

01

# Расчеты релятивистских, корреляционных, ядерных и квантово-электродинамических поправок к энергиям и потенциалам ионизации основного состояния литиеподобных ионов

© С.В. Безбородов<sup>1</sup>, И.И. Тупицын<sup>1</sup>, А.В. Малышев<sup>1</sup>, Д.В. Миронова<sup>2</sup>, В.М. Шабав<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197376 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: yaaaashik@mail.ru, i.tupitsyn@spbu.ru

Поступила в редакцию 22.08.2022 г.

В окончательной редакции 22.08.2022 г.

Принята к публикации 02.09.2022 г.

Рассчитаны все ведущие вклады в значения релятивистских полных энергий и потенциалов ионизации основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра в интервале  $Z = 3 - 20$ , в том числе вклады электронных корреляций, релятивистские и квантово-электродинамические поправки, а также поправки на конечный размер ядра (полевой сдвиг) и на конечную массу ядра (эффект отдачи). Релятивистские расчеты выполнены методом конфигурационного взаимодействия в базе орбиталей Дирака-Фока-Штурма с использованием гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта.

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

DOI: 10.21883/OS.2022.10.53615.4056-22

## 1. Введение

Атом лития (Li) и литиеподобные ионы представляют собой одну из простейших атомных систем, различные характеристики которых могут быть рассчитаны с высокой степенью точности как для основного, так и для возбужденных состояний. Совместное использование теоретических и экспериментальных данных для Li-подобных ионов позволяет получать прецизионные значения магнитных дипольных и электрических квадрупольных моментов для различных изотопов, тестировать квантовую электродинамику связанных состояний и т.д. На сегодняшний момент выполнено большое количество высокоточных нерелятивистских расчетов основного состояния ( $1s^2 2s$ ), например, в работах [1,2] для атома лития и [3] для Li-подобных ионов. В работах [4-6] представлены компактные интерполяционные формулы для нерелятивистской энергии Li-подобных ионов как функции заряда  $Z$  в диапазоне  $Z = 3 - 20$ . Релятивистские расчеты энергий и потенциалов ионизации основного состояния атома Li и Li-подобных ионов с учетом конечного размера ядра (полевого сдвига), конечной массы ядра (эффекта отдачи), зависящего от частоты взаимодействия Брейта и квантово-электродинамических (КЭД) поправок представляют собой гораздо более сложную задачу. Релятивистские расчеты полной энергии атома Li были выполнены в работах [7-9]. Потенциал ионизации атома Li был рассчитан, например, в работе [10]. Релятивистские полные энергии

Li-подобных ионов были рассчитаны для следующих значений заряда ядра:  $Z = 3 - 10$  [7],  $Z = 10 - 92$  [11],  $Z = 20, 40, 60, 74, 83, 92$  [12]. Релятивистские расчеты потенциалов ионизации были выполнены в работах: в [7] для  $Z = 3 - 10$ , в [13] для  $Z = 10, 18, 50$ , в [12] для  $Z = 10 - 100$ , в [14] для  $Z = 6 - 17$  и в [9] для  $Z = 3 - 10$ . Кроме того, прецизионные КЭД расчеты энергий  $n = 2$  переходов в Li-подобных ионах в широком диапазоне значений заряда ядра были осуществлены, например, в работах [12,15,16].

Несмотря на то, что к настоящему времени было предпринято большое количество различных релятивистских расчетов Li-подобных ионов, надежные систематические данные об отдельных вклады в полные энергии и потенциалы ионизации для каждого значения  $Z$  в интервале  $Z = 3 - 20$  отсутствуют. В перечисленных выше работах эти вклады либо не приведены, либо получены для отдельных значений  $Z$ , не покрывающих полностью интервал  $Z = 3 - 20$ . В данной работе выполнены релятивистские расчеты полных энергий и потенциалов ионизации для  $Z = 3 - 20$ . А также рассчитаны отдельные вклады, а именно нерелятивистские энергии в рамках метода Хартри-Фока, нерелятивистские корреляционные вклады, релятивистские поправки, поправки на конечный размер ядра, вклады от отдачи ядра, КЭД поправки, вклады, связанные с зависимостью брейтовского взаимодействия от частоты. Все перечисленные поправки к нерелятивистской энергии представлены в удобной форме, которая дает возможность получить

представление об их абсолютной величине и о зависимости от заряда ядра. Аналогичные данные в том же диапазоне значений  $Z$  были получены нами ранее для He-подобных ионов [17]. В настоящей работе эти данные для He-подобных ионов использованы для вычисления потенциалов ионизации Li-подобных ионов и отдельных вкладов в их значения.

В данной работе использован релятивистский гамильтониан Дирака-Кулона-Брейта (Dirac-Coulomb-Breit — DCB). Для расчета полной энергии основного состояния трехэлектронных ионов и выделения отдельных вкладов применены методы Хартри-Фока (Hartree-Fock — HF), Дирака-Фока (Dirac-Fock — DF) и конфигурационного взаимодействия (configuration interaction — CI). Метод CI реализован в базе орбиталей Дирака-Фока-Штурма (Dirac-Fock-Sturm — DFS) [18,19] с применением концепции ограниченного активного пространства (restricted active space — RAS) [20]. Нерелятивистские и релятивистские расчеты осуществлены с использованием одного и того же одноэлектронного базиса и одинакового конфигурационного пространства, чтобы повысить точность выделения отдельных вкладов в полную энергию. Для потенциалов ионизации также приведено разбиение на отдельные вклады. Отметим, что все перечисленные выше поправки к потенциалам ионизации основного состояния были представлены ранее в работе [14], однако в более узком диапазоне значений  $Z$ .

