

01

Расчеты релятивистских, корреляционных, ядерных и квантово-электродинамических поправок к энергии и потенциалу ионизации основного состояния гелиеподобных ионов

© И.И. Тупицын^{1,2,3}, С.В. Безбородов¹, А.В. Малышев¹, Д.В. Миронова^{1,3,4}, В.М. Шабает¹

¹ Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 Санкт-Петербург, Россия

² Центр перспективных исследований, Санкт-Петербургский политехнический государственный университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский институт ядерной физики (ПИЯФ), 188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

⁴ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“, 197376 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: i.tupitsyn@spbu.ru

Поступила в редакцию 12.09.2019 г.

В окончательной редакции 12.09.2019 г.

Принята к публикации 23.09.2019 г.

Выполнены нерелятивистские и релятивистские вариационные расчеты энергий и потенциалов ионизации основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$. Рассчитаны все ведущие поправки к полной энергии, в том числе вклад электронных корреляций, релятивистские и квантово-электродинамические (КЭД) поправки, а также вклады конечности размера ядра (полевой сдвиг) и конечности массы ядра (эффект отдачи). Расчеты релятивистских волновых функций были выполнены с использованием гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта (ДКБ).

Ключевые слова: гелиеподобные ионы, релятивистские расчеты, конфигурационное взаимодействие, потенциал ионизации, электронные корреляции, брейтовское взаимодействие, полевой сдвиг, эффект отдачи, КЭД поправки.

DOI: 10.21883/OS.2020.01.48834.260-19

1. Введение

Атом гелия (He) и гелиеподобные ионы стали объектом активных теоретических исследований практически с момента создания квантовой механики [1]. С теоретической точки зрения гелиеподобные ионы представляют собой простейшую многочастичную систему, которая позволяет тестировать различные методы расчетов электронной структуры атомов. На сегодняшний момент нерелятивистские расчеты энергии основного состояния ($1s^2$) атома гелия выполнены с очень высокой точностью, [2–5] и ссылки там. Релятивистские расчеты энергий и потенциалов ионизации основного состояния He- и He-подобных ионов представляют собой более сложную задачу. Различные подходы и методы были использованы в релятивистских расчетах нейтрального атома He [6–9] и He-подобных ионов [10–16].

Кроме полных энергий и потенциалов ионизации основного состояния, представляют интерес также отдельные вклады, т.е. значения релятивистских, корреляционных, КЭД поправок, а также поправки на конечный размер ядра и конечную массу ядра (эффект отдачи). В данной работе все перечисленные поправки к нерелятивистской энергии приведены в удобной форме, которая позволяет получить представление об их абсо-

лютной величине, зависимости от заряда ядра, а также сравнить друг с другом отдельно вклады.

В качестве релятивистского гамильтониана в данной работе использовался гамильтониан Дирака–Кулона–Брейта (ДКБ). Для расчета полной энергии основного состояния двухэлектронных ионов и определения поправок были применены методы Хартри–Фока (ХФ), Дирака–Фока (ДФ) и конфигурационного взаимодействия (КВ). Метод КВ реализован с использованием концепции ограниченного активного пространства (restricted active space — CI-RAS) [17] в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма (ДФШ) [18,19]. Для He-подобных ионов, которые содержат только два электрона, метод CI-RAS эквивалентен полному КВ. Для повышения точности вычисления отдельных вкладов в полную энергию нерелятивистские и релятивистские расчеты были выполнены с использованием одного и того же одноэлектронного базиса и одинакового конфигурационного пространства. Расчеты проведены для всех ионов со значением заряда ядра $Z = 2 - 20$. Полученные значения энергии и релятивистские энергии водородоподобных ионов были использованы для вычисления потенциалов ионизации гелиеподобных ионов.

Отметим, что все перечисленные выше вклады в потенциалы ионизации всех He-подобных ионов с

$Z = 2 - 100$ были рассчитаны ранее в работе [11]. Однако в отличие от данной работы в [11] в качестве релятивистского гамильтониана был использован гамильтониан Брейта-Паули [20]. Этот же гамильтониан был использован в расчетах потенциалов ионизации He-подобных ионов в работе [15] для $Z = 2 - 12$. Некоторые, но не все из перечисленных выше вкладов в потенциалы ионизации были рассчитаны в работах [12,13] с использованием гамильтониана ДКБ, однако не для всех значений Z .

Настоящая работа организована следующим образом. В разд. 2 приведены выражения для гамильтониана ДКБ и всех вкладов, которые были рассчитаны в данной работе, а также дано краткое описание использованных теоретических методов. Результаты расчетов подробно изложены в разд. 3. В настоящей работе используется атомная система единиц ($\hbar = e = m = 1$).

2. Теория. Описание метода расчета

Релятивистский гамильтониан Дирака-Кулона-Брейта

В качестве релятивистского гамильтониана в данной работе используется гамильтониан ДКБ [21,22]

$$\hat{H}_{\text{ДСВ}} = \Lambda_+ [\hat{H}_D + \hat{H}_C + \hat{H}_B] \Lambda_+, \quad (1)$$

где \hat{H}_D — гамильтониан Дирака:

$$\hat{H}_D = \sum_i^N \hat{h}_D(i). \quad (2)$$

Здесь N — число электронов, \hat{h}_D — одноэлектронный четырехкомпонентный гамильтониан Дирака:

$$\hat{h}_D(i) = c(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_i) + c^2(\beta_i - 1) + V_n(r_i). \quad (3)$$

Здесь c — скорость света, $\boldsymbol{\alpha}$ и β — матрицы Дирака, $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса, $V_n(r)$ — потенциал ядра.

Оператор \hat{H}_C — двухэлектронный оператор кулоновского отталкивания:

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|. \quad (4)$$

Оператор \hat{H}_B — двухэлектронный частотно-независимый оператор Брейта в кулоновской калибровке:

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N B_{ij},$$

$$B_{ij} = -\frac{1}{r_{ij}} \left[(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla_i) (\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \nabla_j) r_{ij} \right]. \quad (5)$$

Оператор Λ_+ проектирует многоэлектронные волновые функции на пространство состояний положительного спектра некоторого одночастичного гамильтониана \hat{h}_U :

$$\hat{h}_U \phi_p = \varepsilon_p \phi_p, \quad (6)$$

$$\Lambda_+ = \prod_{i=1}^N \lambda_+(i), \quad \text{где } \lambda_+(i) = \sum_p |\phi_p(i)\rangle \langle \phi_p(i)|. \quad (7)$$

Роль оператора \hat{h}_U может играть одноэлектронный гамильтониан Дирака \hat{h}_D , оператор ДФ $\hat{h}_{\text{ДФ}}$ или оператор ДФ во внешнем поле $\hat{h}_{\text{УДФ}}$ [21,22]. В данной работе в качестве оператора \hat{h}_U использован оператор ДФ.

