

01

Потенциал ионизации и сродство к электрону 119-го элемента: расчеты в оптимизированном гауссовом базисе

© А.Р. Саегараев¹, И.И. Тупицын^{1,¶}, Д.П. Усов¹, И.М. Савельев¹, Н.К. Дулаев¹,
Л.В. Скрипников^{1,2}, В.М. Шабаев^{1,2}

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

² Национальный исследовательский центр „Курчатовский Институт“ — Петербургский институт ядерной физики,
Гатчина, Ленинградская обл., Россия

¶e-mail: i.tupitsyn@spbu.ru

Поступила в редакцию 22.10.2024 г.

В окончательной редакции 22.10.2024 г.

Принята к публикации 28.10.2024 г.

Проведена оптимизация базисного набора гауссовых функций для релятивистских расчетов химических свойств сверхтяжелого элемента с зарядом ядра $Z = 119$. Полученный базис использован для вычисления потенциала ионизации и сродства к электрону 119-го элемента в рамках односсылочного метода связанных кластеров и метода связанных кластеров в пространстве Фока.

Ключевые слова: сверхтяжелые элементы, 119-й элемент, оптимизация базиса, релятивистские эффекты, корреляционные эффекты, квантово-электродинамические поправки.

DOI: 10.61011/OS.2024.10.59411.7283-24

Введение

Открытие и изучение новых химических элементов долгое время является одной из важнейших областей физических исследований [1]. На данный момент самым тяжелым синтезированным сверхтяжелым элементом (СТЭ) является оганесон (Og, $Z = 118$) [2], который замыкает седьмой период таблицы Менделеева. Следующий за ним является пока еще не синтезированный эка-франций, также известный как унунений (Uue, $Z = 119$). Попытка синтеза 119-го элемента (E119) была предпринята в Центре по изучению тяжелых ионов имени Гельмгольца в Дармштадте (GSI) [3]. В течение нескольких лет эксперимент проводится в Институте физико-химических исследований в Японии (RIKEN) [4]. Опыты по синтезу эка-франция планируются осуществить в Объединенном институте ядерных исследований (JINR) [5], а также в Чжэцзянском институте современной физики (IMP) [6].

Интерес к изучению свойств сверхтяжелых элементов во многом связан со стремлением определить границу применимости периодического закона, согласно которому элементы имеют схожие свойства с другими элементами той же группы (гомологами). Однако нередки случаи, когда некоторые свойства сверхтяжелых элементов существенно отличаются от тех же свойств их более легких гомологов. Так, например, в работе [7] было установлено, что оганесон имеет положительное сродство к электрону, что принципиально отличает его от остальных благородных газов. Отличие в электронной структуре СТЭ от структуры их более легких гомологов связано, с одной стороны, с увеличением

числа остовных электронов и размеров остова и с другой стороны — с возрастающим влиянием релятивистских эффектов, обусловленных увеличением заряда ядра [8].

Потенциал ионизации (IP), сродство к электрону (EA) и поляризуемость E119 были вычислены в работах [9–16]. Расчеты химических свойств соединений E119H, E119F и E119Cl проводились в работах [13,17,18]. В большинстве этих расчетов использовались базисы, полученные методом GCDF (Generator Coordinate Dirac–Fock) [19,20] и его усовершенствованной полиномиальной версией (*p*-GCDF) [21]. Эти базисные наборы адаптированы под расчеты методом Дирака–Фока, а потому могут быть неоптимальными для расчетов методами, учитывающими корреляционные эффекты. В данной работе произведена оптимизация базисного набора гауссовых функций для эка-франция, полученного методом *p*-GCDF в работе [18]. С использованием оптимизированного базиса и метода связанных кластеров были уточнены значения потенциала ионизации и сродства к электрону E119.

Теоретические методы

Расчеты потенциала ионизации и сродства к электрону эка-франция были выполнены с использованием пакетов программ DIRAC [22,23] и EXP-T [24,25]. Для учета эффектов электронной корреляции в предварительных расчетах использовался релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока (FS-CC) [26]. Этот подход предполагает построение эффективного гамильтониана в модельном пространстве, определенном вы-

бранными валентными одноэлектронными функциями. В нашем расчете сектору $0h0p$ пространства Фока соответствует конфигурация $[\text{Rn}] 5f^{14}6d^{10}7s^27p^6$ (катион), сектору $0h1p$ — $[\text{Rn}] 5f^{14}6d^{10}7s^27p^68s^1$ (нейтральный атом), а сектору $0h2p$ — $[\text{Rn}] 5f^{14}6d^{10}7s^27p^68s^2$ (анион). При оптимизации базисного набора гауссовых функций в рамках метода FS-CC был применен метод обобщенного релятивистского потенциала остова (GRECP) [27,28], использование которого позволило исключить из рассмотрения 110 остовных электронов.

Согласно предварительным расчетам, выполненным в рамках подхода FS-CC, основные состояния нейтрального атома E119, а также его катиона и аниона описываются односсылочным методом. Поэтому финальные расчеты потенциала ионизации и сродства к электрону выполнялись в рамках односсылочного метода связанных кластеров с учетом однократных, двукратных и пертурбативных трехкратных возбуждений, CCSD(T). В качестве гамильтониана использовался четырехкомпонентный релятивистский гамильтониан Дирака–Кулона (DC):

$$H_{\text{DC}} = \Lambda^+ \left[\sum_{i=1}^N h_i^D + \sum_{\substack{i=2, \\ j<i}}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Lambda^+, \quad (1)$$

где h^D — одноэлектронный гамильтониан Дирака, включающий в себя взаимодействие с ядром, плотность заряда которого описывается распределением Гаусса [29], N — число электронов, r_{ij} — расстояние между i -м и j -м электронами, а Λ^+ — прямое произведение одноэлектронных проекторов на положительный спектр оператора Дирака–Фока h^{DF} .