Настоящая статья организована следующим образом. В разд. 2 дано краткое описание теоретических методов и подходов. Результаты расчетов подробно изложены в разд. 3. Использована атомная система единиц ( $\hbar = e = m = 1$ ).

## 2. Теория. Описание метода расчета

Кратко остановимся на описании методов расчета. Более детальное изложение может быть найдено в нашей работе [17], где были рассчитаны энергии основного состояния  $1s^2$  гелиеподобных ионов.

Релятивистские расчеты в данной работе выполнены с использованием гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта [21–23]

$$\hat{H}_{\text{DCB}} = \Lambda_+ [\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}} + \hat{H}_{\text{B}}] \Lambda_+. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{H}_{\text{D}} = \sum_i^N \hat{h}_{\text{D}}(i)$  — сумма одноэлектронных четырехкомпонентных гамильтонианов Дирака для  $N = 3$  электронов,

$$\hat{h}_{\text{D}}(i) = c(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_i) + c^2(\beta_i - 1) + V_{\text{n}}(r_i), \quad (2)$$

где  $c$  — скорость света,  $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$  — оператор импульса,  $\boldsymbol{\alpha}$  и  $\beta$  — матрицы Дирака,  $V_{\text{n}}(r)$  — потенциал ядра. Операторы  $\hat{H}_{\text{C}}$  и  $\hat{H}_{\text{B}}$  в (1) соответствуют оператору кулоновского отталкивания и частотно-независимому оператору

Брейта в кулоновской калибровке соответственно,

$$\hat{H}_{\text{C}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_{\text{B}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N B_{ij}(0) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}} \left[ -(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla_i)(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \nabla_j) r_{ij} \right], \quad (4)$$

где  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Оператор  $\Lambda_+$  представляет собой произведение одноэлектронных проекторов на пространство состояний положительного спектра некоторого одночастичного гамильтониана, в качестве которого в данной работе выбран оператор Дирака-Фока  $\hat{h}_{\text{DF}}$ . Поправку на зависимость оператора Брейта от частоты фотона в кулоновской калибровке можно записать в виде [24,25]

$$\Delta B_{ij}(\omega) = B_{ij}(\omega) - B_{ij}(0), \quad (5)$$

где

$$B_{ij}(\omega) = -\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j \frac{\cos(\omega r_{ij})}{r_{ij}} + (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla_i)(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos(\omega r_{ij}) - 1}{\omega^2 r_{ij}}. \quad (6)$$

Двухэлектронные матричные элементы оператора  $B(\omega)$  вычислены с использованием формулы [26]

$$\langle ab|B(\omega)|cd \rangle = \frac{1}{2} [\langle ab|B(\omega_{ac})|cd \rangle + \langle ab|B(\omega_{bd})|cd \rangle], \quad (7)$$

где индексы  $a, b, c, d$  нумеруют одноэлектронные орбитали и их энергии  $\varepsilon$ , а частоты в формуле (7) определяются выражениями  $\omega_{ac} = |\varepsilon_a - \varepsilon_c|/c$  и  $\omega_{bd} = |\varepsilon_b - \varepsilon_d|/c$ .

В данной работе метод CI для поиска многоэлектронной волновой функции  $\Psi$  основного состояния литиеподобного иона в приближении DCB реализован в базе орбиталей DFS [18,19,27]. Преимущество выбора данного базиса заключается в том, что все орбитали DFS имеют приблизительно один и тот же размер, а также одинаковую асимптотику на бесконечности. В расчетах, выполненных в данной работе, были учтены все однократные, двукратные и частично трехкратные возбуждения из основной конфигурации Li-подобных ионов.

С целью учета конечного размера ядра (полевого сдвига) в данной работе использована модель равномерно заряженного шара. Радиус шара связан со среднеквадратичным (root-mean-square — RMS) радиусом ядра  $\langle R^2 \rangle^{1/2}$  посредством соотношения  $R_{\text{sph}} = \sqrt{5/3} \langle R^2 \rangle^{1/2}$ . При этом поправка на конечный размер ядра определена как разность полных энергий, полученных в двух расчетах: в первом из них в качестве потенциала ядра  $V_{\text{n}}(r)$  использован потенциал равномерно заряженного шара, во втором — потенциал точечного ядра  $-Z/r$ .

Для учета вклада отдачи ядра в первом порядке по отношению масс электрона и ядра  $m/M$  использован релятивистский оператор массового сдвига  $\hat{H}_{MS}$  [18,28–30]. Величина массового сдвига рассчитана как среднее значение данного оператора с использованием многоэлектронной волновой функции  $\Psi$ , полученной методом CI.

Наконец, учет КЭД поправок в данной работе осуществлен с помощью модельного КЭД оператора, предложенного в работе [31]. Код программы для генерации оператора можно найти в работах [32,33]. Квантово-электродинамический вклад определен как разность двух полных энергий основного состояния Li-подобных ионов, полученных в рамках метода CI. В первом случае модельный оператор был добавлен к гамильтониану DCB и также был использован при определении проекторов  $\Lambda_+$  [34]. Во втором случае КЭД оператор не учитывался.