Метод Дирака-Фока-Штурма

Многоэлектронная волновая функция $\Psi(JM)$ с квантовыми числами J и M в приближении ДКБ может быть получена стандартным методом КВ в виде разложения по конфигурационным функциям (configuration state functions, CSF) $\Phi_I(JM)$:

$$\Psi(JM) = \sum_I C_I^{JM} \Phi_I(JM), \quad (8)$$

каждая из которых является собственной функцией операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_z и является линейной комбинацией детерминантов Слэтера одной релятивистской конфигурации:

$$\Phi_I(JM) = \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{JM} \det_{\alpha} \{ \phi_i(x_j) \}. \quad (9)$$

Отметим, что в методе КВ использование гамильтониана $\hat{H}_{\text{ДСВ}}$ эквивалентно применению вариационного принципа к гамильтониану без проекторов Λ_+ , если в разложение (8) включены только те конфигурации, которые получаются различными возбуждениями из одной или нескольких ссылочных конфигураций в область положительного спектра оператора \hat{h}_U . Для He-подобных ионов достаточно учесть все однократно и двукратно возбужденные конфигурации. Вариационный принцип Ритца в пространстве CSF сводит решение уравнения ДКБ к задаче на собственные значения матрицы гамильтониана:

$$\sum_K H_{IK} C_K^{JM} = E_I(J) C_I^{JM}, \quad (10)$$

где $H_{IK} = \langle \Phi_I | \hat{H}_{\text{ДСВ}} | \Phi_K \rangle$. Здесь индексы I, K нумеруют различные CSF.

В настоящей работе одноэлектронные волновые функции ϕ_i получены методом Дирака-Фока-Рутана [23] в базисе орбиталей ДФШ φ_k :

$$\phi_i = \sum_k u_{ki} \varphi_k. \quad (11)$$

Базис ДФШ строился следующим образом. В качестве орбиталей φ_k , занятых в основном состоянии и низколежащих возбужденных состояниях, были использованы одноэлектронные волновые функции, полученные численным решением интегродифференциальных уравнений ДФ [24]. Орбитали ДФШ для виртуальных (высоко лежащих вакантных) одноэлектронных состояний

были получены путем численного решения уравнений ДФШ [18,19]:

$$\left[\hat{h}_{\text{DF}} - \varepsilon_0 \right] \varphi_k = \mu_k W(r) \varphi_k, \quad (12)$$

где \hat{h}_{DF} — оператор ДФ, ε_0 — ссылочная одноэлектронная энергия и $W(r)$ — положительная весовая функция, стремящаяся к нулю на бесконечности. Все орбитали ДФШ имеют примерно один размер и одну и ту же асимптотику на бесконечности, определяемую ссылочной энергией ε_0 :

$$\varphi_k(r) \rightarrow C_k \exp(-\sqrt{2\varepsilon_0} r). \quad (13)$$

В данной работе в качестве ε_0 мы использовали энергию $1s$ - состояния He-подобного иона. В качестве весовой функции $W(r)$ мы выбирали функцию, стремящуюся к константе при $r \rightarrow 0$:

$$W(r) = \frac{1 - \exp(-\alpha r^2)}{(\alpha r)^2}. \quad (14)$$

Отметим, что во всех расчетах в данной работе использован единый базис одноэлектронных функций ϕ_i .

Частотно-зависимый оператор Брейта

В кулоновской калибровке поправку на частотную зависимость оператора Брейта можно записать [25,26] в виде

$$\Delta B_{ij}(\omega) = B_{ij}(\omega) - B_{ij}(0), \quad (15)$$

где

$$B_{ij}(\omega) = -\alpha_i \cdot \alpha_j \frac{\cos(\omega r_{ij})}{r_{ij}} + (\alpha_i \cdot -\nabla_i) (\alpha_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos(\omega r_{ij}) - 1}{\omega^2 r_{ij}}. \quad (16)$$

Здесь ω — так называемая энергия виртуального фотона, поделенная на скорость света c . Двухэлектронные матричные элементы оператора B_ω могут быть вычислены по формуле [27]

$$\langle ij|B(\omega)|kl\rangle = \frac{1}{2} [\langle ij|B(\omega_{ik})|kl\rangle + \langle ij|B(\omega_{jl})|kl\rangle], \quad (17)$$

где индексы i, j, k, l нумеруют одноэлектронные орбитали ϕ (11) и их энергии ε ,

$$\omega_{ik} = |\varepsilon_i - \varepsilon_k|/c, \quad \omega_{jl} = |\varepsilon_j - \varepsilon_l|/c. \quad (18)$$

Учет конечного размера ядра

Эффект конечного размера ядра (полевой сдвиг) стоит в сдвиге уровней энергии атома или иона при учете распределения ядерной плотности по конечному объему ядра. В данной работе использована модель равномерно заряженного шара, которая для малых Z

достаточно хорошо описывает распределение электрического заряда по объему ядра. Потенциал равномерно заряженного шара определяется выражением

$$V_n(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{R_{\text{sph}}} \left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R_{\text{sph}}^2} \right), & r \leq R_{\text{sph}}, \\ -\frac{Z}{r}, & r > R_{\text{sph}}. \end{cases} \quad (19)$$

Здесь R_{sph} — радиус ядерной сферы, который выражается через среднеквадратичный радиус ядра (RMS) следующим образом: $R_{\text{sph}} = \sqrt{5/3} \langle R^2 \rangle^{1/2}$. Полевой сдвиг (Δ_{FNS}) определяется как разность полных энергий иона $E(R)$, полученных в двух независимых расчетах с учетом конечного распределения ядерной плотности ($E(R = R_{\text{sph}})$) и для точечного ядра ($E(R = 0)$):

$$\Delta_{\text{FNS}} = E(R = R_{\text{sph}}) - E(R = 0). \quad (20)$$

Эффект отдачи

В низшем релятивистском приближении расчет поправок на эффект отдачи ядра в первом порядке по отношению масс электрона и ядра m/M может быть осуществлен с использованием релятивистского оператора отдачи [18,29–31]. Оператор отдачи \hat{H}_{MS} можно представить как сумму

$$\hat{H}_{\text{MS}} = \hat{H}_{\text{NMS}} + \hat{H}_{\text{SMS}}, \quad (21)$$

где оператор \hat{H}_{NMS} — одночастичный оператор нормального массового сдвига

$$\hat{H}_{\text{NMS}} = \frac{1}{2M} \sum_i \left[p_i^2 - \frac{\alpha Z}{r_i} \left(\alpha_i + \frac{(\alpha_i \cdot r_i) r_i}{r_i^2} \right) \cdot p_i \right], \quad (22)$$

и \hat{H}_{SMS} — двухчастичный оператор специфического массового сдвига

$$\hat{H}_{\text{SMS}} = \frac{1}{2M} \sum_{i \neq j} \left[p_i \cdot p_j - \frac{\alpha Z}{r_i} \left(\alpha_i + \frac{(\alpha_i \cdot r_i) r_i}{r_i^2} \right) \cdot p_j \right]. \quad (23)$$

Величина массового сдвига Δ_{MS} энергии основного состояния гелиеподобных ионов была получена как среднее значение оператора \hat{H}_{MS} (21) с использованием релятивистских волновых функций (8), рассчитанных методом КВ:

$$\Delta_{\text{MS}} = \langle \Psi(JM) | \hat{H}_{\text{MS}} | \Psi(JM) \rangle. \quad (24)$$

Высокоточные расчеты энергий атомарного гелия и легких гелиеподобных ионов должны также включать поправки высшего порядка по отношению m/M [8,15]. Однако учет подобных эффектов выходит за рамки данного исследования.

