чтобы избежать возможной недооценки двухэлектронного вклада отдачи в  $g$ -фактор связанного электрона в старших порядках по  $1/Z$  (см. соответствующее обсуждение в работах [34–36]). Для КЭД части разброс результатов для различных эффективных потенциалов дополнен весьма консервативной оценкой  $(2/Z)\Delta g_{H-1el}$ . Мы используем здесь одноэлектронный КЭД вклад, так как сильное сокращение одно- и двухэлектронного вкладов, обна-



**Рис. 2.** Вклад высших порядков (КЭД вклад) в эффект отдачи для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{1/2}$  бороподобных ионов. Одноэлектронная часть  $\Delta g_{H-1el}^{(0)}$  и двухэлектронная часть  $\Delta g_{H-2el}^{(0)}$ , составляющие полный КЭД вклад  $\Delta g_{QED} = \Delta g_{H-1el}^{(0)} + \Delta g_{H-2el}^{(0)}$ , показаны по отдельности. Результаты представлены в терминах функции  $F(\alpha Z)$ , определённой уравнением (29).

**Таблица 7.** Вклад отдачи ядра в  $g$ -фактор состояния  ${}^2P_{3/2}$  некоторых бороподобных ионов в диапазоне  $Z = 18 - 92$

Ион	$(m/M) \cdot 10^6$	$\Delta g_{rec} \cdot 10^6$
${}^{40}_{18}\text{Ar}^{13+}$	13.7308	-4.499(93)
${}^{40}_{20}\text{Ca}^{15+}$	13.7311	-4.570(75)
${}^{48}_{26}\text{Ca}^{15+}$	11.4427	-3.809(63)
${}^{120}_{50}\text{Sn}^{45+}$	4.57628	-1.516(4)
${}^{142}_{60}\text{Nd}^{55+}$	3.86665	-1.218(2)
${}^{208}_{82}\text{Pb}^{77+}$	2.63826	-0.677(1)
${}^{238}_{92}\text{U}^{87+}$	2.30495	-0.502(1)

руженное в нулевом порядке по  $1/Z$ , может не иметь места в более высоких порядках. Во-вторых, мы учитываем погрешность, связанную с приближенным учётом поправки на конечный размер ядра. Как указано в работе [32], использование в начальном приближении потенциала протяженного ядра даёт лишь частичное описание данного эффекта. Оценивая связанную с этим погрешность, мы предполагаем, что для  $g$ -фактора связанного электрона относительная погрешность от этого приближения имеет то же значение, что и для энергии связи [48] (см. также соответствующее обсуждение, например, в работах [30,35]). Все перечисленные погрешности складываются квадратично.

Наконец, в табл. 7 мы представляем вклад отдачи ядра в  $g$ -фактор состояния  ${}^2P_{3/2}$  в некоторых бороподобных ионах в диапазоне  $Z = 18 - 92$ . Массы ядер для изотопов взяты из компиляции Ame2012 [49] в соответствии с [50]. Эффект отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  ${}^2P_{3/2}$  бороподобного аргона ( $Z = 18$ ) был исследован в работе [21]. Выполненные там расчёты не включали

одноэлектронный вклад высших порядков  $\Delta g_{H-1el}$ , в то время как поправка на межэлектронное взаимодействие первого порядка по  $1/Z$  была рассмотрена только для нерелятивистской части оператора  $H_M^{magn}$ . Полученное сейчас полное значение вклада отдачи ядра для бороподобного аргона согласуется с предыдущим.

Новое поколение экспериментов по измерению  $g$ -фактора бороподобных ионов нацелено на точность  $10^{-9}$  и выше [8]. Из табл. 7 можно заключить, что поправка на отдачу ядра к  $g$ -фактору состояния  $^2P_{3/2}$  представляет собой существенный вклад в общее значение. Для тяжёлых бороподобных ионов КЭД часть превышает текущую теоретическую погрешность (табл. 6). Для дальнейшего улучшения теоретической точности необходимо выполнить расчёты поправок на межэлектронное взаимодействие второго и более высокого порядков в брейтовском приближении, а также КЭД поправки первого порядка по  $1/Z$ . Данные проблемы будут рассмотрены нами в будущих исследованиях.