Нами также были вычислены дополнительные поправки к потенциалу ионизации и сродству к электрону, включающие в себя вклады Гаунта и квантово-электродинамических эффектов. Оператор взаимодействия Гаунта

$$V_{ij}^{\text{G}} = -\frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j)}{r_{ij}} \quad (2)$$

был включен в расчет на этапе построения одноэлектронного базиса методом Дирака–Фока с помощью двухкомпонентного релятивистского гамильтониана среднего поля (X2Cmmf) [30]. Гамильтониан X2Cmmf построен таким образом, что он воспроизводит положительный спектр уравнения Дирака–Фока [31,32]. Квантово-электродинамические поправки были рассчитаны методами Дирака–Фока (DF) и конфигурационного взаимодействия (CI) в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма (DFS). Подробное описание этих методов можно найти в работах [9,33,34].

Детали расчета

Оптимизация базиса

В качестве начального приближения в данной работе был выбран базис, представленный в статье [18]. Этот набор гауссиан был получен методом p -GCDF [21] и имеет сравнительно небольшое число функций ($34s31p23d18f$), что может сказываться на точности определения вычисляемых величин. Выполненная в нашей работе процедура оптимизации заключается в последовательном добавлении к уже имеющемуся набору новых функций. При этом параметры новых функций выбираются исходя из изменений IP и EA в FS-CC-расчете. Как было сказано выше, при оптимизации базисного набора был использован псевдопотенциал GRECP. В корреляционный расчет, выполненный методом FS-CC с учетом однократных и двукратных возбуждений (FS-CCSD), были включены все занятые в ссылочном детерминанте (ферми-вакууме) орбитали, а также виртуальные орбитали ниже 50 а.у. В активное пространство была включена $8s$ -орбиталь.

Процедура оптимизации аналогична тем, что проводились в работах [35,36]. Обозначим базис, выбранный в качестве начального приближения, с помощью χ_0 . Добавим s -функцию $\gamma_1^s(\alpha)$ с параметром α к базисному набору χ_0 и проведем FS-CCSD расчет для диапазона параметров $\alpha \in [0.0001, 1000]$. Базисная функция $\gamma_1^s(\alpha_1)$, добавление которой дает наибольший вклад в изменение IP и EA в сравнении со значениями атомных свойств без этой функции, включается в базисный набор $\chi_0 + \gamma_1^s(\alpha_1) \equiv \chi_1^s$. Процедура продолжается до тех пор, пока изменение IP и EA с добавленной $(k+1)$ -й функцией в сравнении с расчетом в базисе χ_k^s не будет меньше заданного наперед значения, равного 0.001 eV. Новый базис, содержащий k добавленных оптимизированных s -функций, будет обозначаться

$$\chi_0 + \sum_{m=1}^k \gamma(\alpha_m) \equiv \chi^s. \quad (3)$$

Затем описанная процедура повторяется для p -функций, при этом параметры базисных функций из предыдущего шага остаются неизменными. Тогда обозначим базис с k оптимизированными s -функциями и k' оптимизированными p -функциями как

$$\chi^s + \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^p(\alpha_m) \equiv \chi^p. \quad (4)$$

Аналогичным образом добавляем функции с более высокими орбитальными квантовыми числами вплоть до $l=6$, получая в конечном счете базисный набор χ^l . В табл. 1 представлены изменения значений IP, EA, а также энергий катиона (E_{00}), нейтрального атома (E_{01}) и аниона (E_{02}), полученные после добавления

Таблица 1. Изменение значений потенциала ионизации (IP), сродства к электрону (EA) и энергий катиона (E_{00}), нейтрального атома (E_{01}) и аниона (E_{02}) при добавлении к набору χ^λ дополнительной функции с орбитальным моментом λ ($\lambda = s, \dots, i$). Значения представлены в eV

λ	ΔIP	ΔEA	ΔE_{00}	ΔE_{01}	ΔE_{02}
<i>s</i>	0.00007	0.00007	0.00010	0.00011	0.00013
<i>p</i>	0.00001	0.00002	0.00014	0.00015	0.00015
<i>d</i>	0.00011	0.00017	0.00085	0.00096	0.00110
<i>f</i>	0.00004	0.00013	0.00060	0.00062	0.00064
<i>g</i>	0.00023	0.00104	0.00342	0.00345	0.00346
<i>h</i>	0.00018	0.00011	0.00272	0.00289	0.00296
<i>i</i>	0.00025	0.00034	0.00704	0.00718	0.00725

в уже оптимизированный для квантового числа λ базис новой λ -функции, $\lambda = s, \dots, i$. Из таблицы видно, что в соответствии с написанным выше изменения IP и EA не превышают 0.001 eV. При этом наибольшее изменение в абсолютных значениях энергий достигается при добавлении дополнительной *i*-функции и составляет примерно 0.007 eV. Параметры экспонент оптимизированного базиса представлены в Приложении.