Квантово-электродинамические поправки

Для учета КЭД поправок в данной работе использован одноэлектронный модельный оператор лэмбовского сдвига \hat{h}^{QED} , предложенный в работе [32] и использованный в расчетах многоэлектронных атомов в [33]. Квантово-электродинамическая поправка была вычислена как разность двух полных энергий, рассчитанных методом КВ. В одном из расчетов модельный КЭД оператор был включен в гамильтониан ДКБ, тогда как другой расчет проводился без КЭД оператора. Модельный оператор \hat{h}^{QED} состоит из двух частей:

$$\hat{h}^{\text{QED}} = \hat{h}^{\text{VP}} + \hat{h}^{\text{SE}}. \quad (25)$$

Оператор \hat{h}^{VP} представляет вклад поляризации вакуума, а оператор \hat{h}^{SE} дает вклад собственной энергии в лэмбовский сдвиг. Оператор вакуумной поляризации \hat{h}^{VP} может быть представлен в виде суммы локальных потенциалов Юлинга $V_{\text{UehI}}(r)$ и Вичманна-Кролла $V_{\text{WK}}(r)$:

$$\hat{h}^{\text{VP}} = V_{\text{UehI}}(r) + V_{\text{WK}}(r). \quad (26)$$

Наибольший вклад в поправку вакуумной поляризации дает потенциала Юлинга [34,35]

$$V_{\text{UehI}}(r) = -\alpha^2 \frac{Z}{r} \frac{Z}{3} \int_0^\infty dr' r' \rho_n(r') \int_1^\infty dt \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^3} \times [\exp(-2t|r - r'|/\alpha) - \exp(-2t(r + r')/\alpha)], \quad (27)$$

где $\rho_n(r)$ — плотность распределения ядерного заряда, нормированная согласно условию $\int \rho_n(r) dr = 1$. Потенциал Юлинга может быть с легкостью учтен в расчете с помощью приближенных формул из работы [36]. Учет потенциала Вичманна-Кролла представляет существенно более сложную задачу [37–39]. Однако он может быть вычислен с достаточно хорошей точностью по приближенным формулам, полученным в работе [40].

Оператор собственной энергии \hat{h}^{SE} , описание которого подробно изложено в работе [32], может быть представлен в виде суммы локального короткодействующего потенциала $V_{\text{loc}}^{\text{SE}}$ и нелокального сепарабельного (конечномерного) потенциала:

$$\hat{h}^{\text{SE}} = V_{\text{loc}}^{\text{SE}} + \sum_{i,k=1}^n |p_i\rangle G_{ik} \langle p_k|. \quad (28)$$

Здесь p_i — так называемые проекционные функции, выбранные специальным образом, а матрица G_{ik} определяется так, чтобы в точности воспроизвести известные диагональные и недиагональные матричные элементы однопетлевого оператора собственной энергии [32] в базе водородоподобных функций. Компьютерный код генерации модельного оператора \hat{h}^{QED} представлен в работах [41,42].

Таблица 1. Нерелятивистская энергия основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$, рассчитанная для точечного ядра: E_{HF} — энергия Хартри-Фока, $\Delta_{\text{corr}}^{\text{nr}}$ — корреляционная энергия, $E^{\text{nr}} = E_{\text{HF}} + \Delta_{\text{corr}}^{\text{nr}}$ — полная энергия, полученная нерелятивистским методом конфигурационного взаимодействия; все значения даны в атомных единицах

Z	E_{HF}	$\Delta_{\text{corr}}^{\text{nr}}$	E^{nr}	
			Данная работа	Другие работы
2	-2.861680	-0.042042	-2.903722	-2.903724 ^{a,b,c,d}
3	-7.236415	-0.043496	-7.279911	-7.279913 ^{a,c,d}
4	-13.611299	-0.044265	-13.655564	-13.655566 ^{a,c,d}
5	-21.986234	-0.044735	-22.030969	-22.030972 ^{a,c,d}
6	-32.361193	-0.045052	-32.406245	-32.406247 ^{a,c,d}
7	-44.736164	-0.045279	-44.781443	-44.781445 ^{a,c,d}
8	-59.111143	-0.045451	-59.156593	-59.156595 ^{a,c,d}
9	-75.486126	-0.045584	-75.531711	-75.531712 ^{a,c,d}
10	-93.861114	-0.045691	-93.906805	-93.906807 ^{a,c,d}
11	-114.236103	-0.045779	-114.281882	-114.281884 ^{a,d}
12	-136.611094	-0.045852	-136.656947	-136.656948 ^{a,d}
13	-160.986087	-0.045914	-161.032001	-161.032003 ^a
14	-187.361081	-0.045967	-187.407048	-187.407050 ^a
15	-215.736076	-0.046014	-215.782089	-215.782091 ^a
16	-246.111071	-0.046054	-246.157125	-246.157126 ^a
17	-278.486067	-0.046090	-278.532156	-278.532158 ^a
18	-312.861063	-0.046121	-312.907185	-312.907186 ^a
19	-349.236060	-0.046150	-349.282210	-349.282211 ^a
20	-387.611057	-0.046175	-387.657232	-387.657234 ^a

Примечание. ^a Drake [11], ^b Korobov [4], ^c Nakashima, Nakatsuji [5], ^d Yerokhin, Pachucki [15]. Данные [4,5,11,15] округлены до шести значащих цифр после десятичной точки.

3. Результаты расчетов и обсуждение

В настоящей работе были проведены нерелятивистские и релятивистские вариационные расчеты энергии основного состояния гелиеподобных ионов в диапазоне значений заряда ядра $Z = 2 - 20$. В вычислениях использовано значение скорости света $c = 137.035\,999\,139$ [43]. Все расчеты были выполнены с применением одноэлектронного базисного набора, который включал в себя все орбитали ДФШ вплоть до значений орбитального квантового числа $l_{\text{max}} = 13$ и главного квантового числа $n_{\text{max}} = 30$. Исследование сходимости полученных результатов показало, что указанный выше размер базиса является достаточным для выполнения расчетов с необходимой точностью. Кроме того, выполнена экстраполяция результатов к $l_{\text{max}} \rightarrow \infty$ [44].