### 3. Результаты расчетов и обсуждение

В данной работе выполнены вариационные расчеты энергии основного состояния литиеподобных ионов в диапазоне значений заряда ядра  $Z = 3 - 20$  как в нерелятивистском, так и в релятивистском приближениях. В последнем случае использовано значение скорости света  $c = 137.035999139$  [35]. Во всех расчетах применен одноэлектронный базисный набор, включающий в себя орбитали DFS вплоть до значений орбитального квантового числа  $l_{max} = 5$  и главного квантового числа  $n_{max} = 30$ . Исследование сходимости полученных результатов по размеру базисного набора выявило, что данный базис является оптимальным для получения значений энергий с необходимой для целей данной работы степенью точности. Кроме того, была проведена экстраполяция результатов к  $l_{max} \rightarrow \infty$ , обсуждение соответствующей процедуры можно найти в работе [36].

В табл. 1 представлены результаты нерелятивистских расчетов полной энергии Li-подобных ионов для модели точечного ядра. Во втором столбце таблицы показана энергия  $E_{HF}$ , полученная в приближении Хартри-Фока. В третьем столбце приведено значение нерелятивистской корреляционной поправки  $\Delta_{corr}^{nr} = E^{nr} - E_{HF}$ , которая была рассчитана как разность энергий, полученных методом CI ( $E^{nr}$ ) и методом HF ( $E_{HF}$ ). Полученные в данной работе значения полных нерелятивистских энергий  $E^{nr}$  собраны в четвертом столбце. Для сравнения в пятом столбце представлены нерелятивистские полные энергии Li-подобных ионов из работы [3], которые были округлены до пяти значащих цифр после десятичной точки в атомных единицах. Полученные в данной работе нерелятивистские значения энергии основного состояния Li-подобных ионов демонстрируют хорошее согласие с результатами прецизионных расчетов. Данное сравнение дает возможность оценить абсолютную погрешность выполненных нами расчетов на основе нерелятивистского гамильтониана Шредингера как величину порядка 0.00001 а.е.

**Таблица 1.** Нерелятивистская энергия основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра  $Z = 3 - 20$ , использована модель точечного ядра.  $E_{HF}$  — энергия Хартри-Фока,  $\Delta_{corr}^{nr}$  — корреляционная энергия,  $E^{nr} = E_{HF} + \Delta_{corr}^{nr}$  — полная энергия, полученная нерелятивистским методом конфигурационного взаимодействия. Все значения приведены в атомных единицах

Z	$E_{HF}$	$\Delta_{corr}^{nr}$	$E^{nr}$	
			данная работа	[3]
3	-7.43273	-0.04533	-7.47806	-7.47806
4	-14.27740	-0.04736	-14.32476	-14.32476
5	-23.37599	-0.04861	-23.42460	-23.42461
6	-34.72606	-0.04945	-34.77551	-34.77551
7	-48.32685	-0.05004	-48.37689	-48.37690
8	-64.17805	-0.05049	-64.22854	-64.22854
9	-82.27949	-0.05084	-82.33033	-82.33034
10	-102.63111	-0.05112	-102.68223	-102.68223
11	-125.23284	-0.05135	-125.28419	-125.28419
12	-150.08466	-0.05153	-150.13619	-150.13620
13	-177.18654	-0.05170	-177.23823	-177.23824
14	-206.53846	-0.05183	-206.59030	-206.59030
15	-238.14043	-0.05195	-238.19238	-238.19239
16	-271.99243	-0.05206	-272.04448	-272.04449
17	-308.09445	-0.05215	-308.14660	-308.14660
18	-346.44649	-0.05223	-346.49872	-346.49873
19	-387.04855	-0.05230	-387.10085	-387.10086
20	-429.90062	-0.05237	-429.95299	-429.95300

*Примечание.* Данные из работы [3] округлены до пяти значащих цифр после десятичной точки.

В табл. 2 представлены различные поправки к нерелятивистской энергии  $E^{nr}$  основного состояния, полученные с использованием гамильтониана DCB. Во втором столбце табл. 2 указаны значения среднеквадратичных радиусов ядер в единицах ферми [37]. В третьем столбце показана релятивистская поправка  $\Delta_{DF}$  к энергии Хартри-Фока  $E_{HF}$ . Она рассчитана как разность энергий, полученных релятивистским методом DF и нерелятивистским методом HF,  $\Delta_{DF} = E_{DF} - E_{HF}$ . В четвертом столбце представлена релятивистская поправка  $\Delta_{corr}^{rel-nr}$  к корреляционной энергии  $\Delta_{corr}^{nr}$  из табл. 1. Под релятивистской корреляционной энергией мы здесь понимаем разницу между энергией  $E_{DC}^{rel}$ , рассчитанной методом CI с применением гамильтониана Дирака-Кулона (т.е. гамильтониана (1) без оператора  $\hat{H}_B$ ), и энергией Дирака-Фока  $E_{DF}$ ,  $\Delta_{corr}^{rel} = E_{DC}^{rel} - E_{DF}$ . Следовательно, релятивистская поправка к корреляционной энергии есть  $\Delta_{corr}^{rel-nr} = \Delta_{corr}^{rel} - \Delta_{corr}^{nr}$ . Данную поправку также можно выразить в виде  $\Delta_{corr}^{rel-nr} = (E_{DC}^{rel} - E^{nr}) - \Delta_{DF}$ . В следующем столбце представлено значение брейтовской поправки  $\Delta_{Breit}$ , определенной как отличие двух энергий, рассчитанных методом CI с учетом и без учета брейтовского взаимодействия (4), т.е.  $\Delta_{Breit} = E_{DCB}^{rel} - E_{DC}^{rel}$ . Все перечисленные выше поправки,  $\Delta_{DF}$ ,  $\Delta_{corr}^{rel-nr}$  и  $\Delta_{Breit}$ ,