## Заключение

В настоящей работе был вычислен эффект отдачи ядра для  $g$ -фактора состояния  $^2P_{3/2}$  бороподобных ионов в диапазоне  $Z = 18 - 92$ . Ведущие одноэлектронные и двухэлектронные вклады рассчитаны в рамках строгого КЭД формализма во всех порядках по параметру  $\alpha Z$ . Поправка первого порядка на межэлектронное взаимодействие к эффекту отдачи ядра получена в приближении Брейта с применением эффективных релятивистских операторов. Вклады высших порядков по  $1/Z$  частично учтены с помощью эффективного потенциала. В результате представлены наиболее точные теоретические значения для вклада отдачи ядра в  $g$ -фактор состояния  $^2P_{3/2}$ .

## Финансирование работы

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 17-12-01097).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] Häffner H., Beier T., Hermanspahn N., Kluge H.-J., Quint W., Stahl S., Verdú J., Werth G. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 5308.
- [2] Verdú J., Djekić S., Stahl S., Valenzuela T., Vogel M., Werth G., Beier T., Kluge H.-J., Quint W. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 093002.
- [3] Sturm S., Wagner A., Schabinger B., Zatorski J., Harman Z., Quint W., Werth G., Keitel C.H., Blaum K. // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 023002.
- [4] Sturm S., Wagner A., Kretschmar M., Quint W., Werth G., Blaum K. // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 030501(R).
- [5] Wagner A., Sturm S., Köhler F., Glazov D.A., Volotka A.V., Plunien G., Quint W., Werth G., Shabaev V.M., Blaum K. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 033003.
- [6] Sturm S., Köhler F., Zatorski J., Wagner A., Harman Z., Werth G., Quint W., Keitel C.H., Blaum K. // Nature. 2014. V. 506. P. 467.
- [7] Köhler F., Blaum K., Block M., Chenmarev S., Eliseev S., Glazov D.A., Goncharov M., Hou J., Kracke A., Nesterenko D.A., Novikov Y.N., Quint W., Ramirez E.M., Shabaev V.M., Sturm S., Volotka A.V., Werth G. // Nat. Commun. 2016. V. 7. P. 10246.
- [8] Arapoglou I., Egl A., Höcker M., Sailer T., Tu B., Weigel A., Wolf R., Cakir H., Yerokhin V.A., Oreshkina N.S., Agababae V.A., Volotka A.V., Zinenko D.V., Glazov D.A., Harman Z., Keitel C.H., Sturm S., Blaum K. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 253001.
- [9] Glazov D.A., Köhler-Langes F., Volotka A.V., Blaum K., Heiße F., Plunien G., Quint W., Rau S., Shabaev V.M., Sturm S., Werth G. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123. P. 173001.
- [10] Shabaev V.M., Glazov D.A., Plunien G., Volotka A.V. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2015. V. 44. P. 031205.
- [11] Sturm S., Vogel M., Köhler-Langes F., Quint W., Blaum K., Werth G. // Atoms. 2017. V. 5. P. 4.
- [12] Shabaev V.M., Bondarev A.I., Glazov D.A., Kaygorodov M.Y., Kozhedub Y.S., Maltsev I.A., Malyshev A.V., Popov R.V., Tupitsyn I.I., Zubova N.A. // Hyp. Interact. 2018. V. 239. P. 60.
- [13] Shabaev V.M., Glazov D.A., Oreshkina N.S., Volotka A.V., Plunien G., Kluge H.-J., Quint W. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. P. 253002.
- [14] Volotka A.V., Plunien G. // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 113. P. 023002.
- [15] Yerokhin V.A., Berseneva E., Harman Z., Tupitsyn I.I., Keitel C.H. // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 116. P. 100801.
- [16] Shabaev V.M., Glazov D.A., Shabaeva M.B., Yerokhin V.A., Plunien G., Soff G. // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. P. 062104.
- [17] Малышев А.В., Шабает В.М., Глазов Д.А., Тупицын И.И. // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. С. 731.
- [18] Volotka A.V., Glazov D.A., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Plunien G. // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 253004.
- [19] Yerokhin V.A., Pachucki K., Puchalski M., Harman Z., Keitel C.H. // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. P. 062511.
- [20] Glazov D.A., Volotka A.V., Schepetnov A.A., Sokolov M.M., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Plunien G. // Phys. Scr. 2013. V. T156. P. 014014.
- [21] Shchepetnov A.A., Glazov D.A., Volotka A.V., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Plunien G. // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 583. P. 012001.
- [22] Agababae V.A., Glazov D.A., Volotka A.V., Zinenko D.V., Shabaev V.M., Plunien G. // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 1138. P. 012003.
- [23] Soria Orts R., Crespo López-Urrutia J.R., Bruhns H., González Martínez A.J., Harman Z., Jentschura U.D., Keitel C.H., Lapierre A., Tawara H., Tupitsyn I.I., Ullrich J., Volotka A.V. // Phys. Rev. A. 2007. V. 76. P. 052501.
- [24] Egl A., Arapoglou I., Höcker M., König K., Ratajczyk T., Sailer T., Tu B., Weigel A., Blaum K., Nörtershäuser W., Sturm S. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123. P. 123001.
- [25] Agababae V.A., Glazov D.A., Volotka A.V., Zinenko D.V., Shabaev V.M., Plunien G. // X-Ray Spec., в печати, doi 10.1002/xrs.3074.