В табл. 1 представлены результаты нерелятивистских расчетов для точечного ядра. Во втором столбце таблицы приведены энергии E_{HF} , полученные в приближении ХФ. В третьем столбце представлены значения корреляционного вклада $\Delta_{\text{corr}}^{\text{nr}} = E^{\text{nr}} - E_{\text{HF}}$, который равен разности нерелятивистских энергий, полученных методом КВ (E^{nr}) и методом ХФ (E_{HF}). Значения полных нерелятивистских энергий E^{nr} , полученные в данной работе, даны в четвертом столбце. В пятом столбце

представлены нерелятивистские полные энергии гелие-подобных ионов, взятые из работ [4,5,11,15]. Результаты последних работ округлены до шести значащих цифр после десятичной точки в атомных единицах. Сравнение полученных данных для нерелятивистской энергии с высокоточными расчетами, выполненными в работах [4,5,11,15], показывает хорошее согласие рассчитанной нами нерелятивистской энергии с энергией из указанных работ. Это сравнение позволяет оценить абсолютную погрешность наших расчетов с использованием нерелятивистского гамильтониана Шредингера как величину порядка 0.000 002 а.е.

Прежде чем провести расчеты различных поправок к нерелятивистской энергии E^{nr} , мы протестировали релятивистскую версию метода КВ с использованием гамильтониана ДКБ, выполнив расчеты энергий в нерелятивистском пределе $E_{c \rightarrow \infty}^{rel}$. С этой целью параметр скорости света был увеличен в 100 раз и составил $c_{\infty} = 13\,703.599\,9139$. Как и следовало ожидать, при увеличении значения скорости света c релятивистская энергия E^{rel} приближается к своему нерелятивистскому значению E^{nr} . В итоге относительная разность $E_{c \rightarrow \infty}^{rel}$ и E^{nr} составила от 10^{-7} до 10^{-6} при изменении Z от 2 до 20.

В табл. 2 приведены различные поправки к нерелятивистской энергии E^{nr} основного состояния, полученные с использованием гамильтониана ДКБ. Дадим краткое описание данных, приведенных в этой таблице.

Во втором столбце табл. 2 даны значения среднеквадратичных радиусов ядер RMS в единицах ферми, взятые из работы [28]. В третьем столбце приведены релятивистские поправки Δ_{DF} к энергии ХФ E_{HF} . Они представляет собой разность энергий, полученных релятивистским методом ДФ и нерелятивистским методом ХФ, $\Delta_{DF} = E_{DF} - E_{HF}$.

В четвертом столбце приведены релятивистские поправки Δ_{corr}^{rel-nr} к корреляционной энергии Δ_{corr}^{nr} из табл. 1. Под релятивистской корреляционной энергией мы понимаем разность между энергией E_{DC}^{rel} , рассчитанной методом КВ с использованием гамильтониана Дирака-Кулона (т.е. гамильтониана (1) без брейтовского взаимодействия \hat{H}_B), и энергией ДФ E_{DF} : $\Delta_{corr}^{rel} = E_{DC}^{rel} - E_{DF}$. Таким образом, релятивистская поправка к корреляционной энергии составляет величину $\Delta_{corr}^{rel-nr} = \Delta_{corr}^{rel} - \Delta_{corr}^{nr}$. Эту поправку также можно переписать в виде $\Delta_{corr}^{rel-nr} = (E_{DC}^{rel} - E^{nr}) - \Delta_{DF}$.

В следующем столбце приведены значения брейтовской поправки Δ_{Breit} , полученные как разность двух энергий, рассчитанных методом КВ с учетом и без учета брейтовского взаимодействия, т.е. $\Delta_{Breit} = E_{DCB}^{rel} - E_{DC}^{rel}$.

Все перечисленные выше поправки, Δ_{DF} , Δ_{corr}^{rel-nr} и Δ_{Breit} , были рассчитаны в модели точечного ядра, [p.n.]. В шестом столбце в табл. 2 дана итоговая релятивистская поправка к нерелятивистской энергии E^{nr} [p.n.] основного состояния гелиеподобных ионов для точечного ядра: $\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] = E_{DCB}^{rel}[p.n.] - E^{nr}[p.n.]$. Данная поправка равна сумме Δ_{DF} , Δ_{corr}^{rel-nr} и Δ_{Breit} .

В предпоследнем столбце даны значения поправки на конечный размер [f.n.] ядра Δ_{FNS} . Данный вклад был получен как разность энергий, рассчитанных методом КВ с учетом и без учета конечных размеров ядра с использованием гамильтониана ДКБ. Поправка на конечный размер ядра была рассчитана в модели равномерно заряженного шара. Таким образом, $\Delta_{FNS} = E_{DCB}^{rel}[f.n.] - E_{DCB}^{rel}[p.n.]$.

Наконец, в последнем столбце в табл. 2 представлена итоговая поправка $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$ к нерелятивистской энергии E^{nr} [p.n.] с учетом с учетом поправки на конечный размер ядра. Данная поправка равна $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.] = E_{DCB}^{rel}[f.n.] - E^{nr}[p.n.]$, иначе ее можно представить в виде $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.] = \Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] + \Delta_{FNS}$.

Значения полной релятивистской энергии $E_{DCB}^{rel}[f.n.]$, полученной методом КВ с использованием гамильтониана ДКБ, приведены в пятом столбце табл. 3. Эту энергию можно представить как сумму нерелятивистской энергии $E^{nr}[p.n.]$ и итоговой поправки $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$, т.е. $E_{DCB}^{rel}[f.n.] = E^{nr}[p.n.] + \Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$. Для удобства в третьем и четвертом столбцах табл. 3 еще раз приведены нерелятивистские энергии $E^{nr}[p.n.]$ и поправки $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$ соответственно.

Помимо перечисленных выше вкладов, необходимо также учесть частотную зависимость брейтовского взаимодействия (Δ_{ω}) в кулоновской калибровке, эффект отдачи ядра (Δ_{MS}) и КЭД вклады (Δ_{QED}). Значения этих поправок представлены в шестом, седьмом и восьмом столбцах табл. 3 соответственно.

Поправка на эффект отдачи ядра Δ_{MS} рассчитана как математическое ожидание оператора массового сдвига (21) с волновыми функциями, полученными релятивистским методом КВ. Изотоп для каждого из ионов указан во втором столбце. Соответствующие массы изотопов взяты из компиляции [45] в согласии с [46].

Квантово-электродинамические поправки Δ_{QED} были получены как разности полных энергий, рассчитанных релятивистским методом КВ с учетом конечного размера ядра, с включением модельного КЭД потенциала \hat{h}^{QED} в гамильтониан и без него, т.е. $\Delta_{QED} = E_{DCB+QED}^{rel}[f.n.] - E_{DCB}^{rel}[f.n.]$. Отметим, что численная программа [42] позволяет проводить расчеты только для систем с $Z \geq 3$. Чтобы получить значение КЭД поправки для нейтрального гелия, мы выделили нетривиальный двухэлектронный вклад „экранированных“ КЭД эффектов, вычтя удвоенный КЭД вклад для водородоподобных ионов. Затем сделали экстраполяцию „экранированного“ вклада на случай $Z = 2$, после чего добавили КЭД поправку в приближении независимых электронов, вычисленную согласно [46]. Наконец, в последнем столбце табл. 3 представлена полная релятивистская энергия $E_{tot} = E_{DCB}^{rel}[f.n.] + \Delta_{\omega} + \Delta_{MS} + \Delta_{QED}$, включающая КЭД поправки и значения массового сдвига (эффект отдачи).