**Таблица 2.** Поправки к нерелятивистской энергии  $E^{nr}$  основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра  $Z = 3 - 20$ . RMS — среднеквадратичный радиус ядра, выраженный в ферми [37].  $\Delta_{DF}$  — релятивистская поправка к энергии Хартри-Фока  $E_{HF}$ ,  $\Delta_{corr}^{rel-nr}$  — релятивистская поправка к корреляционной энергии  $\Delta_{corr}^{nr}$  (без вклада брейтовского взаимодействия),  $\Delta_{Breit}$  — вклад от брейтовского взаимодействия,  $\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] = \Delta_{DF} + \Delta_{corr}^{rel-nr} + \Delta_{Breit}$ . Поправки  $\Delta_{DF}$ ,  $\Delta_{corr}^{rel-nr}$  и  $\Delta_{Breit}$  рассчитаны для точечного ядра.  $\Delta_{FNS}$  — поправка на конечный размер ядра,  $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.] = \Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] + \Delta_{FNS}$ . Все значения поправок к энергии приведены в атомных единицах

Z	RMS	$\Delta_{DF}$	$\Delta_{corr}^{rel-nr}$	$\Delta_{Breit}$	$\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.]$	$\Delta_{FNS}$	$\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$
3	2.4440	-0.00081	0.00000	0.00017	-0.00063	0.00000	-0.00063
4	2.5190	-0.00282	0.00001	0.00050	-0.00231	0.00000	-0.00231
5	2.4060	-0.00734	0.00002	0.00111	-0.00622	0.00000	-0.00621
6	2.4702	-0.01590	0.00003	0.00209	-0.01379	0.00000	-0.01379
7	2.5582	-0.03042	0.00004	0.00353	-0.02686	0.00001	-0.02685
8	2.6991	-0.05317	0.00005	0.00551	-0.04762	0.00001	-0.04760
9	2.8976	-0.08682	0.00006	0.00813	-0.07863	0.00003	-0.07861
10	3.0055	-0.13440	0.00007	0.01148	-0.12286	0.00004	-0.12282
11	2.9936	-0.19934	0.00008	0.01564	-0.18363	0.00007	-0.18356
12	3.0570	-0.28544	0.00009	0.02070	-0.26465	0.00010	-0.26455
13	3.0610	-0.39688	0.00010	0.02676	-0.37002	0.00014	-0.36989
14	3.1224	-0.53825	0.00011	0.03390	-0.50424	0.00019	-0.50406
15	3.1889	-0.71453	0.00012	0.04222	-0.67219	0.00027	-0.67192
16	3.2611	-0.93108	0.00013	0.05180	-0.87914	0.00037	-0.87878
17	3.3654	-1.19368	0.00014	0.06274	-1.13080	0.00051	-1.13029
18	3.4274	-1.50851	0.00015	0.07513	-1.43324	0.00067	-1.43256
19	3.4349	-1.88218	0.00015	0.08906	-1.79297	0.00085	-1.79211
20	3.4776	-2.32169	0.00016	0.10462	-2.21691	0.00109	-2.21582

**Таблица 3.** Энергия основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра  $Z = 3 - 20$ ,  $A$  — массовое число.  $E^{nr}[p.n.]$  — нерелятивистская энергия, рассчитанная методом конфигурационного взаимодействия для модели точечного ядра;  $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$  — релятивистская поправка с учетом вклада брейтовского взаимодействия и полевого сдвига;  $E_{DCB}^{rel}[f.n.] = E^{nr}[p.n.] + \Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$  — полная релятивистская энергия, рассчитанная методом конфигурационного взаимодействия с использованием гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта и модели равномерно заряженного шара для ядерной плотности;  $\Delta_{\omega}$  — поправка на зависимость брейтовского взаимодействия от частоты;  $\Delta_{MS}$  — поправка на отдачу ядра;  $\Delta_{QED}$  — поправка на КЭД эффекты;  $E_{tot} = E_{DCB}^{rel} + \Delta_{\omega} + \Delta_{MS} + \Delta_{QED}$  — полная энергия основного состояния с учетом всех перечисленных поправок. Все значения приведены в атомных единицах

