

01

Вычисление зеемановского и сверхтонкого расщепления при помощи конечного базисного набора из гауссиан

© В.К. Иванов¹, Д.А. Глазов^{1,2}, А.В. Волотка¹

¹ Университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ „Курчатовский институт“ — ПИЯФ,
Гатчина, Россия

e-mail: vladislav.ivanov@metalab.ifmo.ru

Поступила в редакцию 30.10.2025 г.

В окончательной редакции 28.11.2025 г.

Принята к публикации 06.12.2025 г.

Рассмотрено применение конечного базисного набора из гауссиан для вычисления зеемановского и сверхтонкого расщепления в водородоподобных ионах. Проведено вычисление g -фактора и релятивистского фактора для сверхтонкого расщепления. Также вычисления проведены для эффектов второго порядка по магнитному взаимодействию, а именно рассмотрены квадратичный эффект Зеемана и ядерное магнитное экранирование. Полученные результаты сопоставлены с аналогичными вычислениями с помощью базиса из В-сплайнов в случае моделей ядра с конечным размером и с аналитическими формулами для точечной модели.

Ключевые слова: зеемановское расщепление, сверхтонкое расщепление, конечный базисный набор, многозарядные ионы.

DOI: 10.61011/OS.2026.01.62608.8718-25

Введение

Исследование различных физических эффектов в многозарядных ионах является активной областью в атомной физике и квантовой электродинамике. Это связано с тем, что в таких системах электрическое поле ядра является достаточно сильным, чтобы становился важным учет вкладов от высших порядков по взаимодействию с полем ядра. С другой стороны, небольшое количество (для водородоподобных ионов — один) электронов в таких ионах позволяет производить расчеты для таких систем с очень высокой точностью. В то же время эксперименты с подобными ионами позволяют получать прецизионные результаты [1–3], так, эксперименты по определению g -фактора в многозарядных ионах предлагают точный способ определения физических величин и констант [4], таких как масса электрона [5]. Помимо измерения g -фактора, существующие эксперименты позволяют наблюдать также и нелинейные эффекты, связанные с магнитным взаимодействием, такие как квадратичный и третьего порядка эффекты Зеемана [6]. С точки зрения теории эти эффекты рассмотрены, например, в [7]. С другой стороны, интерес представляет изучение сверхтонкого расщепления, так как этот эффект сильно зависит от распределения заряда ядра. Изучение этого эффекта позволяет уточнять модели ядерных потенциалов. Эффект ядерного магнитного экранирования в многозарядных ионах подробно рассмотрен, например, в работах [8–10].

Для точного вычисления g -фактора и квадратичного эффекта Зеемана, как хорошо известно, необходимо учи-

тывать петлевые квантовоэлектродинамические (КЭД) поправки [11–15]. В работе [5] для случая многозарядных ионов приводится сравнение КЭД вкладов с остальными физическими вкладами в величину g -фактора. Для водородоподобных ионов различные поправки в g -фактор и квадратичный эффект Зеемана были подробно рассмотрены в [15]. Для точного вычисления сверхтонкого расщепления и ядерного магнитного экранирования учет подобных вкладов также оказывается важным [16–18]. Хотя для многих атомных и КЭД вычислений успешно применяется конечный базис из В-сплайнов [19,20], существует интерес и в использовании других базисных наборов. В частности, для вычисления многопотенциального вклада от поляризации вакуума В-сплайны успешно не применялись. В недавних работах был использован базис из гауссиан для вычисления КЭД поправок. В работах [21,22] с помощью этого базиса была вычислена поправка от поляризации вакуума во всех порядках по взаимодействию с полем ядра, а в работе [23] была посчитана поправка от собственной энергии электрона.

Недавние успехи в применении базиса из гауссиан для вычисления КЭД поправок, особенно поляризации вакуума, открывают дорогу к использованию этого базиса и для вычисления более сложных КЭД диаграмм, включающих магнитное взаимодействие. Так, при вычислении диаграмм для КЭД поправок к g -фактору возникают матричные элементы, аналогичные тем, которые возникают при вычислении самого g -фактора, поэтому представляет интерес изучение применимости базиса из

гауссиан к вычислению последнего. Интерес в работах [21–23] к базису из гауссиан, а не к родственным им слэтеровским функциям, обусловлен тем, что внимание в первую очередь было уделено тяжелым ионам, в которых необходимо учитывать конечный размер ядра. Для таких систем хорошо подходит базис из гауссиан [24]. Кроме атомных КЭД расчетов, этот базис удобен в молекулярных вычислениях, где особый интерес может представлять дальнейшее применение для квазимолекул. Также базис из гауссиан широко используется в квантовой химии, где также можно учитывать влияние внешних полей.