Финальный расчет

Как отмечалось выше, итоговые результаты для IP и EA были получены с использованием четырехкомпонентного гамильтониана DC. При расчете одноэлектронным методом связанных кластеров были учтены однократные, двукратные и пертурбативные трехкратные возбуждения (SR-CCSD(T)). При этом учитывалась корреляция 109 электронов, а активное пространство состояло из виртуальных орбиталей, энергия которых не превышает 1000 а.е.

Для сравнения оптимизированного нами базиса с базисом из работы [20], использованным в работах [10,12,13], был проведен расчет методом связанных кластеров в пространстве Фока с учетом однократных и двукратных возбуждений (FS-CCSD). В корреляционный расчет были включены виртуальные орбитали с энергией ниже 100 а.е. Активное пространство состояло из 8*s*-орбитали. При вычислении IP учитывалась корреляция 78 электронов, а при вычислении EA — 50. Такие параметры расчета совпадают с аналогичными параметрами из работ [10,12].

Результаты вычислений

Используя базис χ_0 , взятый из работы [18], и оптимизированный нами базисный набор χ^i , мы вычислили IP и EA 119-го элемента с помощью метода SR-CCSD(T). Результаты представлены в табл. 2. Как

Таблица 2. Сравнение IP и EA, рассчитанных на неоптимизированном (χ_0) и оптимизированном (χ^i) базисных наборах методом SR-CCSD(T) (eV)

Базис	IP	EA
χ_0	4.649	0.415
χ^i	4.795	0.674

Таблица 3. Потенциал ионизации (IP) и сродство к электрону (EA), вычисленные с базисными наборами χ^λ (eV). Под обозначением χ^λ ($\lambda = s, \dots, i$) подразумевается базисный набор, полученный после оптимизации функций каждой симметрии с $l \leq \lambda$. χ_0 — базисный набор начального приближения. Расчеты проводились методом FS-CCSD с использованием псевдопотенциала GRECP

Базис	IP	EA
χ_0	4.6602	0.4919
χ^s	4.6706	0.5674
χ^p	4.6703	0.6376
χ^d	4.6705	0.6388
χ^f	4.7590	0.6943
χ^g	4.7744	0.7033
χ^h	4.7783	0.7061
χ^i	4.7796	0.7068

можно видеть, оптимизация базиса существенно меняет IP и EA 119-го элемента: оба значения увеличиваются примерно на 0.15 eV. Особенно это заметно для сродства к электрону, изменение которого составляет около 60% его величины, рассчитанной на неоптимизированном базисе.

Чтобы проследить за изменением потенциала ионизации и сродства к электрону в процессе оптимизации, в табл. 3 мы приводим IP и EA, вычисленные методом FS-CCSD с использованием псевдопотенциала GRECP для каждого базисного набора χ^λ (см. предыдущий раздел). Из представленных данных видно, что оптимизация функций с практически каждым значением углового момента λ приводит к увеличению потенциала ионизации и сродства к электрону по отношению к значениям, полученным в базисе, где оптимизация функций симметрии λ не была проведена. Оптимизация *s*-, *p*- и *f*-функций вносит существенный вклад в изменение IP и EA, что говорит о явном недостатке начального базиса χ_0 для описания атомных свойств E119. Величины IP и EA, рассчитанные в полностью оптимизированном базисе с помощью псевдопотенциала, получились равными 4.7796 и 0.7068 eV соответственно.

В табл. 4 представлены значения поправок для потенциала ионизации и сродства к электрону от учета вкладов взаимодействия Гаунта (Gaunt), собственной энергии (SE), потенциалов Юлинга (Ue) и

Таблица 4. Значения дополнительных вкладов для потенциала ионизации (IP) и сродства к электрону (EA) от взаимодействия Гаунта (Gaunt), собственной энергии (SE), потенциалов Юлинга (Ue) и Вичманна–Кролла (WK). Полный вклада от квантово-электродинамических поправок обозначается с помощью QED. Вклад гаунтовского взаимодействия вычислен с помощью метода FS-CCSD, остальные вклады рассчитаны в рамках методов DF и CI-DFS. Значения приведены в eV

Свойство	Вклад	DF	CI-DFS	FS-CCSD
IP	Gaunt			−0.0038
	SE	−0.0236	−0.0231	
	Ue	0.0118	0.0117	
	WK	−0.0009	−0.0009	
	SE+Ue+WK	−0.0127	−0.0123	
	QED	−0.0123	−0.0126	
EA	Gaunt			−0.0005
	SE	−0.0057	−0.0067	
	Ue	0.0030	0.0034	
	WK	−0.0002	< 0.0000	
	SE+Ue+WK	−0.0029	−0.0034	
	QED	−0.0028	−0.0032	

Вичманна–Кролла (WK), вычисленных методами связанных кластеров в пространстве Фока (FS-CCSD), Дирака–Фока (DF) и конфигурационного взаимодействия (CI-DFS). Также в табл. 4 указана полная величина вклада от квантово-электродинамических поправок (QED). Сумма вкладов SE, Ue и WK не совпадает с полным QED-вкладом из-за отсутствия аддитивности. Полный QED-вклад был вычислен путем добавления модельного оператора в гамильтониан. Полученные многоэлектронные волновые функции с учетом полного вклада QED-поправок были использованы для вычисления отдельных вкладов как средних значений соответствующих операторов. В окончательные значения IP и EA был добавлен полный вклад от квантово-электродинамических поправок.