Z	A	$E^{nr}[p.n.]$	$\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$	$E_{DCB}^{rel}[f.n.]$	$\Delta_{\omega}$	$\Delta_{MS}$	$\Delta_{QED}$	$E_{tot}$	$E_{tot}$
3	7	-7.47806	-0.00063	-7.47869	0.00000	0.00061	0.00012	-7.47797	
4	9	-14.32476	-0.00231	-14.32707	0.00000	0.00090	0.00035	-14.32582	
5	11	-23.42460	-0.00621	-23.43082	0.00000	0.00120	0.00083	-23.42879	
6	12	-34.77551	-0.01379	-34.78929	0.00000	0.00163	0.00164	-34.78604	
7	14	-48.37689	-0.02685	-48.40375	0.00000	0.00193	0.00290	-48.39892	
8	16	-64.22854	-0.04760	-64.27614	-0.00001	0.00224	0.00472	-64.26918	
9	19	-82.33033	-0.07861	-82.40894	-0.00001	0.00241	0.00725	-82.39929	
10	20	-102.68223	-0.12282	-102.80504	-0.00001	0.00286	0.01060	-102.79160	-102.79472 <sup>b</sup>
11	23	-125.28419	-0.18356	-125.46775	-0.00002	0.00303	0.01492	-125.44982	
12	24	-150.13619	-0.26455	-150.40074	-0.00003	0.00347	0.02034	-150.37696	
13	27	-177.23823	-0.36989	-177.60812	-0.00004	0.00364	0.02701	-177.57751	
14	28	-206.59030	-0.50405	-207.09434	-0.00005	0.00409	0.03506	-207.05524	
15	31	-238.19238	-0.67192	-238.86430	-0.00006	0.00426	0.04466	-238.81544	-238.81573 <sup>a</sup> -238.82049 <sup>b</sup>
16	32	-272.04448	-0.87878	-272.92326	-0.00008	0.00471	0.05596	-272.86267	-272.86285 <sup>a</sup>
17	35	-308.14660	-1.13029	-309.27689	-0.00010	0.00487	0.06909	-309.20302	-309.20310 <sup>a</sup>
18	40	-346.49872	-1.43256	-347.93128	-0.00012	0.00479	0.08423	-347.84238	-347.84235 <sup>a</sup>
19	39	-387.10085	-1.79211	-388.89297	-0.00014	0.00549	0.10152	-388.78610	-388.78596 <sup>a</sup>
20	40	-429.95299	-2.21582	-432.16881	-0.00017	0.00594	0.12111	-432.04192	-432.04166 <sup>a</sup> -432.04940 <sup>b</sup>

Примечание. <sup>a</sup> Indelicato, Desclaux [40]. <sup>b</sup> Chen et al. [11].

**Таблица 4.** Потенциалы ионизации основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра  $Z = 3 - 20$  (без учета КЭД вкладов и поправок на отдачу ядра).  $IP^{nr} = IP_{HF} + \delta_{corr}^{nr}$  — потенциал ионизации для точечного ядра, полученный в рамках нерелятивистского метода конфигурационного взаимодействия, где  $IP_{HF}$  — потенциал ионизации в приближении Хартри-Фока;  $\delta_{corr}^{nr}$  — нерелятивистский корреляционный вклад;  $\delta_{DF}$  — релятивистская поправка к  $IP_{HF}$ ;  $\delta_{corr}^{rel-nr}$  — релятивистская поправка к корреляционному вкладу  $\delta_{corr}^{nr}$  (без учета брейтовского взаимодействия);  $\delta_{Breit}$  — вклад брейтовского взаимодействия. Поправки  $\delta_{DF}$ ,  $\delta_{corr}^{rel-nr}$  и  $\delta_{Breit}$  рассчитаны для модели точечного ядра,  $\delta_{FNS}$  — поправка на конечный размер ядра,  $IP_{DCB}^{rel} = IP^{nr} + \delta_{DF} + \delta_{corr}^{rel-nr} + \delta_{Breit} + \delta_{FNS}$  — релятивистский потенциал ионизации для протяженного ядра, полученный на основе гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта. Все значения приведены в атомных единицах

Z	$IP^{nr}$	$\delta_{DF}$	$\delta_{corr}^{rel-nr}$	$\delta_{Breit}$	$\delta_{FNS}$	$IP_{DCB}^{rel}$	$IP_{DCB}^{rel}$
3	0.19815	0.00002	-0.00001	-0.00001	0.00000	0.19815	0.19809 <sup>b</sup>
4	0.66919	0.00012	-0.00001	-0.00003	0.00000	0.66928	0.66923 <sup>b</sup>
5	1.39363	0.00043	-0.00001	-0.00007	0.00000	1.39399	1.39396 <sup>b</sup>
6	2.36926	0.00111	0.00000	-0.00013	0.00000	2.37024	2.37026 <sup>a</sup> 2.37022 <sup>b</sup>
7	3.59545	0.00238	0.00000	-0.00023	0.00000	3.59760	3.59763 <sup>a</sup> 3.59760 <sup>b</sup>
8	5.07194	0.00452	0.00000	-0.00037	0.00000	5.07609	5.07612 <sup>a</sup> 5.07610 <sup>b</sup>
9	6.79862	0.00784	0.00000	-0.00057	0.00000	6.80590	6.80594 <sup>a</sup> 6.80591 <sup>b</sup>
10	8.77542	0.01272	0.00000	-0.00082	0.00000	8.78732	8.78737 <sup>a</sup> 8.78733 <sup>b</sup>
11	11.00230	0.01957	0.00000	-0.00114	0.00000	11.02074	11.02081 <sup>a</sup> 11.02076 <sup>b</sup>
12	13.47924	0.02888	0.00000	-0.00153	-0.00001	13.50659	13.50668 <sup>a</sup>
13	16.20623	0.04116	0.00001	-0.00201	-0.00001	16.24538	16.24549 <sup>a</sup> 16.24541 <sup>b</sup>
14	19.18325	0.05701	0.00001	-0.00258	-0.00001	19.23767	19.23780 <sup>a</sup>
15	22.41029	0.07704	0.00001	-0.00325	-0.00001	22.48408	22.48423 <sup>a</sup> 22.48410 <sup>b</sup>
16	25.88736	0.10195	0.00001	-0.00402	-0.00002	25.98528	25.98545 <sup>a</sup>
17	29.61444	0.13247	0.00002	-0.00491	-0.00003	29.74199	29.74219 <sup>a</sup> 29.74201 <sup>b</sup>
18	33.59154	0.16941	0.00002	-0.00593	-0.00003	33.75500	
19	37.81864	0.21361	0.00002	-0.00708	-0.00004	38.02516	
20	42.29576	0.26598	0.00003	-0.00836	-0.00006	42.55335	42.55334 <sup>b</sup>