Одной из сложностей, связанных с использованием базиса из гауссиан (и вообще базисов подобного вида, таких как слэтеровские функции), является так называемая численная линейная зависимость, которая накладывает ограничение сверху на количество функций в конечном базисном наборе при заданной арифметической точности вычислений. Тем не менее современные ЭВМ позволяют обходить эту проблему с помощью арифметики с произвольной точностью. Например, в работах [21,22] такой подход был применен для вычисления поляризации вакуума, а в работе [25] было решено уравнение Дирака для двухатомной молекулы с высокой точностью.

В данной работе мы рассматриваем вычисление g -фактора и квадратичного эффекта Зеемана, сверхтонкого расщепления, а также константы ядерного магнитного экранирования. Полученные результаты мы сравниваем с соответствующими аналитическими выражениями в случае точечного ядра и с вычислениями с помощью базиса из В-сплайнов с примененным дуальным кинетическим балансом [26] в случае моделей ядра с конечным размером.

Мы используем релятивистскую систему единиц $\hbar = c = m_e = 1$. Постоянная тонкой структуры определена как $\alpha = e^2/(4\pi)$, $e < 0$.

Базисный набор

В данной работе рассматриваются эффекты в водородоподобных ионах. Подобный ион можно считать центрально-симметричной релятивистской системой, которая описывается уравнением Дирака:

$$h_D \phi_n(x) = E_n \phi_n(x),$$

где

$$h_D = -i\alpha\nabla + \beta + V(x),$$

$$\beta = \gamma^0,$$

$$\alpha = \gamma^0\gamma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix},$$

а γ и σ — матрицы Дирака и Паули соответственно. В случае центральной симметрии волновая функция

электрона факторизуется следующим образом:

$$\phi_{n,\kappa,m_j}(x) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n,\kappa}(r)\Omega_{\kappa,m_j}(\theta, \varphi) \\ iQ_{n,\kappa}(r)\Omega_{-\kappa,m_j}(\theta, \varphi) \end{bmatrix},$$

где P, Q — большая и малая компоненты волновой функции электрона, $\Omega_{\kappa,m_j}(\theta, \varphi)$ — сферический спинор, κ — релятивистское квантовое число, связанное с орбитальным угловым моментом соотношением $l = |\kappa + \frac{1}{2}| - \frac{1}{2}$, m_j — проекция полного углового момента. Для радиальных компонент волновой функции получается отдельное уравнение, которое иногда называют радиальным уравнением Дирака:

$$\begin{bmatrix} 1 + V & -\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} & -1 + V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{n,\kappa} \\ Q_{n,\kappa} \end{bmatrix} = E_{n,\kappa} \begin{bmatrix} P_{n,\kappa} \\ Q_{n,\kappa} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Метод конечного базисного набора для решения уравнения (1) основан на приближении радиальных компонент волновой функции конечной суммой функций из некоторого заданного набора:

$$P_{n,\kappa}(r) = \sum_{i=1}^n p_{n\kappa,i} \pi_i^L(r),$$

$$Q_{n,\kappa}(r) = \sum_{i=1}^n q_{n\kappa,i} \pi_i^S(r),$$

где $p_{n\kappa,i}, q_{n\kappa,i}$ — неизвестные коэффициенты. Метод конечного базисного набора для решения атомных задач описан во многих работах, например, применение для уравнения Шрёдингера показано в [20], для уравнения Дирака — в [19] (см. также обзор [24] и нашу работу [22]).