Основная погрешность полной энергии E_{tot} происходит от КЭД вклада и других неучтенных высших радиа-

Таблица 2. Поправки к нерелятивистской энергии E^{nr} основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$: RMS обозначает среднеквадратичный радиус ядра, выраженный в ферми [28]. Δ_{DF} — релятивистская поправка к энергии Хартри-Фока E_{HF} , Δ_{corr}^{rel-nr} — релятивистская поправка к корреляционной энергии Δ_{corr}^{nr} (без вклада брейтовского взаимодействия), Δ_{Breit} — вклад в энергию от брейтовского взаимодействия, $\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] = \Delta_{DF} + \Delta_{corr}^{rel-nr} + \Delta_{Breit}$. Поправки Δ_{DF} , Δ_{corr}^{rel-nr} и Δ_{Breit} рассчитаны для точечного ядра, Δ_{FNS} — поправка на конечный размер ядра, $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.] = \Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] + \Delta_{FNS}$. Все значения поправок к энергии даны в атомных единицах

Z	RMS	Δ_{DF}	Δ_{corr}^{rel-nr}	Δ_{Breit}	$\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.]$	Δ_{FNS}	$\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$
2	1.6755	-0.000133	-0.000003	0.000029	-0.000108	0.000000	-0.000108
3	2.4440	-0.000790	-0.000001	0.000159	-0.000632	0.000000	-0.000632
4	2.5190	-0.002702	0.000005	0.000470	-0.002227	0.000001	-0.002227
5	2.4060	-0.006915	0.000012	0.001042	-0.005860	0.000002	-0.005858
6	2.4702	-0.014796	0.000021	0.001957	-0.012818	0.000003	-0.012814
7	2.5582	-0.028037	0.000032	0.003295	-0.024710	0.000007	-0.024703
8	2.6991	-0.048651	0.000043	0.005137	-0.043471	0.000013	-0.043458
9	2.8976	-0.078979	0.000056	0.007563	-0.071360	0.000025	-0.071334
10	3.0055	-0.121686	0.000069	0.010656	-0.110961	0.000042	-0.110919
11	2.9936	-0.179770	0.000082	0.014497	-0.165192	0.000062	-0.165130
12	3.0570	-0.256560	0.000095	0.019166	-0.237299	0.000092	-0.237206
13	3.0610	-0.355719	0.000109	0.024747	-0.330864	0.000129	-0.330734
14	3.1224	-0.481248	0.000122	0.031320	-0.449806	0.000184	-0.449622
15	3.1889	-0.637489	0.000134	0.038970	-0.598385	0.000256	-0.598129
16	3.2611	-0.829129	0.000146	0.047777	-0.781206	0.000351	-0.780854
17	3.3654	-1.061204	0.000158	0.057826	-1.003220	0.000483	-1.002737
18	3.4274	-1.339101	0.000168	0.069201	-1.269733	0.000639	-1.269094
19	3.4349	-1.668566	0.000177	0.081984	-1.586406	0.000809	-1.585596
20	3.4776	-2.055706	0.000184	0.096260	-1.959262	0.001034	-1.958228

Таблица 3. Энергия основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$, A — массовое число: $E^{nr}[p.n.]$ — нерелятивистская энергия, рассчитанная методом КВ в модели точечного ядра; $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$ — релятивистская поправка, учитывающая также вклады в энергию от брейтовского взаимодействия и учета конечного размера ядра; $E_{DCB}^{rel}[f.n.] = E^{nr}[p.n.] + \Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$ — полная релятивистская энергия, рассчитанная методом КВ с использованием гамильтониана ДКБ и модели равномерно заряженного шара для ядерной плотности, Δ_{ω} — поправка на частотную зависимость брейтовского взаимодействия, Δ_{MS} — поправка на эффект отдачи ядра, Δ_{QED} — поправка на КЭД эффекты, $E_{tot} = E_{DCB}^{rel} + \Delta_{\omega} + \Delta_{MS} + \Delta_{QED}$ — полная энергия основного состояния с учетом всех поправок; все значения даны в атомных единицах

Z	A	$E^{nr}[p.n.]$	$\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$	$E_{DCB}^{rel}[f.n.]$	Δ_{ω}	Δ_{MS}	Δ_{QED}	E_{tot}
2	4	-2.903722	-0.000108	-2.903829	0.000000	0.000420	0.000023	-2.903387
3	7	-7.279911	-0.000632	-7.280543	0.000000	0.000592	0.000114	-7.279836
4	9	-13.655564	-0.002227	-13.657791	-0.000001	0.000857	0.000346	-13.656588
5	11	-22.030969	-0.005858	-22.036828	-0.000002	0.001125	0.000803	-22.034901
6	12	-32.406245	-0.012814	-32.419059	-0.000004	0.001513	0.001583	-32.415967
7	14	-44.781443	-0.024703	-44.806147	-0.000007	0.001787	0.002791	-44.801577
8	16	-59.156593	-0.043458	-59.200051	-0.000012	0.002062	0.004539	-59.193463
9	19	-75.531711	-0.071334	-75.603045	-0.000019	0.002212	0.006947	-75.593905
10	20	-93.906805	-0.110919	-94.017724	-0.000029	0.002610	0.010138	-94.005005
11	23	-114.281882	-0.165130	-114.447012	-0.000042	0.002759	0.014241	-114.430054
12	24	-136.656947	-0.237206	-136.894153	-0.000058	0.003159	0.019386	-136.871666
13	27	-161.032001	-0.330734	-161.362736	-0.000078	0.003306	0.025707	-161.333800
14	28	-187.407048	-0.449622	-187.856671	-0.000101	0.003708	0.033340	-187.819723
15	31	-215.782089	-0.598129	-216.380218	-0.000129	0.003854	0.042425	-216.334068
16	32	-246.157125	-0.780854	-246.937979	-0.000162	0.004257	0.053103	-246.880782
17	35	-278.532156	-1.002737	-279.534893	-0.000200	0.004402	0.065514	-279.465178
18	40	-312.907185	-1.269094	-314.176278	-0.000244	0.004325	0.079803	-314.092394
19	39	-349.282210	-1.585596	-350.867806	-0.000294	0.004949	0.096115	-350.767036
20	40	-387.657232	-1.958228	-389.615460	-0.000349	0.005354	0.114595	-389.495860