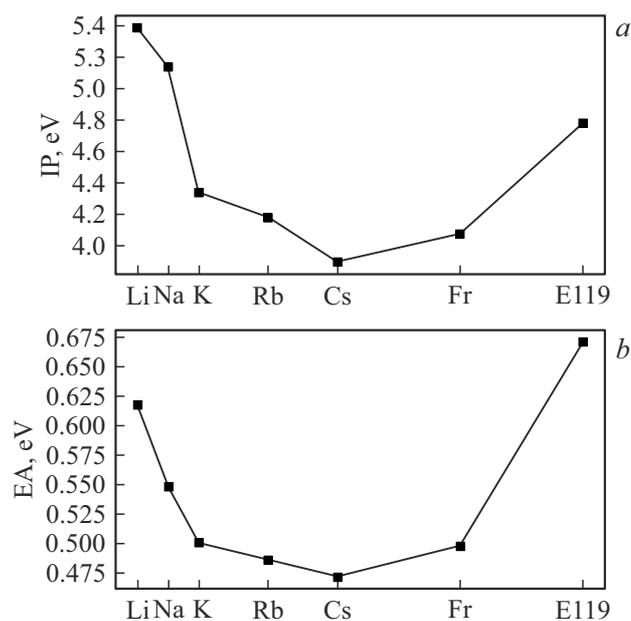
Значение вклада взаимодействия Брейта для потенциала ионизации было вычислено в работах [12,14,15] и составляет примерно $24\text{--}35\text{ см}^{-1}$, что соответствует значению гаунтовского вклада, вычисленному нами (31 см^{-1}). В работах [9,11–15,37–42] также был оценен вклад QED-эффектов для IP и EA. Значение полной QED-поправки (101 см^{-1}) к потенциалу ионизации можно сравнить с результатами, полученными в работах [9,12–15,39–42]. Данные, представленные в этих работах, заметно отличаются и находятся в интервале от 67 [14] до 152 см^{-1} [40]. Вклад квантово-электродинамических эффектов для сродства к электрону был вычислен в работе [11] и составляет 100 см^{-1} , что значительно отличается от результата, полученного нами (26 см^{-1}).

Таблица 5. Сравнение IP и EA 119-го элемента из данной работы с результатами других работ (eV). Значения, полученные нами, отделены горизонтальной чертой

Метод	IP	EA
SR-CCSD	4.717	0.595
SR-CCSD(T)	4.779	0.671
FS-CCSD	4.769	0.707
CI-DFS+MBPT [9]	4.768	0.674
FS-CCSD [10]		0.7171
ihfs-CCSD [11]		0.64870
FS-CCSD [12]	4.7829	
FS-CCSD [13]	4.7838	0.4850
CPM [15]	4.7779	

В табл. 5 приведены IP и EA, полученные в данной работе и соответствующие результаты из работ [9–13,15]. Во всех этих работах в качестве гамильтониана использовался гамильтониан Дирака–Кулона–Брейта. Из табл. 5 видно, что наши значения потенциала ионизации и сродства к электрону, вычисленные методом FS-CCSD, находятся в разумном согласии с соответствующими значениями, рассчитанными тем же методом в работах [10,12]. Небольшие различия в полученных значениях объясняются, прежде всего, использованием различных базисов, отсутствием QED-поправки для сродства к электрону в работе [10], различной величиной QED-вклада для потенциала ионизации в нашей работе и работе [12], а также учетом запаздывающей части взаимодействия Брейта в работах [10,12]. Остальные параметры расчета в нашей работе и работах [10,12] совпадают. При оптимизации гауссиан нами была учтена корреляция электронов, что является основным преимуществом нашего базисного набора. При этом наш базис ($41s37p25d22f4g4h2i$) содержит в себе меньше g -, h - и i -функций по сравнению с базисом из работы [20] ($36s32p24d22f10g7h6i$), что позволяет использовать оптимизированный нами базис в молекулярных расчетах.

Отдельно стоит отметить результаты работы [13]. Полученный там потенциал ионизации согласуется с результатами других работ в пределах 0.01 eV . Однако сродство к электрону, представленное в работе [13], отличается от остальных результатов примерно на 0.2 eV , что составляет порядка $30\text{--}40\%$ всей величины EA. В работах [10] и [13] используется один и тот же базисный набор, взятый из работы [20], для расчетов использовался один и тот же пакет программ [43], а виртуальные пространства совпадают. Заметное различие работ [10] и [13] заключается в количестве скоррелированных электронов — 50 и 28 соответственно, однако такая разница в EA не может быть объяснена этим фактором. Таким образом, для нас остается неясной



(a) Потенциалы ионизации для элементов первой группы периодической таблицы. Экспериментально полученные IP для Li–Fr взяты из [45–52]. (b) Сродство к электрону для элементов первой группы. Измеренные в эксперименте EA для Li–Cs опубликованы в [53–58], EA для Fr получено теоретически в [9].

причина такого отличия величины EA из работы [13] от остальных результатов.