Базис из гауссиан составляется из набора экспонент с набором коэффициентов ξ_i , порождающим этот базисный набор. При этом в каждой базисной функции выделяется общая асимптотика при $r \rightarrow 0$. Для задачи с точечным ядром с зарядовым числом Z базисные функции определяются как

$$\pi_i^\tau = n r^\gamma e^{-\xi_i r^2}, \quad (2)$$

где введено символическое обозначение $\tau = L, S$ для большой и малой компонент волновой функции электрона соответственно, $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$, n — нормировочный множитель. В случае конечного ядра асимптотика при $r \rightarrow 0$ принимает другой вид [27] и для функций базиса из гауссиан получается следующее выражение:

$$\pi_i^\tau = n r^{l_\tau} e^{-\xi_i r^2}, \quad (3)$$

где введены обозначения

$$l_L = \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| + \frac{1}{2}, \quad l_S = \left| \kappa - \frac{1}{2} \right| + \frac{1}{2}.$$

Магнитное взаимодействие

Рассмотрим взаимодействие релятивистского электрона, находящегося в поле ядра, с внешним однородным магнитным полем по теории возмущений:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots$$

Нулевому порядку отвечает энергия электрона в поле ядра иона в отсутствие магнитного поля. Для случая точечного (кулоновского) потенциала ядра мы имеем следующую формулу:

$$E_{n,\kappa} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - |\kappa| + \gamma}\right)^2}}. \quad (4)$$

Для первого порядка по взаимодействию с магнитным полем получаем

$$E^{(1)} = \frac{|e|}{2} B \langle a | U | a \rangle,$$

где B — напряженность магнитного поля, а

$$U = (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha})_z$$

— оператор взаимодействия с магнитным полем. Для g -фактора вводится следующее определение:

$$E^{(1)} = \frac{|e|}{2} B g^{(1)} m_J. \quad (5)$$

В случае точечного ядра для $g^{(1)}$ существует аналитическое выражение:

$$g^{(1)} = \frac{\kappa}{\kappa^2 - 1/4} \left(\kappa E_{n,\kappa} - \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Для второго порядка по взаимодействию с магнитным полем (квадратичный эффект Зеемана) получаем

$$E^{(2)} = \left(\frac{|e|}{2} B \right)^2 g^{(2)}(m_J),$$

где

$$g^{(2)} = \sum_{n \neq a} \frac{\langle a | U | n \rangle \langle n | U | a \rangle}{\varepsilon_a - \varepsilon_n}. \quad (7)$$

Аналогичным образом вводятся поправки следующих порядков. Выражения для поправок третьего порядка смотри, например, в [7].

Другим оператором, часто рассматриваемым в атомных вычислениях, является оператор сверхтонкого взаимодействия [9], отвечающий взаимодействию электрона с ядром в дипольном приближении:

$$V_{\text{hfs}} = \frac{(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha})_z}{r^3}.$$

В выражение для сверхтонкого расщепления уровней входит релятивистский фактор $A(Z\alpha)$, который определяется в случае основного состояния электрона как [28]

$$2(Z\alpha)^3 A(Z\alpha) = \langle 1, -1 | V_{\text{hfs}} | 1, -1 \rangle. \quad (8)$$

В случае точечной модели ядра для фактора $A(Z\alpha)$ существует аналитическое выражение:

$$A(Z\alpha) = \frac{n^3(2l+1)\kappa(2\kappa(\gamma+n_r) - N_{n,\kappa})}{N_{n,\kappa}^4 \gamma(4\gamma^2 - 1)}, \quad (9)$$

где $n_r = n - |\kappa|$ — радиальное квантовое число, а

$$N_{n,\kappa} = \sqrt{n_r^2 + 2n_r\gamma + \kappa^2}.$$

Далее рассмотрим поправку от сверхтонкого расщепления к g -фактору. Связанная с этим эффектом величина ядерного магнитного экранирования определяется следующим образом [9,29]:

$$\sigma_0 = \alpha \sum_{n \neq a} \frac{\langle a | U | n \rangle \langle n | V_{\text{hfs}} | a \rangle}{\varepsilon_a - \varepsilon_n}. \quad (10)$$

Удобно ввести следующее определение: $\sigma_0 = \alpha(Z\alpha)S(Z\alpha)/3$ [9]; для точечного потенциала водородоподобного иона и основного состояния электрона величина $S(Z\alpha)$ имеет вид:

$$S(Z\alpha) = \frac{2}{3} \left[\frac{2 + \gamma_1}{3(1 + \gamma_1)} + \frac{2}{\gamma_1(2\gamma_1 - 1)} \left(1 - \frac{\gamma_1}{2} + (Z\alpha)^2 \right) \right], \quad (11)$$

где $\gamma_1 = \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$.