- [26] von Lindenfels D., Wiesel M., Glazov D.A., Volotka A.V., Sokolov M.M., Shabaev V.M., Plunien G., Quint W., Birkel G., Martin A., Vogel M. // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 023412.
- [27] Vogel M., Ebrahimi M.S., Guo Z., Khodaparast A., Birkel G., Quint W. // Ann. Phys. (Berlin). 2019. V. 531. P. 1800211.
- [28] Sturm S., Arapoglou I., Egl A., Höcker M., Kraemer S., Sailer T., Tu B., Weigel A., Wolf R., López-Urrutia J.C., Blaum K. // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2019. V. 227. P. 1425.
- [29] Shabaev V.M., Glazov D.A., Malyshev A.V., Tupitsyn I.I. // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 119. P. 263001.
- [30] Shabaev V.M., Glazov D.A., Malyshev A.V., Tupitsyn I.I. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. P. 032512.
- [31] Shabaev V.M., Yerokhin V.A. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 091801.
- [32] Shabaev V.M. // Phys. Rev. A. 2001. V. 64. P. 052104.
- [33] Malyshev A.V., Glazov D.A., Shabaev V.M. // arXiv:1911.03978 [physics.atom-ph].
- [34] Glazov D.A., Malyshev A.V., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I. // Opt. Spectrosc. 2018. V. 124. P. 457.
- [35] Aleksandrov I.A., Glazov D.A., Malyshev A.V., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. P. 062521.
- [36] Glazov D.A., Malyshev A.V., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I. // arXiv:1911.12485. [physics.atom-ph].
- [37] Phillips M. // Phys. Rev. 1949. V. 76. P. 1803.
- [38] Shabaev V.M. // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 59.
- [39] Glazov D.A., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Volotka A.V., Yerokhin V.A., Plunien G., Soff G. // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 062104.
- [40] Tupitsyn I.I., Volotka A.V., Glazov D.A., Shabaev V.M., Plunien G., Crespo López-Urrutia J.R., Lapierre A., Ullrich J. // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 062503.
- [41] Glazov D.A., Malyshev A.V., Volotka A.V., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Plunien G. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2017. V. 408. P. 46.
- [42] Perdew J.P., Zunger A. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 5048.
- [43] Kohn W., Sham L.J. // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. A1133.
- [44] Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Pachucki K., Plunien G., Yerokhin V.A. // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 062105.
- [45] Angeli I., Marinova K.P. // At. Data Nucl. Data Tables. 2013. V. 99. P. 69.
- [46] Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Yerokhin V.A., Plunien G., Soff G. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. P. 130405.
- [47] Sapirstein J., Johnson W.R. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. V. 29. P. 5213.
- [48] Aleksandrov I.A., Shchepetnov A.A., Glazov D.A., Shabaev V.M. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2015. V. 48. P. 144004.
- [49] Wang M., Audi G., Wapstra A.H., Kondev F.G., MacCormick M., Xu X., Pfeiffer B. // Chin. Phys. C. 2012. V. 36. P. 1603.
- [50] Yerokhin V.A., Shabaev V.M. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2015. V. 44. P. 033103.