Нашими лучшими результатами, представленными в данной работе, являются значения, вычисленные с помощью метода SR-CCSD(T): 4.779(10) eV для потенциала ионизации и 0.671(4) eV для сродства к электрону. Для оценки погрешности было проведено два скалярно-релятивистских расчета с использованием псевдопотенциала GRECP в программе CFOUR [44] на оптимизированном базисе и том же самом базисе с добавленными в него $6g4h3i$ -функциями, а затем вычислена разность для потенциала ионизации и сродства к электрону из двух расчетов. То есть погрешности были оценены как вклад высоких гармоник в скалярно-релятивистском расчете. Величины, вычисленные методом SR-CCSD(T), несколько отличаются от значений, полученных в рамках FS-CCSD. Особенно заметно использование подхода SR-CCSD(T) сказывается на значении сродства к электрону, приближая его к значениям работы [9]. Также благодаря односсылочному подходу мы можем оценить пертурбативный вклад трехкратных возбуждений: он составляет около 0.06 eV для IP и 0.08 eV для EA.

При изучении свойств сверхтяжелых элементов значительный интерес представляет сравнение результатов с характеристиками их более легких гомологов. На рисунке представлены зависимости IP и EA щелочных металлов от заряда их ядер. Величины IP и EA уменьшаются вплоть до цезия включительно, а затем начинают расти. Такое поведение связано с релятивистскими

эффектами, которые возникают из-за контракции s - и p -оболочек. Так, в нерелятивистском пределе эти зависимости монотонно убывают, что показано, например, в работе [9].

Заключение

В данной работе был оптимизирован базисный набор гауссиан для сверхтяжелого элемента с зарядом ядра $Z = 119$. Используя полученный базис, были рассчитаны потенциал ионизации и сродство к электрону этого элемента. Расчеты проводились в пакетах программ DIRAC [22,23] и EXP-T [24,25] методом SR-CC с учетом однократных, двукратных и пертурбативных трехкратных возбуждений и методом FS-CC с учетом однократных и двукратных возбуждений. Также были вычислены вклады взаимодействия Гаунта и QED-эффектов для IP и EA.

Добавление новых базисных функций внесло существенный вклад в значения IP и EA. Абсолютные изменения данных характеристик составили порядка 0.15 eV. Сравнение вычисленных значений потенциала ионизации и сродства к электрону с данными предыдущих работ показывает разумное согласие результатов. Оптимизированный нами набор гауссиан хорошо описывает три состояния E119 — нейтральный атом, катион и анион. Помимо этого, наш базисный набор существенно меньше представленных в других работах. Совокупность этих фактов позволяет использовать полученный набор не только для вычисления атомных свойств, но и для расчета молекул, содержащих 119-й элемент.

Благодарности

Мы благодарим А.В. Олейниченко и П.Д. Турченко за плодотворную дискуссию. Расчеты проводились на базе гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT (ЛИТ, ОИЯИ) [59].

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 22-62-00004, <https://rscf.ru/project/22-62-00004/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение: базис для 119-го элемента

Параметры гауссиан для каждого орбитального квантового числа λ (а.е.). Значения без звездочки (*) соответствуют параметрам экспонент, взятым из [18]. Значения с звездочкой соответствуют параметрам экспонент, оптимизированным в FS-CCSD расчете

№	λ						
	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>	<i>i</i>
1	2.92537106e+11	6.42563106e+07	6.94530747e+05	3.12565925e+04	9.841600e-01*	1.028690e+00*	8.248500e-01*
2	2.45266474e+09	2.26791996e+07	2.05423290e+05	1.55041364e+04	6.743300e-01*	7.038800e-01*	2.803300e-01*
3	6.10698516e+08	8.47630044e+06	6.76728912e+04	7.85584415e+03	4.495500e-01*	2.415500e-01*	
4	1.66834382e+08	3.34276066e+06	2.45977608e+04	4.05799545e+03	1.969100e-01*	1.319300e-01*	
5	4.97353022e+07	1.38604772e+06	9.77239832e+03	2.13273926e+03			
6	1.60921834e+07	6.02113947e+05	4.20378443e+03	1.13816590e+03			
7	5.62065186e+06	2.73061476e+05	1.93964546e+03	6.15529780e+02			
8	2.10780484e+06	1.28818151e+05	9.50946000e+02	3.36668400e+02			
9	8.44105249e+05	6.29915378e+04	4.90738240e+02	1.85865810e+02			
10	3.59034179e+05	3.18148239e+04	2.64066570e+02	1.03365260e+02			
11	1.61323810e+05	1.65376059e+04	1.46776120e+02	5.77912100e+01			
12	7.61614365e+04	8.81587038e+03	8.34804400e+01	3.24186600e+01			
13	3.75747637e+04	4.80242771e+03	4.81294000e+01	1.82099500e+01			
14	1.92678102e+04	2.66387106e+03	2.78638700e+01	1.02220200e+01			
15	1.02139547e+04	1.49925645e+03	1.60467300e+01	5.72286000e+00			
16	5.56713119e+03	8.53105330e+02	9.10657000e+00	3.18913000e+00			
17	3.10309764e+03	4.89042980e+02	5.04493000e+00	1.76542000e+00			
18	1.75928572e+03	2.81425010e+02	2.70269000e+00	9.68890000e-01			
19	1.00903159e+03	1.61995620e+02	1.38704000e+00	5.40450000e-01*			
20	5.82305770e+02	9.29442300e+01	9.56490000e-01*	3.60350000e-01*			
21	3.36299220e+02	5.29631400e+01	6.75520000e-01	1.71730000e-01*			
22	1.93321230e+02	2.98683300e+01	3.09280000e-01	7.01600000e-02*			
23	1.10017730e+02	1.66106900e+01	1.31870000e-01				
24	6.16489600e+01	9.07732000e+00	5.18700000e-02				
25	3.38313400e+01	4.85707000e+00	1.96100000e-02*				
26	1.80839600e+01	2.53566000e+00					
27	9.36482000e+00	1.28695000e+00					
28	4.67291000e+00	9.60000000e-01*					
29	3.31527000e+00*	6.32760000e-01					
30	2.23464000e+00	4.17530000e-01*					
31	1.48976000e+00*	3.00320000e-01					
32	1.01862000e+00	1.37100000e-01					
33	4.40200000e-01	9.00000000e-02*					
34	2.79070000e-01*	5.99900000e-02					
35	1.79380000e-01	4.00000000e-02*					
36	1.03000000e-01*	1.48700000e-02*					
37	6.85500000e-02						
38	2.44400000e-02						
39	1.03300000e-02*						
40	6.27000000e-03*						
41	3.03000000e-03*						