Результаты

Мы использовали базис из гауссиан (Gaussian, выражения (2) и (3)) с арифметикой произвольной точности (50 знаков). Результаты мы сравниваем с аналитическими формулами и с результатами, полученными нами с помощью В-сплайнов с дуальным кинетическим балансом (DKB BS) [26]. Количество базисных функций в обоих базисных наборах выбрано равным 100. Базисный набор из гауссиан выбран так, чтобы значения параметров ξ_i образовывали геометрическую прогрессию. Для вычисления энергетического спектра, g -фактора и квадратичного эффекта Зеемана были выбраны следующие параметры (первый и последний коэффициент ξ_1 и ξ_n в ряде) базисного набора: $\xi_1 = (Z\alpha)^2 \cdot 10^{-7}$, $\xi_n = (Z\alpha)^2 \cdot 10^6$, для вычисления сверхтонкого расщепления и ядерного магнитного экранирования — $\xi_1 = (Z\alpha)^2 \cdot 10^{-4}$, $\xi_n = (Z\alpha)^2 \cdot 10^{11}$. В качестве моделей потенциала ядра $V(r)$ выбраны точечная модель (point nucleus), модель заряженной оболочки (shell nucleus) и однородно заряженного шара (sphere nucleus). Для постоянной тонкой структуры использовалось значение $\alpha = 1/137.035999177$.

В табл. 1 приведены уровни энергии электрона в водородоподобном ионе. Для точечного ядра приведено полное значение энергии, а для конечных моделей приведена поправка к энергии от учета конечного размера

Таблица 1. Энергия $E_{лк}$ электрона в водородоподобном олове и поправка на конечный размер ядра E_{fms} , $Z = 50$, $r_n = 4.6519$ fm

Уровень	$E_{лк}$, point nucleus		$E_{fms} \cdot 10^6$, shell nucleus		$E_{fms} \cdot 10^6$, sphere nucleus	
	Eq. (4)	Gaussian	DKB BS	Gaussian	DKB BS	Gaussian
$1s_{1/2}$	0.931 059 404 06	0.931 059 404 06	3.838 54	3.838 61	3.831 52	3.831 59
$2s_{1/2}$	0.982 613 709 46	0.982 613 709 46	0.540 40	0.540 42	0.539 41	0.539 43
$2p_{1/2}$	0.982 613 709 46	0.982 613 709 46	0.014 62	0.014 64	0.014 59	0.014 61
$2p_{3/2}$	0.983 218 136 26	0.983 218 136 26	0.0	0.0	0.0	0.0
$3s_{1/2}$	0.992 340 868 29	0.992 340 868 29	0.161 12	0.161 13	0.160 82	0.160 83
$3p_{1/2}$	0.992 340 868 29	0.992 340 868 29	0.005 15	0.005 16	0.005 14	0.005 15
$3p_{3/2}$	0.992 520 428 00	0.992 520 428 00	0.0	0.0	0.0	0.0
$3d_{3/2}$	0.992 520 428 00	0.992 520 428 00	0.0	0.0	0.0	0.0
$3d_{5/2}$	0.992 576 423 81	0.992 576 423 81	0.0	0.0	0.0	0.0

Таблица 2. Значения g -фактора, $g^{(1)}$, полученные для основного состояния $1s_{1/2}$ электрона в различных водородоподобных ионах

Z	Shell nucleus			Shere nucleus		Point nucleus	
	r_n (fm)	DKB BS	Gaussian	DKB BS	Gaussian	Eq. (6)	Gaussian
1	0.8783	1.999 964 499	1.999 964 499	1.999 964 499	1.999 964 499	1.999 964 499	1.999 964 499
6	2.4702	1.998 721 355	1.998 721 355	1.998 721 355	1.998 721 355	1.998 721 354	1.998 721 354
14	3.1224	1.993 023 592	1.993 023 592	1.993 023 592	1.993 023 592	1.993 023 572	1.993 023 572
20	3.4776	1.985 723 317	1.985 723 317	1.985 723 317	1.985 723 317	1.985 723 204	1.985 723 204
32	4.0742	1.963 138 744	1.963 138 744	1.963 138 743	1.963 138 743	1.963 137 509	1.963 137 509
50	4.6519	1.908 093 815	1.908 093 815	1.908 093 787	1.908 093 787	1.908 079 205	1.908 079 205
54	4.7859	1.892 138 210	1.892 138 210	1.892 138 159	1.892 138 159	1.892 114 649	1.892 114 649
82	5.5012	1.735 402 718	1.735 402 718	1.735 400 822	1.735 400 822	1.734 947 023	1.734 947 023
92	5.8571	1.656 128 812	1.656 128 812	1.656 122 675	1.656 122 675	1.654 846 170	1.654 846 170