Примечание. <sup>a</sup> Yerokhin et al. [14]. <sup>b</sup> Johnson et al. [43]. Данные работы [43] приведены с учетом частотной зависимости брейтовского взаимодействия.

рассчитаны для модели точечного ядра, [p.n.]. В шестом столбце в табл. 2 показана итоговая релятивистская поправка к нерелятивистской энергии  $E^{nr}[p.n.]$  основного состояния Li-подобных ионов для точечного ядра  $\Delta_{DCB}^{rel}[p.n.] = E_{DCB}^{rel}[p.n.] - E^{nr}[p.n.]$ . Данная поправка есть сумма вкладов  $\Delta_{DF}$ ,  $\Delta_{corr}^{rel-nr}$  и  $\Delta_{Breit}$ . В предпоследнем столбце приведено значение полевого сдвига  $\Delta_{FNS}$ . Данный вклад определен как разность энергий, рассчитанных релятивистским методом CI с учетом и без учета конечного размера ядра. Таким образом,  $\Delta_{FNS} = E_{DCB}^{rel}[f.n.] - E_{DCB}^{rel}[p.n.]$ . Наконец, в последнем столбце в табл. 2 дана итоговая поправка  $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$  к нерелятивистской энергии  $E^{nr}[p.n.]$  с учетом эффекта, связанного с конечным размером ядра. Данная поправка равна  $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.] = E_{DCB}^{rel}[f.n.] - E^{nr}[p.n.]$ , или иначе ее можно выразить 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 CI с использованием гамильтони-

ана DCB, представлены в пятом столбце табл. 3. Эту энергию можно выразить как сумму нерелятивистской энергии  $E^{nr}[p.n.]$  и итоговой релятивистской поправки из табл. 2, 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 повторно приведены нерелятивистские энергии  $E^{nr}[p.n.]$  и поправки  $\Delta_{DCB}^{rel}[f.n.]$  соответственно. Помимо того, необходимо также учесть зависимость брейтовского взаимодействия от частоты в кулоновской калибровке ( $\Delta_{\omega}$ ), эффект отдачи ядра ( $\Delta_{MS}$ ) и КЭД поправки ( $\Delta_{QED}$ ). Значения соответствующих вкладов представлены в шестом, седьмом и восьмом столбцах табл. 3 соответственно. Изотоп для каждого из ионов указан во втором столбце. Массы изотопов, необходимые для расчета массового сдвига  $\Delta_{MS}$ , взяты из компиляции [38] в согласии с [39]. В предпоследнем столбце табл. 3 представлены полные релятивистские энергии  $E_{tot} = E_{DCB}^{rel}[f.n.] + \Delta_{\omega} + \Delta_{MS} + \Delta_{QED}$ . Основная погрешность полученных значений энергии

**Таблица 5.** Потенциалы ионизации основного состояния литиеподобных ионов с зарядом ядра  $Z = 3 - 20$ .  $IP_{DCB}^{rel}$  — релятивистский потенциал ионизации для протяженного ядра, полученный на основе гамильтониана DCB;  $\delta_\omega$  — поправка на зависимость брейтовского взаимодействия от частоты,  $\delta_{MS}$  — поправка на отдачу ядра,  $\delta_{QED}$  — поправка на квантово-электродинамические эффекты;  $IP_{tot} = IP_{DCB}^{rel} + \delta_\omega + \delta_{MS} + \delta_{QED}$  — полный потенциал ионизации основного состояния. Все значения приведены в атомных единицах