Список литературы

- [1] Y.T. Oganessian, V.K. Utyonkov. *Rep. Prog. Phys.*, **78** (3), 036301 (2015).
- [2] Y.T. Oganessian, V.K. Utyonkov, Y.V. Lobanov, F.S. Abdullin, A.N. Polyakov, R.N. Sagaidak, I.V. Shirokovsky, Y.S. Tsyganov, A.A. Voinov, G.G. Gulbekian, S.L. Bogomolov, B.N. Gikal, A.N. Mezentsev, S. Iiev, V.G. Subbotin, A.M. Sukhov, K. Subotic, V.I. Zagrebaev, G.K. Vostokin, M.G. Itkis, K.J. Moody, J.B. Patin, D.A. Shaughnessy, M.A. Stoyer, N.J. Stoyer, P.A. Wilk, J.M. Kenneally, J.H. Landrum, J.F. Wild, R.W. Loughheed. *Phys. Rev. C*, **74** (4), 044602 (2006).
- [3] J. Khuyagbaatar, A. Yakushev, C.E. Dullmann, D. Ackermann, L.L. Andersson, M. Asai, M. Block, R.A. Boll, H. Brand, D.M. Cox, M. Dasgupta, X. Derckx, A. Di Nitto, K. Eberhardt, J. Even, M. Evers, C. Fahlander, U. Forsberg, J.M. Gates, N. Gharibyan, P. Golubev, K.E. Gregorich, J.H. Hamilton, W. Hartmann, R.D. Herzberg, F.P. Heßberger, D.J. Hinde, J. Hoffmann, R. Hollinger, A. Hübner, E. Jäger, B. Kindler, J.V. Kratz, J. Krier, N. Kurz, M. Laatiaoui, S. Lahiri, R. Lang, B. Lommel, M. Maiti, K. Miernik, S. Minami, A.K. Mistry, C. Mokry, H. Nitsche, J.P. Omtvedt, G.K. Pang, P. Papadakis, D. Renisch, J.B. Roberto, D. Rudolph, J. Runke, K.P. Rykaczewski, L.G. Sarmiento, M. Schädel, B. Schausten, A. Semchenkov, D.A. Shaughnessy, P. Steinegger, J. Steiner, E.E. Tereshatov, P. Thörle-Pospiech, K. Tinschert, T. Torres De Heidenreich, N. Trautmann, A. Türler, J. Uusitalo, M. Wegrzecki, N. Wiehl, S.M. Van Cleve, V. Yakusheva. *Phys. Rev. C*, **102** (6), 064602 (2020).
- [4] H. Sakai, H. Haba, K. Morimoto, N. Sakamoto. *Eur. Phys. J. A*, **58** (12), 238 (2022).
- [5] Y.T. Oganessian, V.K. Utyonkov, N.D. Kovrizhnykh, F.S. Abdullin, S.N. Dmitriev, D. Ibadullayev, M.G. Itkis, D.A. Kuznetsov, O.V. Petrushkin, A.V. Podshibiakin, A.N. Polyakov, A.G. Popeko, R.N. Sagaidak, L. Schlattauer, I.V. Shirokovski, V.D. Shubin, M.V. Shumeiko, D.I. Solovyev, Y.S. Tsyganov, A.A. Voinov, V.G. Subbotin, A.Y. Bodrov, A.V. Sabel'nikov, A.V. Khalkin, V.B. Zlokazov, K.P. Rykaczewski, T.T. King, J.B. Roberto, N.T. Brewer, R.K. Grzywacz, Z.G. Gan, Z.Y. Zhang, M.H. Huang, H.B. Yang. *Phys. Rev. C*, **106** (3), L031301 (2022).
- [6] Z. Gan, W. Huang, Z. Zhang, X. Zhou, H. Xu. *Eur. Phys. J. A*, **58** (8), 158 (2022).
- [7] E. Eliav, U. Kaldor, Y. Ishikawa, P. Pyykkö. *Phys. Rev. Lett.*, **77** (27), 5350 (1996).
- [8] E. Eliav, S. Fritzsche, U. Kaldor. *Nucl. Phys. A*, **944**, 518 (2015).
- [9] И.И. Тупицын, А.В. Малышев, Д.А. Глазов, М.Ю. Кайгородов, Ю.С. Кожедуб, И.М. Савельев, В.М. Шабаев. *Опт. и спектр.*, **129** (7), 841 (2021). [I.I. Tupitsyn, A.V. Malyshev, D.A. Glazov, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, I.M. Savelyev, V.M. Shabaev. *Opt. Spectrosc.*, **129** (9), 1038–1044 (2021)].
- [10] A. Landau, E. Eliav, Y. Ishikawa, U. Kaldor. *J. Chem. Phys.*, **115** (6), 2389 (2001).
- [11] E. Eliav, M.J. Vilkas, Y. Ishikawa, U. Kaldor. *J. Chem. Phys.*, **122** (22), 224113 (2005).
- [12] E. Eliav, M.J. Vilkas, Y. Ishikawa, U. Kaldor. *Chem. Phys.*, **311** (1–2), 163 (2005).
- [13] T. Hangele, M. Dolg, P. Schwerdtfeger. *J. Chem. Phys.*, **138** (17), 174113 (2013).
- [14] T.H. Dinh, V.A. Dzuba, V.V. Flambaum, J.S.M. Ginges. *Phys. Rev. A*, **78** (2), 022507 (2008).