Таблица 3. Вычисления квадратичного эффекта Зеемана, выраженные в терминах $g^{(2)}$, полученные для основного состояния $1s_{1/2}$ электрона для различных водородоподобных ионов

Z	Shell nucleus		Sphere nucleus		Point nucleus
	DKB BS	Gaussian	DKB BS	Gaussian	Gaussian
1	18 777.532	18 777.532	18 777.532	18 777.532	18 777.532
6	520.302 27	520.302 27	520.302 27	520.302 27	520.302 17
14	94.479 364	94.479 364	94.479 364	94.479 364	94.479 193
20	45.618 125	45.618 125	45.618 125	45.618 125	45.617 898
32	17.016 251	17.016 251	17.016 251	17.016 251	17.015 875
50	6.204 866	6.204 866	6.204 865	6.204 865	6.204 132
54	5.137 824	5.137 824	5.137 822	5.137 822	5.136 959
82	1.535 204	1.535 204	1.535 192	1.535 192	1.532 279
92	0.983 797	0.983 797	0.983 773	0.983 773	0.978 853

ядра. В табл. 2 и 3 приведены результаты вычисления g -фактора $g^{(1)}$, формула (6), и квадратичного эффекта Зеемана, выраженного в терминах $g^{(2)}$, формула (7), для основного состояния электрона $1s_{1/2}$ ($\kappa = -1$, $n = 1$, $m_J = 1/2$). В табл. 2 приведены среднеквадратичные значения радиуса r_n для распределения плотности заряда ядра. В последующих таблицах 2–5 используются те же значения r_n для соответствующих ионов. Для всех ионов и моделей ядра наблюдается полное согласие

результатов вычислений с помощью конечного базисного набора из гауссиан и с помощью В-сплайнов или формулы (6).

В табл. 4 приведены результаты вычисления релятивистского фактора $A(Z\alpha)$ для поправки сверхтонкого расщепления для основного состояния электрона, (8). Как и в случае g -фактора, представленные значения показывают хорошее согласие между результатами вычислений с гауссианами и вычислений с В-сплайнами и формулой (9). Для вычисления константы ядерного магнитного экранирования, формула (10), в терминах $S(Z\alpha)$, результаты представлены в табл. 5.

Заключение

Мы рассмотрели применение конечного базисного набора из гауссиан для вычисления поправок в спектр водородоподобных ионов от зеемановского и сверхтонкого расщепления. Результаты получены до второго порядка по магнитному взаимодействию. Проведены вычисления g -фактора, квадратичного эффекта Зеемана, релятивистского фактора для сверхтонкого расщепления и величины ядерного магнитного экранирования. Также был вычислен энергетический спектр электрона в водородоподобном ионе. Вычисления проведены для точечного ядра и для двух моделей ядра с конечным размером.

Таблица 4. Релятивистский множитель A для сверхтонкого расщепления, вычисленный для состояния $1s_{1/2}$ электрона для различных водородоподобных ионов

Z	Shell nucleus		Sphere nucleus		Point nucleus	
	DKB BS	Gaussian	DKB BS	Gaussian	Eq. (9)	Gaussian
1	1.000 047	1.000 047	1.000 048	1.000 048	1.000 080	1.000 080
6	1.002 312	1.002 312	1.002 330	1.002 330	1.002 883	1.002 883
14	1.014 076	1.014 076	1.014 132	1.014 132	1.015 891	1.015 891
20	1.029 796	1.029 796	1.029 892	1.029 892	1.032 944	1.032 944
32	1.081 077	1.081 077	1.081 299	1.081 299	1.088 627	1.088 627
50	1.222 451	1.222 452	1.223 062	1.223 062	1.245 821	1.245 821
54	1.267 875	1.267 876	1.268 639	1.268 639	1.298 108	1.298 108
82	1.849 871	1.849 873	1.853 661	1.853 661	2.071 828	2.071 828
92	2.256 284	2.256 283	2.263 448	2.263 448	2.797 778	2.797 778