Таблица 4. Потенциалы ионизации основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$ (без учета КЭД вкладов и поправок на эффект отдачи ядра) и сравнение с данными из работ [11,13,14,47]; $IP^{nr} = IP_{HF}^{nr} + \delta_{corr}^{nr}$ — потенциал ионизации для точечного ядра, полученный в рамках нерелятивистского метода конфигурационного взаимодействия, где IP_{HF}^{nr} — потенциал ионизации в приближении Хартри-Фока, δ_{corr}^{nr} — нерелятивистский корреляционный вклад, δ_{DF} — релятивистская поправка к IP_{HF}^{nr} , δ_{corr}^{rel-nr} — релятивистская поправка к корреляционному вкладу δ_{corr}^{nr} (без вклада брейтовского взаимодействия), δ_{Breit} — вклад от брейтовского взаимодействия. Поправки δ_{DF} , δ_{corr}^{rel-nr} и δ_{Breit} рассчитаны для точечного ядра, δ_{FNS} — поправка на конечный размер ядра, $IP_{DCB}^{rel} = IP^{nr} + \delta_{DF} + \delta_{corr}^{rel-nr} + \delta_{Breit} + \delta_{FNS}$ — релятивистский потенциал ионизации для конечного ядра, полученный на основе гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта. Все значения даны в атомных единицах

Z	IP^{nr}	δ_{DF}	δ_{corr}^{rel-nr}	δ_{Breit}	δ_{FNS}	IP_{DCB}^{rel}	Другие работы
2	0.903722	0.000027	0.000003	-0.000029	-0.000000	0.903723	0.903722 ^a
3	2.779911	0.000251	0.000001	-0.000159	-0.000000	2.780004	2.780003 ^a
4	5.655564	0.000997	-0.000005	-0.000470	-0.000000	5.656086	5.656088 ^a
5	9.530969	0.002752	-0.000012	-0.001042	-0.000001	9.532666	9.532671 ^a
6	14.406245	0.006161	-0.000021	-0.001957	-0.000002	14.410426	14.410436 ^a
7	20.281443	0.012034	-0.000032	-0.003295	-0.000003	20.290147	20.290164 ^a
8	27.156593	0.021340	-0.000043	-0.005137	-0.000006	27.172747	27.172772 ^a
9	35.031711	0.035211	-0.000056	-0.007563	-0.000012	35.059291	35.059326 ^a
10	43.906805	0.054944	-0.000069	-0.010656	-0.000019	43.951005	43.951052 ^a 43.951004 ^c
11	53.781882	0.081999	-0.000082	-0.014497	-0.000029	53.849273	53.849333 ^a
12	64.656947	0.118001	-0.000095	-0.019166	-0.000044	64.755643	64.755719 ^a 64.75567 ^b
13	76.532001	0.164745	-0.000109	-0.024747	-0.000061	76.671830	76.671925 ^a
14	89.407048	0.224192	-0.000122	-0.031320	-0.000087	89.599711	89.599827 ^a 89.59976 ^b
15	103.282089	0.298474	-0.000134	-0.038970	-0.000122	103.541337	103.541475 ^a
16	118.157125	0.389895	-0.000146	-0.047777	-0.000168	118.498929	118.499094 ^a 118.49901 ^b
17	134.032156	0.500934	-0.000158	-0.057826	-0.000232	134.474875	134.475069 ^a
18	150.907185	0.634243	-0.000168	-0.069201	-0.000307	151.471752	151.471971 ^a 151.47187 ^b 151.471755(4) ^d
19	168.782210	0.792655	-0.000177	-0.081984	-0.000390	169.492315	169.492570 ^a
20	187.657232	0.979183	-0.000184	-0.096260	-0.000499	188.539472	188.539753 ^a 188.53964 ^b 188.539465 ^c

Примечание. ^a Drake [11], данные округлены до шести значащих цифр после десятичной точки. ^b Artemyev *et al.* [14]. ^c Plante *et al.* [13]. ^d Malyshev *et al.* [47].

ционных поправок. Мы оцениваем эту погрешность как 3% от КЭД вклада.

Далее были выполнены расчеты потенциала ионизации (IP) основного состояния гелиеподобных ионов. Потенциал ионизации можно получить как разность полной энергии состояния $1s$ водородоподобного иона и полной энергии состояния $1s^2$ гелиеподобного иона. Нерелятивистские $E_{1s}^{nr}[p.n.]$ и релятивистские $E_{1s}^{rel}[p.n.]$ энергии состояния $1s$ водородоподобного иона для точечного ядра определяются простыми аналитическими выражениями:

$$E_{1s}^{nr}[p.n.] = -\frac{Z^2}{2}, \quad E_{1s}^{rel}[p.n.] = -\frac{Z^2}{1 + \sqrt{1 - (\alpha Z)^2}}.$$

В случае конечного ядра энергию $E_{1s}^{rel}[f.n.]$ $1s$ -состояния можно легко найти, численно решив уравнение Дирака.

Для определения поправки на эффект отдачи ядра $\Delta_{MS,1s}$ водородоподобного иона достаточно учесть нормальный массовый сдвиг (22). Наконец, для расчета КЭД поправки $\Delta_{QED,1s}$ можно вычислить матричный элемент модельного оператора лэмбовского сдвига \hat{h}^{QED} с водородными функциями, либо рассмотреть сдвиг уровня $1s$ при добавлении данного оператора в уравнение Дирака. Эти два рецепта приводят к одинаковому результату в пределах необходимой нам точности.

В табл. 4 во втором столбце приведены значения нерелятивистского потенциала ионизации основного состояния гелиеподобных ионов $IP^{nr}[p.n.] = E_{1s}^{nr}[p.n.] - E^{nr}[p.n.]$, полученные с учетом корреляционных эффектов. В следующих, с 3-го по 6-й столбцах табл. 4 даны значения релятивистской поправки в приближении ДФ δ_{DF} , релятивистские поправки к корреляционному вкладу δ_{corr}^{rel-nr} , вклады брейтовского

Таблица 5. Потенциалы ионизации основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра $Z = 2 - 20$ и сравнение с данными работ [11-15,47]: IP_{DCB}^{rel} — релятивистский потенциал ионизации для конечного ядра, полученный на основе гамильтониана ДКБ, δ_ω — поправка на частотную зависимость брейтовского взаимодействия, δ_{MS} — поправка на эффект отдачи ядра, δ_{QED} — поправка на КЭД эффекты, $IP_{tot} = IP_{DCB}^{rel} + \delta_\omega + \delta_{MS} + \delta_{QED}$ — полный потенциал ионизации основного состояния; все значения даны в атомных единицах