- [15] V.A. Dzuba. *Phys. Rev. A*, **88** (4), 042516 (2013).
- [16] A. Borschevsky, V. Pershina, E. Eliav, U. Kaldor. *J. Chem. Phys.*, **138** (12), 124302 (2013).
- [17] C. Thierfelder, P. Schwerdtfeger, A. Koers, A. Borschevsky, B. Fricke. *Phys. Rev. A*, **80** (2), 022501 (2009).
- [18] P.S. Miranda, A.P.S. Mendes, J.S. Gomes, C.N. Alves, A.R. de Souza, J.R. Sambrano, R. Gargano, L.G.M. de Macedo. *J. Braz. Chem. Soc.*, **23**, 1104 (2012).
- [19] J. Mohallem, R. Dreizler, M. Trsic. *Int. J. Quantum Chem.*, **30** (S20), 45 (1986).
- [20] G.L. Malli, A. Da Silva, Y. Ishikawa. *Phys. Rev. A*, **47** (1), 143 (1993).
- [21] R.L. Haiduke, L.G. de Macedo, R.C. Barbosa, A.B. da Silva. *J. Comput. Chem.*, **25** (15), 1904 (2004).
- [22] DIRAC, a relativistic ab initio electronic structure program, Release DIRAC19 (2019), written by A.S.P. Gomes, T. Saue, L. Visscher, H.J. Aa. Jensen, R. Bast, with contributions from I.A. Aucar, V. Bakken, K.G. Dyall, S. Dubillard, U. Ekström, E. Eliav, T. Enevoldsen, E. Faßhauer, T. Fleig, O. Fossgaard, L. Halbert, E.D. Hedegård, B. Heimlich-Paris, T. Helgaker, J. Henriksson, M. Iliáš, Ch.R. Jacob, S. Knecht, S. Komorovský, O. Kullie, J.K. Laerdahl, C.V. Larsen, Y.S. Lee, H.S. Nataraj, M.K. Nayak, P. Norman, G. Olejniczak, J. Olsen, J.M.H. Olsen, Y.C. Park, J.K. Pedersen, M. Pernpointner, R. di Remigio, K. Ruud, P. Salek, B. Schimmelpfennig, B. Senjean, A. Shee, J. Sikkema, A.J. Thorvaldsen, J. Thyssen, J. van Stralen, M.L. Vidal, S. Villaume, O. Visser, T. Winther, S. Yamamoto (available at <http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.3572669>, see also <http://www.diracprogram.org>).
- [23] 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. Iliáš, 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** (20), 204104 (2020).
- [24] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav EXP-T, An Extensible Code for Fock Space Relativistic Coupled Cluster Calculations <http://www.qchem.pnpi.spb.ru/expt>.
- [25] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav. In: *Supercomputing*, ed. by V. Voevodin, S. Sobolev (Springer International Publishing, Cham, 2020), pp. 375–386.
- [26] E. Eliav, A. Borschevsky, A. Zaitsevskii, A.V. Oleynichenko, U. Kaldor. In: *Comprehensive Computational Chemistry*, ed. by M. Yáñez, R.J. Boyd (Elsevier, Oxford, 2024), vol. 3, pp. 79–93.
- [27] A.V. Titov, N.S. Mosyagin. *Int. J. Quant. Chem.*, **71** (5), 359 (1999).
- [28] N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, A.V. Titov. *Int. J. Quantum Chem.*, **120** (2), e26076 (2020).
- [29] L. Visscher, K.G. Dyall. *At. Data Nucl. Data Tables*, **67** (2), 207 (1997).
- [30] J. Sikkema, L. Visscher, T. Saue, M. Iliáš. *J. Chem. Phys.*, **131** (12), 124116 (2009).
- [31] W. Kutzelnigg, W. Liu. *J. Chem. Phys.*, **123** (24), 241102 (2005).
- [32] M. Iliáš, T. Saue. *J. Chem. Phys.*, **126** (6), 064102 (2007).
- [33] I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev, J.R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, J. Ullrich. *Phys. Rev. A*, **68** (2), 022511 (2003).
- [34] I.I. Tupitsyn, A.V. Volotka, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, G. Plunien, J.R. Crespo López-Urrutia, A. Lapierre, J. Ullrich. *Phys. Rev. A*, **72** (6), 062503 (2005).