Таблица 5. Константа ядерного магнитного экранирования, выраженная в терминах S и вычисленная для состояния $1s_{1/2}$ электрона для различных водородоподобных ионов

Z	Shell nucleus		Sphere nucleus		Point nucleus	
	DKB BS	Gaussian	DKB BS	Gaussian	Eq. (9)	Gaussian
1	1.000 143	1.000 143	1.000 143	1.000 143	1.000 143	1.000 143
6	1.005 176	1.005 176	1.005 176	1.005 176	1.005 180	1.005 180
14	1.028 489	1.028 489	1.028 492	1.028 492	1.028 566	1.028 566
20	1.059 000	1.059 000	1.059 008	1.059 008	1.059 271	1.059 271
32	1.158 220	1.158 220	1.158 267	1.158 267	1.159 857	1.159 857
50	1.434 254	1.434 255	1.434 564	1.434 564	1.446 244	1.446 244
54	1.524 274	1.524 274	1.524 722	1.524 722	1.542 208	1.542 208
82	2.712 993	2.712 996	2.717 672	2.717 672	2.990 511	2.990 511
92	3.567 861	3.567 859	3.578 440	3.578 440	4.379 221	4.379 221

В приведенных в работе таблицах наблюдается отличное согласие между результатами, полученными с помощью базиса из гауссиан, и результатами, полученными с помощью В-сплайнов или соответствующих аналитических формул. В частности, приведенная точность позволяет увидеть степень чувствительности рассмотренных эффектов к выбору модели ядра, особенно в случае тяжелых ионов. Таким образом, было показано, что базисный набор из гауссиан может успешно применяться для вычислений поправок от магнитного взаимодействия. Это позволяет, в частности, применять этот базис для проверки результатов, полученных с помощью В-сплайнов.

Мы рассмотрели как матричные элементы первого порядка по магнитному взаимодействию, $g^{(1)}$ и A , так и второго порядка, $g^{(2)}$ и S . В последних конечный базисный набор используется для вычисления промежуточных состояний. Поскольку полученные результаты показывают отличное согласие с методом конечного базиса из В-сплайнов, то была продемонстрирована применимость базиса из гауссиан для вычисления промежуточных состояний.

В случае конечного базисного набора из гауссиан было обнаружено, что результаты мало зависят от выбора параметров базиса. Это позволяет встраивать рассмотренные поправки в более сложные диаграммы, которые в свою очередь могут быть к этим параметрам чувствительны.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания (проект FSER-2025-0012) и при поддержке фонда „Базис“ (проекты 23-1-2-52-1 и 25-1-5-126-1).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Morgner, B. Tu, C.M. König, T. Sailer, F. Heiße, H. Bekker, B. Sikora, C. Lyu, V.A. Yerokhin, Z. Harman., J.R. Crespo López-Urrutia, C.H. Keitel, S. Sturm, K. Blaum. *Nature*, **622**, 53 (2023). DOI: 10.1038/s41586-023-06453-2
- [2] J. Morgner, B. Tu, M. Moretti, C.M. König, F. Heiße, T. Sailer, V.A. Yerokhin, B. Sikora, N.S. Oreshkina, Z. Harman, C.H. Keitel, S. Sturm, K. Blaum. *Phys. Rev. Lett.*, **134**, 123201 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.123201
- [3] P. Micke, T. Leopold, S.A. King, E. Benkler, L. J. Spieß, L. Schmöger, M. Schwarz, J.R. Crespo López-Urrutia, P.O. Schmidt. *Nature*, **578**, 60 (2020). DOI: 10.1038/s41586-020-1959-8
- [4] P.J. Mohr, D.B. Newell, B.N. Taylor, E. Tiesinga. *Rev. Mod. Phys.*, **97**, 025002 (2025). DOI: 10.1103/RevModPhys.97.025002
- [5] S. Sturm, F. Köhler, J. Zatorski, A. Wagner, Z. Harman, G. Werth, W. Quint, C. Keitel, K. Blaum. *Nature*, **506** (2014). DOI: 10.1038/nature13026
- [6] D. von Lindenfels, M. Wiesel, D.A. Glazov, A.V. Volotka, M.M. Sokolov, V.M. Shabaev, G. Plunien, W. Quint, G. Birkl, A. Martin, M. Vogel. *Phys. Rev. A*, **87**, 023412 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevA.87.023412
- [7] A. Varentsova, V. Agababaev, A. Volchkova, D. Glazov, A. Volotka, V. Shabaev, G. Plunien. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **408**, 80 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.05.040
- [8] A. Volchkova, A. Varentsova, N. Zubova, V. Agababaev, D. Glazov, A. Volotka, V. Shabaev, G. Plunien. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **408**, 89 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.04.086
- [9] D.L. Moskovkin, N.S. Oreshkina, V.M. Shabaev, T. Beier, G. Plunien, W. Quint, G. Soff. *Phys. Rev. A*, **70**, 032105 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevA.70.032105
- [10] A.S. Varentsova, V.A. Agababaev, D.A. Glazov, A.M. Volchkova, A.V. Volotka, V.M. Shabaev, G. Plunien. *Phys. Rev. A*, **97**, 043402 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevA.97.043402
- [11] D.A. Glazov, A.V. Volotka, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, G. Plunien. *Phys. Rev. A*, **81**, 062112 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevA.81.062112