$Z$	$IP_{DCB}^{rel}$	$\delta_\omega$	$\delta_{MS}$	$\delta_{QED}$	$IP_{tot}$	$IP_{tot}$
3	0.19815	0.00000	-0.00002	0.00000	0.19813	0.19816 <sup>b</sup> 0.19814 <sup>c</sup> 0.19805 <sup>d</sup>
4	0.66928	0.00000	-0.00004	-0.00001	0.66923	0.66929 <sup>b</sup>
5	1.39399	0.00000	-0.00007	-0.00002	1.39389	1.39399 <sup>b</sup> 1.39386 <sup>d</sup>
6	2.37024	0.00000	-0.00011	-0.00005	2.37007	2.37010(05) <sup>a</sup> 2.37022 <sup>b</sup>
7	3.59760	0.00000	-0.00014	-0.00010	3.59735	3.59738(05) <sup>a</sup> 3.59755 <sup>b</sup>
8	5.07609	-0.00001	-0.00018	-0.00019	5.07572	5.07577(05) <sup>a</sup> 5.07599(01) <sup>b</sup>
9	6.80590	-0.00001	-0.00020	-0.00030	6.80538	6.80544(06) <sup>a</sup> 6.80572(01) <sup>b</sup>
10	8.78732	-0.00002	-0.00025	-0.00046	8.78659	8.78666(06) <sup>a</sup> 8.78703(02) <sup>b</sup> 8.78700 <sup>d</sup> 8.78657 <sup>e</sup>
11	11.02074	-0.00002	-0.00027	-0.00068	11.01977	11.01987(08) <sup>a</sup> 11.01975 <sup>e</sup>
12	13.50659	-0.00003	-0.00031	-0.00095	13.50529	13.50542(09) <sup>a</sup> 13.50530 <sup>e</sup>
13	16.24538	-0.00004	-0.00034	-0.00130	16.24371	16.24386(10) <sup>a</sup> 16.24373 <sup>e</sup>
14	19.23767	-0.00005	-0.00038	-0.00172	19.23552	19.23569(11) <sup>a</sup> 19.23555 <sup>e</sup>
15	22.48408	-0.00007	-0.00040	-0.00224	22.48137	22.48159(12) <sup>a</sup> 22.48144 <sup>e</sup>
16	25.98528	-0.00009	-0.00045	-0.00285	25.98189	25.98215(15) <sup>a</sup> 25.98197 <sup>e</sup>
17	29.74199	-0.00010	-0.00047	-0.00358	29.73784	29.73815(15) <sup>a</sup> 29.73794 <sup>e</sup>
18	33.75500	-0.00013	-0.00047	-0.00443	33.74998	33.75011 <sup>e</sup>
19	38.02516	-0.00015	-0.00054	-0.00540	38.01907	38.01921 <sup>e</sup>
20	42.55335	-0.00018	-0.00059	-0.00652	42.54606	42.54621 <sup>e</sup>

Примечание. <sup>a</sup> Yerokhin *et al.* [14]. <sup>b</sup> Chung [7]. <sup>c</sup> King *et al.* [41]. <sup>d</sup> Ishikawa, Koc [42]. <sup>e</sup> Sapirstein, Cheng [12].

определяется приближением, использованным для расчета КЭД вкладов, и, в частности, неучтенными радиационными поправками высших порядков. В последнем столбце табл. 3 представлены полные энергии основного состояния Li-подобных ионов, взятые из работ [11,40]. Вычисленные нами значения  $E_{tot}$  демонстрируют неплохое согласие с результатами предыдущих расчетов.

Кроме того, были выполнены расчеты потенциалов ионизации (IP) основного состояния литиеподобных ионов. Потенциал ионизации может быть получен как разность полных энергий состояния  $1s^2$  He-подобного иона и состояния  $1s^2 2s$  соответствующего Li-подобного иона. Энергии He-подобных ионов, а также отдельные вклады в них взяты из нашей предыдущей работы [17].

В табл. 4 во втором столбце представлены значения нерелятивистских потенциалов ионизации основного состояния литиеподобных ионов  $IP^{nr}[p.n.] = E_{1s^2}^{nr}[p.n.] - E^{nr}[p.n.]$ , полученные с учетом корреляционных эффектов для модели точечного ядра. В последующих столбцах табл. 4, с третьего по шестой, приведены значения релятивистской поправки в приближении Дирака-Фока,  $\delta_{DF} = \Delta_{DF,1s^2} - \Delta_{DF}$ , релятивистской поправки к корреляционному вкладу,  $\delta_{corr}^{rel-nr} = \Delta_{corr,1s^2}^{rel-nr} - \Delta_{corr}^{rel-nr}$ , вклада брейтовского взаимодействия,  $\delta_{Breit} = \Delta_{Breit,1s^2} - \Delta_{Breit}$ , и поправки на конечный размер ядра (полевой сдвиг),  $\delta_{FNS} = \Delta_{FNS,1s^2} - \Delta_{FNS}$ , соответственно. В седьмом столбце табл. 4 представлены полные значения потенциалов ионизации  $IP_{DCB}^{rel}$ ,

**Таблица 6.** Вклады от брейтовского взаимодействия в энергию  $\Delta_{\text{Breit}}$  и потенциал ионизации  $\delta_{\text{Breit}}$  основного состояния литиеподобных ионов. Значения приведены в атомных единицах

Z	$\Delta_{\text{Breit}}$		$\delta_{\text{Breit}}$	
	данная работа	другие работы	данная работа	[14]
3	0.00017	0.00016 <sup>b</sup>	-0.00001	-
4	0.00050	-	-0.00003	-
5	0.00111	0.00110 <sup>b</sup>	-0.00007	-
6	0.00209	-	-0.00013	-0.00011
7	0.00353	-	-0.00023	-0.00020
8	0.00551	-	-0.00037	-0.00034
9	0.00813	-	-0.00057	-0.00053
10	0.01148	0.01146 <sup>a</sup> 0.01150 <sup>b</sup>	-0.00082	-0.00078
11	0.01564	-	-0.00114	-0.00107
12	0.02070	-	-0.00153	-0.00145
13	0.02676	-	-0.00201	-0.00191
14	0.03390	-	-0.00258	-0.00247
15	0.04222	0.04219 <sup>a</sup> 0.04252 <sup>c</sup>	-0.00325	-0.00312
16	0.05180	-	-0.00402	-0.00387
17	0.06274	-	-0.00491	-0.00474
18	0.07513	-	-0.00593	-
19	0.08906	-	-0.00708	-
20	0.10462	0.10459 <sup>a</sup>	-0.00836	-

Примечание. <sup>a</sup> Chen *et al.* [11]. <sup>b</sup> Ishikawa, Koc [42]. <sup>c</sup> Indelicato, Declaux [40].