- [35] M. Kaygorodov, L. Skripnikov, I. Tupitsyn, E. Eliav, Y. Kozhedub, A. Malyshev, A. Oleynichenko, V. Shabaev, A. Titov, A. Zaitsevskii. *Phys. Rev. A*, **104** (1), 012819 (2021).
- [36] N. Mosyagin, E. Eliav, A. Titov, U. Kaldor. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **33** (4), 667 (2000).
- [37] J.S.M. Ginges, J.C. Berengut. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **49** (9), 095001 (2016).
- [38] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Phys. Rev. A*, **88** (1), 012513 (2013).
- [39] P. Pyykkö, M. Tokman, L.N. Labzowsky. *Phys. Rev. A*, **57** (2), R689 (1998).
- [40] L.N. Labzowsky, I.A. Goidenko, M. Tokman, P. Pyykkö. *Phys. Rev. A*, **59** (4), 2707 (1999).
- [41] P. Pyykkö, L.B. Zhao. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **36** (8), 1469 (2003).
- [42] J. Sapirstein, K.T. Cheng. *Phys. Rev. A*, **66** (4), 042501 (2002).
- [43] A. Landau, E. Eliav, U. Kaldor. *Chem. Phys. Lett.*, **313** (1–2), 399 (1999).
- [44] J.F. Stanton, J. Gauss, L. Cheng, M.E. Harding, D.A. Matthews, P.G. Szalay with contributions from A. Asthana, A.A. Auer, R.J. Bartlett, U. Benedikt, C. Berger, D.E. Bernholdt, S. Blaschke, Y.J. Bomble, S. Burger, O. Christiansen, D. Datta, F. Engel, R. Faber, J. Greiner, M. Heckert, O. Heun, M. Hilgenberg, C. Huber, T.-C. Jagau, D. Jonsson, J. Jusélius, T. Kirsch, M.-P. Kitsaras, K. Klein, G.M. Kopper, W.J. Lauderdale, F. Lipparini, J. Liu, T. Metzroth, L. Monzel, L.A. Mück, D.P. O'Neill, T. Nottoli, J. Oswald, D.R. Price, E. Prochnow, C. Puzzarini, K. Ruud, F. Schiffmann, W. Schwalbach, C. Simmons, S. Stopkowicz, A. Tajti, T. Uhlřřová, J. Vázquez, F. Wang, J.D. Watts, P. Yergün. C. Zhang, X. Zheng, and the integral packages MOLECULE (J. Almlöf and P.R. Taylor), PROPS (P.R. Taylor), ABACUS (T. Helgaker, H.J. Aa. Jensen, P. Jørgensen, and J. Olsen), and ECP routines by A.V. Mitin and C. van Wüllen. CFOUR, Coupled-Cluster techniques for Computational Chemistry, a quantum-chemical program package. For the current version, see <http://www.cfour.de>.
- [45] I. Johansson. *Ark. Fys.*, **15** (2), 169 (1959).
- [46] M. Ciocca, C. Burkhardt, J. Leventhal, T. Bergeman. *Phys. Rev. A*, **45** (7), 4720 (1992).
- [47] J. Baugh, C. Burkhardt, J. Leventhal, T. Bergeman. *Phys. Rev. A*, **58** (2), 1585 (1998).
- [48] C.J. Lorenzen, K. Niemax, L. Pendrill. *Opt. Commun.*, **39** (6), 370 (1981).
- [49] C. Lorenzen, K. Niemax. *Phys. Scr.*, **27** (4), 300 (1983).
- [50] I. Johansson. *Ark. Fys.*, **20** (1–2), 135 (1961).
- [51] J. Deiglmayr, H. Herburger, H. Saßmannshausen, P. Jansen, H. Schmutz, F. Merkt. *Phys. Rev. A*, **93** (1), 013424 (2016).
- [52] E. Arnold, W. Borchers, H.T. Duong, P. Juncar, J. Lerme, P. Lievens, W. Neu, R. Neugart, M. Pellarin, J. Pinard, J.L. Vialle, K. Wendt, ISOLDE. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **23** (20), 3511 (1990).
- [53] J. Dellwo, Y. Liu, D. Pegg, G. Alton. *Phys. Rev. A*, **45** (3), 1544 (1992).
- [54] H. Hotop, W.C. Lineberger. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **4** (3), 539 (1975).
- [55] J. Slater, F. Read, S. Novick, W. Lineberger. *Phys. Rev. A*, **17** (1), 201 (1978).
- [56] K.T. Andersson, J. Sandström, I.Y. Kiyani, D. Hanstorp, D.J. Pegg. *Phys. Rev. A*, **62** (2), 022503 (2000).
- [57] P. Frey, F. Breyer, H. Holop. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **11** (19), L589 (1978).
- [58] M. Scheer, J. Thøgersen, R. Bilodeau, C. Brodie, H. Haugen, H. Andersen, P. Kristensen, T. Andersen. *Phys. Rev. Lett.*, **80** (4), 684 (1998).
- [59] G. Adam, M. Bashashin, D. Belyakov, M. Kirakosyan, M. Matveev, D. Podgainy, T. Sapozhnikova, O. Streltsova, S. Torosyan, M. Vala, L. Valova, A. Vorontsov, T. Zaikana, E. Zemlyanaya, M. Zuev. In: *Selected Papers of the 8th International Conference „Distributed Computing and Gridtechnologies in Science and Education“* (GRID, 2018), p. 638–644, 2018.