Z	IP_{DCB}^{rel}	δ_ω	δ_{MS}	δ_{QED}	I_{tot}	I_{tot} [11]	Другие работы
2	0.903723	0.000000	-0.000146	-0.000007	0.903571	0.903570	0.903570 ^a
3	2.780004	0.000000	-0.000240	-0.000042	2.779722	2.779722	2.779722 ^a
4	5.656086	0.000001	-0.000370	-0.000139	5.655578	5.655581	5.655581 ^a 5.655965 ^b
5	9.532666	0.000002	-0.000502	-0.000340	9.531825	9.531833	9.531833(1) ^a
6	14.410426	0.000004	-0.000690	-0.000691	14.409048	14.409061(1)	14.409062(1) ^a 14.409849 ^b
7	20.290147	0.000007	-0.000826	-0.001245	20.288083	20.288100(1)	20.288103(3) ^a
8	27.172747	0.000012	-0.000964	-0.002057	27.169739	27.169760(2)	27.169765(5) ^a 27.170983 ^b
9	35.059291	0.000019	-0.001042	-0.003185	35.055083	35.055107(4)	35.055115(10) ^a
10	43.951005	0.000029	-0.001238	-0.004691	43.945105	43.945128(6)	43.945141(16) ^a 43.946868 ^b 43.945155 ^d
11	53.849273	0.000042	-0.001315	-0.006639	53.841361	53.841379(8)	53.841402(25) ^a
12	64.755643	0.000058	-0.001512	-0.009092	64.745097	64.745104(12)	64.745138(37) ^a 64.74513(1) ^c
13	76.671830	0.000078	-0.001588	-0.012118	76.658202	76.658194(16)	76.65824(1) ^c
14	89.599711	0.000101	-0.001786	-0.015783	89.582243	89.582211(22)	89.585312 ^b 89.58228(1) ^c
15	103.541337	0.000129	-0.001861	-0.020158	103.519447	103.519381(29)	103.51948(1) ^c
16	118.498929	0.000162	-0.002060	-0.025312	118.471719	118.471610(37)	118.47175(1) ^c
17	134.474875	0.000200	-0.002134	-0.031315	134.441626	134.441462(47)	134.44165(1) ^c
18	151.471752	0.000244	-0.002101	-0.038239	151.431657	151.431417(60)	151.43613 ^b 151.43167(1) ^c 151.431732(33) ^e
19	169.492315	0.000294	-0.002408	-0.046155	169.444046	169.443721(74)	169.44404(1) ^c
20	188.539472	0.000349	-0.002608	-0.055136	188.482077	188.481635(91)	188.48204(2) ^c 188.481937 ^d

Примечание. ^a Yerokhin, Pachucki [15], ^b Cheng et al. [12], ^c Artemyev et al. [14], ^d Plante et al. [13]. ^e Malyshev et al. [47], Данные [11,15] округлены до шести значащих цифр после десятичной точки.

взаимодействия δ_{Breit} и поправки на конечный размер ядра (полевой сдвиг) соответственно.

Релятивистская поправка к корреляционному вкладу δ_{corr}^{rel-nr} и вклад от брейтовского взаимодействия δ_{Breit} являются двухэлектронными поправками, поэтому их значения для потенциала ионизации совпадают по абсолютной величине с соответствующими поправками для полной энергии гелиеподобного иона: $\delta_{corr}^{rel-nr} = -\Delta_{corr}^{rel-nr}$ и $\delta_{Breit} = -\Delta_{Breit}$. В шестом столбце табл. 4 дана поправка на конечный размер ядра для потенциала ионизации: $\delta_{FNS} = E_{1s}^{rel}[f.n.] - E_{1s}^{rel}[p.n.] - \Delta_{FNS}$.

В седьмом столбце табл. 4 приведены полные значения потенциала ионизации IP_{DCB}^{rel} , полученные методом КВ с использованием гамильтониана ДКБ, которые представляют собой сумму: $IP_{DCB}^{rel} = IP^{nr} + \delta_{DF} + \delta_{corr}^{rel} + \delta_{Breit} + \delta_{FNS}$. В последнем столбце таблицы приведены значения потенциалов ионизации, полученные другими авторами.

Как видно из табл. 4, значения потенциалов ионизации IP_{DCB}^{rel} , полученные методом КВ с использованием гамильтониана ДКБ, хорошо совпадают с систематическими данными из работы [11] в области малых Z. С ростом Z расхождение увеличивается и заметно превышает расхождение аналогичных нерелятивистских значений (табл. 1). Причиной этого является тот факт, что в работе [11] расчеты были выполнены в рамках комбинированного подхода, основанного на использовании двухкомпонентного гамильтониана Брейта-Паули и частичном учете релятивистских поправок высших порядков, включая частотную зависимость брейтовского взаимодействия. Наши данные для потенциалов ионизации IP_{DCB}^{rel} , полученные в кулоновской калибровке и с использованием гамильтониана ДКБ, не содержат поправки на частотную зависимость брейтовского взаимодействия, которые представлены отдельно в третьем столбце табл. 5. Кроме того, в работе [11] не были

учтены вклады порядка $O(\alpha^4 Z^4)$, возникающие из релятивистских корреляционных поправок. Расхождение наших результатов с данными работы [14], где в качестве невозмущенного гамильтониана был использован гамильтониан Дирака, несколько меньше и связано с тем, что в работе [14] межэлектронное взаимодействие включало в себя частотно-зависимые высшие радиационные поправки.

Отметим, что для $Z = 10, 20$ наши данные для потенциалов ионизации $I_{\text{DCB}}^{\text{rel}}$ без учета частотной зависимости брейтовского взаимодействия хорошо совпадают с результатами работы [13], представленными в последнем столбце табл. 4 также без учета частотной зависимости. Кроме того, для $Z = 18$ результат, полученный в работе [47] методом теории возмущений с учетом высших порядков теории возмущений и с использованием того же, как и у нас гамильтониана ДКБ, находится в очень хорошем согласии с нашим значением.

Наконец, в табл. 5 приведены вклады в потенциал ионизации от частотной зависимости брейтовского взаимодействия $\delta_\omega = -\Delta_\omega$, отдачи ядра $\delta_{\text{MS}} = \Delta_{\text{MS},1s} - \Delta_{\text{MS}}$ и КЭД поправок $\delta_{\text{QED}} = \Delta_{\text{QED},1s} - \Delta_{\text{QED}}$. Во втором столбце для удобства еще раз приведены значения потенциала ионизации $I_{\text{DCB}}^{\text{rel}}$, полученные релятивистским методом КВ с использованием гамильтониана ДКБ с учетом конечного размера ядра. Итоговые значения потенциала ионизации $I_{\text{tot}} = I_{\text{DCB}}^{\text{rel}} + \delta_\omega + \delta_{\text{MS}} + \delta_{\text{QED}}$ представлены в шестом столбце.

В табл. 5 выполнено сравнение итоговых значений I_{tot} с результатами работ [11–15,47]. Здесь, так же как и в табл. 4, наблюдается хорошее согласие наших данных с результатами других работ в области малых Z , которое нарушается с ростом Z . Так же как и для полной энергии E_{tot} гелиеподобных ионов, основная погрешность в значениях потенциала ионизации I_{tot} , полученных в данной работе, происходит от КЭД вклада и других неучтенных высших радиационных поправок. Мы оцениваем эту погрешность как 3% от КЭД вклада. В целом расхождение наших данных с результатами других авторов укладывается в заявленную нами погрешность, за исключением работы [12].

4. Заключение

В данной работе были выполнены систематические расчеты различных поправок, которые вносят вклад в полные энергии и потенциалы ионизации основного состояния гелиеподобных ионов с зарядом ядра в интервале $Z = 2 - 20$. Рассчитаны полные нерелятивистские энергии в приближении ХФ, нерелятивистские корреляционные вклады, релятивистские поправки в приближении ДФ, релятивистские поправки к нерелятивистским корреляционным вкладам, вклады брейтовского взаимодействия, КЭД поправки (лэмбовский сдвиг) уровней энергии, а также поправки, учитывающие конечный размер ядра (полевой сдвиг) и конечность

массы ядра (эффект отдачи). Результаты представлены в форме, которая позволяет использовать как полные значения энергии и потенциала ионизации, так и вклады отдельных эффектов.