- [12] V.M. Shabaev, D.A. Glazov, G. Plunien, A.V. Volotka. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **44**, 031205 (2015), ISSN 0047-2689, 1529-7845. DOI: 10.1063/1.4921299
- [13] V.A. Yerokhin, K. Pachucki, M. Puchalski, C.H. Keitel, Z. Harman. *Phys. Rev. A*, **102**, 022815 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.102.022815
- [14] D.A. Glazov, D.V. Zinenko, V.A. Agababaev, A.D. Moshkin, E.V. Tryapitsyna, A.M. Volchkova, A.V. Volotka. *Atoms*, **11** (2023). DOI: 10.3390/atoms11090119
- [15] V.A. Agababaev, E.A. Prokhorchuk, D.A. Glazov, A.V. Malyshchev, V.M. Shabaev, A.V. Volotka. *Phys. Rev. A*, **112**, 032818 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.112.032818
- [16] V.A. Yerokhin, A.N. Artemyev, V.M. Shabaev, G. Plunien. *Phys. Rev. A*, **72**, 052510 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevA.72.052510
- [17] V.A. Yerokhin, K. Pachucki, Z. Harman, C.H. Keitel. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 043004 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.043004
- [18] V.A. Yerokhin, K. Pachucki, Z. Harman, C.H. Keitel. *Phys. Rev. A*, **85**, 022512 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevA.85.022512
- [19] W.R. Johnson, S.A. Blundell, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **37**, 307 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevA.37.307
- [20] J. Sapirstein, W.R. Johnson. *J. Phys. B*, **29**, 5213 (1996). DOI: 10.1088/0953-4075/29/22/005
- [21] M. Salman, T. Saue. *Phys. Rev. A*, **108**, 012808 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.108.012808
- [22] V.K. Ivanov, S.S. Baturin, D.A. Glazov, A.V. Volotka. *Phys. Rev. A*, **110**, 032815 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.032815
- [23] D. Ferenc, M. Salman, T. Saue. *Phys. Rev. A*, **111**, L040802 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.L040802
- [24] H. Quiney, I. Grant, S. Wilson. *Physica Scripta*, **36**, 460 (2006). DOI: 10.1088/0031-8949/36/3/013
- [25] H.D. Nogueira, J.-P. Karr. *Phys. Rev. A*, **107**, 042817 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.107.042817
- [26] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 130405 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.130405
- [27] I. Grant. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation* (Springer, N.Y., 2007).
- [28] V.M. Shabaev. *J. Phys. B*, **27**, 5825 (1994). DOI: 10.1088/0953-4075/27/24/006
- [29] А.М. Волчкова, Д.А. Глазов, В.М. Шабеев. *Опт. и спектр.*, **129**, 1477 (2021). DOI: 10.21883/OS.2021.12.51733.2682-21