Выполнено сравнение значений потенциалов ионизации $I_{\text{DCB}}^{\text{rel}}$, рассчитанных в данной работе с использованием гамильтониана ДКБ, и итоговых значений потенциалов ионизации I_{tot} , полученных с учетом КЭД эффектов, эффектов отдачи и частотной зависимости брейтовского взаимодействия, с данными других авторов. Наблюдается хорошее согласие итоговых значений с учетом заявленной нами погрешности 3% от QED вклада.

Финансирование работы

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ) за поддержку (гранты No 18-03-01220, 17-02-00216). И.И. Тупицын благодарит Министерство образования и науки Российской Федерации (грант No. 3.1463.2017/4.6) и Санкт-Петербургский государственный университет (грант No. 37717909).

Благодарности

Авторы благодарят А. Турбинера за стимулирующие дискуссии.

Список литературы

- [1] *Hylleraas E.A.* // *Z. Physik.* 1929. V. 54. P. 347.
- [2] *Schwartz C.* // *Int. J. Mod. Phys. E.* 2006. V. 15. P. 877.
- [3] *Drake G.W.F., Cassar M.M., Nistor R.A.* // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 65. P. 054501.
- [4] *Korobov V.I.* // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 66. P. 024501.
- [5] *Nakashima H., Nakatsuji H.* // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128. P. 154107.
- [6] *Araki H.* // *Prog. Theor. Phys.* 1957. V. 17. P. 619.
- [7] *Sucher J.* // *Phys. Rev.* 1958. V. 109. P. 1010.
- [8] *Drake G.W.F.* // *Phys. Scr.* 2001. V. 95. P. 22.
- [9] *Pachucki K.* // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 74. P. 022512.
- [10] *Pekeris C.L.* // *Phys. Rev.* 1958. V. 112. P. 1649.
- [11] *Drake G.W.F.* // *Can. J. Phys.* 1988. V. 66. P. 586.
- [12] *Cheng K.T., Chen M.H., Johnson W.R., Sapirstein J.* // *Phys. Rev. A.* 1994. V. 50. P. 247.
- [13] *Plante D.R., Johnson W.R., Sapirstein J.* // *Phys. Rev. A.* 1994. V. 49. P. 3519.
- [14] *Artemyev A.N., Shabaev V.M., Yerokhin V.A., Plunien G., Soff G.* // *Phys. Rev. A.* 2005. V. 71. P. 062104.
- [15] *Yerokhin V.A., Pachucki K.* // *Phys. Rev. A.* 2010. V. 81. P. 022507.
- [16] *Turbiner A.V., Lopez Vieyra J.C.* Helium-like and Lithium-like Ions: Ground State Energy. [Online]. Available: arXiv: 1707.07547v3[physics.atom-ph] (Nov 2017)
- [17] *Olsen J., Roos B.O., Jorgensen P., Jensen H.J.A.* // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 89. P. 2185.
- [18] *Tupitsyn I.I., Shabaev V.M., Crespo Lopez-Urrutia J.R., Draganic I., Soria Orts R., Ullrich J.* // *Phys. Rev. A.* 2003. V. 68. P. 022511.

- [19] *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.
- [20] *Bethe H.A., Salpeter E.E.* // Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms. Berlin: Springer, 1957.
- [21] *Sucher J.* // Phys. Rev. A. 1980. V. 22. P. 348.
- [22] *Mittleman M.H.* // Phys. Rev. A. 1981. V. 24. P. 1167.
- [23] *Kim Y.K.* // Phys. Rev. 1967. V. 154. P. 17.
- [24] *Bratzev V.F., Deyneka G.B., Tupitsyn I.I.* // Bull. Acad. Sci. USSR. Phys. Ser. (Engl. Transl.) 1977. V. 41. P. 173.
- [25] *Mann J.B., Johnson W.R.* // Phys. Rev. A. 1971. V. 4. P. 41.
- [26] *Grant I.P., Pyper N.C.* // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1976. V. 9. P. 761.
- [27] *Mittlemann M.H.* // Phys. Rev. A. 1972. V. 5. P. 2395.
- [28] *Angeli I., Marinova K.P.* // At. Data Nucl. Data Tabl. 2013. V. 99. P. 69.
- [29] *Шабаев В.М.* // Теор. и мат. физика. 1985. V. 63. P. 394; *Shabaev V.M.* // Theor. Math. Phys. 1985. V. 63. P. 588.
- [30] *Шабаев В.М.* // Яд. физика. 1988. V. 47. P. 107. *Shabaev V.M.* // Sov. J. Nucl. Phys. 1988. V. 47. P. 69.
- [31] *Palmer C.W.P.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1987. V. 20. P. 5987.
- [32] *Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Yerokhin V.A.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 88. P. 012513.
- [33] *Tupitsyn I.I., Kozlov M.G., Safronova M.S., Shabaev V.M., Dzuba V.A.* // PRL 2016. V. 117. P. 253001.
- [34] *Serber R.* // Phys. Rev. 1935. V. 48. P. 49.
- [35] *Uehling E.A.* // Phys. Rev. 1935. V. 48. P. 55.
- [36] *Fullerton L.W., Rinker G.A., Jr.* // Phys. Rev. A. 1976. V. 13. P. 1283.
- [37] *Soff G., Mohr P.J.* // Phys. Rev. A. 1988. V. 38 P. 5066.
- [38] *Manakov N.L., Nekipelov A.A., Fainshtein A.G.* // Sov. Phys. JETP. 1989. V. 68. P. 673.
- [39] *Persson H., Lindgren I., Salomonson S., Sunnergren P.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 48. P. 2772.
- [40] *Fainshtein A.G., Manakov N.L., Nekipelov A.A.* // J. Phys. B. 1991. V. 24. P. 559.
- [41] *Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Yerokhin V.A.* // Comp. Phys. Commun. 2015. V. 189. P. 175.
- [42] *Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Yerokhin V.A.* // Comp. Phys. Commun. 2018. V. 223. P. 69.
- [43] *Mohr P.J., Newell D.B., Taylor B.N.* // Rev. Mod. Phys. 2016. V. 88. P. 035009.
- [44] *Kaygorodov M.Y., Kozhedub Y.S., Tupitsyn I.I., Malyshev A.V., Glazov D.A., Plunien G., Shabaev V.M.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 99. P. 032505.
- [45] *Wang M., Audi G., Wapstra A.H., Kondev F.G., MacCormick M., Xu X., Pfeiffer B.* // Chin. Phys. C. 2012. V. 36. P. 1603.
- [46] *Yerokhin V.A., Shabaev V.M.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2015. V. 44. P. 033103.
- [47] *Malyshev A.V., Kozhedub Y.S., Glazov D.A., Tupitsyn I.I., Shabaev V.M.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 99. P. 010501(R).