полученные методом CI с использованием гамильтониана DCB, которые можно выразить также в виде:  $IP_{\text{DCB}}^{\text{rel}} = IP^{\text{nr}} + \delta_{\text{DF}} + \delta_{\text{corr}}^{\text{rel}} + \delta_{\text{Breit}} + \delta_{\text{FNS}}$ . В последнем столбце таблицы даны значения потенциалов ионизации, полученные в работах [14] и [43]. Как видно из табл. 4, рассчитанные нами значения потенциалов ионизации  $IP_{\text{DCB}}^{\text{rel}}$  хорошо совпадают с систематическими данными из работы [14]. Относительная разность остается на уровне 0.001%.

Наконец, в табл. 5 показаны вклады в потенциалы ионизации, связанные с частотной зависимостью брейтовского взаимодействия,  $\delta_{\omega} = \Delta_{\omega, 1s^2} - \Delta_{\omega}$ , эффектом отдачи ядра,  $\delta_{\text{MS}} = \Delta_{\text{MS}, 1s^2} - \Delta_{\text{MS}}$ , и КЭД поправками,  $\delta_{\text{QED}} = \Delta_{\text{QED}, 1s^2} - \Delta_{\text{QED}}$ . Во втором столбце для удобства еще раз даны значения потенциалов ионизации  $IP_{\text{DCB}}^{\text{rel}}$ , которые были получены релятивистским методом CI с использованием гамильтониана DCB и с учетом конечного размеров ядра. Итоговые значения потенциалов ионизации  $IP_{\text{tot}}^{\text{rel}} = IP_{\text{DCB}}^{\text{rel}} + \delta_{\omega} + \delta_{\text{MS}} + \delta_{\text{QED}}$  представлены в шестом столбце. В седьмом столбце приведены значения, взятые из работ [7,14,41,42]. Наибольший интерес представляет сравнение полученных нами данных с результатами систематических расчетов, выполненных в работе [14]. Как можно видеть, для величин  $IP_{\text{tot}}^{\text{rel}}$  наблюдается хорошее согласие. Имеющееся тем не менее небольшое расхождение обусловлено вкладом

брейтовского взаимодействия  $\delta_{\text{Breit}}$ . Таблица 6 позволяет сравнить рассчитанные нами вклады в полную энергию и потенциалы ионизации от брейтовского взаимодействия с соответствующими данными из работ [11,14,40,42]. Значения  $\delta_{\text{Breit}}$  для потенциалов ионизации из работы [14] демонстрируют чуть большее расхождение с нашими результатами, нежели аналогичные вклады  $\Delta_{\text{Breit}}$  для полных энергий из работ [11,40,42]. Так же как и для полных энергий  $E_{\text{tot}}$ , основной источник погрешности для полученных в данной работе значений потенциалов ионизации  $IP_{\text{tot}}$  заключается в приближенном способе учета КЭД вкладов.

#### 4. Заключение

В данной работе выполнены систематические расчеты полных энергий и потенциалов ионизации основного состояния Li-подобных ионов с зарядом ядра в интервале  $Z = 3 - 20$ . Помимо полных значений представлены также отдельные вклады от различных эффектов. А именно рассчитаны нерелятивистские энергии в приближении Хартри-Фока, нерелятивистские корреляционные вклады, релятивистские поправки в приближении Дирака-Фока, релятивистские поправки к нерелятивистским корреляционным вкладам, вклады брейтовского взаимодействия с учетом частотной зависимости, квантово-электродинамические поправки, поправки, связанные с конечными размером и массой ядра. Форма представления результатов позволяет использовать как полные значения энергий и потенциалов ионизации, так и вклады от отдельных эффектов.

Проведено сравнение значений полных энергий и потенциалов ионизации, рассчитанных в данной работе на основе гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта, а также итоговых значений, полученных с учетом отдачи ядра, КЭД эффектов и зависимости брейтовского взаимодействия от частоты, с данными предыдущих релятивистских расчетов. Обнаружено хорошее согласие.

#### Финансирование работы

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

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] Z.C. Yan, G.W.F. Drake. Phys. Rev. A, **52**, 3711 (1995).
- [2] M. Puchalski, K. Pachucki. Phys. Rev. A, **73**, 022503 (2006).
- [3] Z.C. Yan, M. Tambasco, G.W.F. Drake. Phys. Rev. A, **57**, 1652 (1998).
- [4] A.V. Turbiner, J.C. Lopez Vieyra, H. Olivares Pilon. arXiv: 1707.07547 [physics.atom-ph] (2017).

- [5] A.V. Turbiner, J.C. Lopez Vieyra, H. Olivares-Pilón. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **409**, 167908 (2019).
- [6] A.V. Turbiner, J.C. Lopez Vieyra, J.C. del Valle, D.J. Nader. *Int. J. Quantum Chem.*, **121**, 26586 (2021).
- [7] K.T. Chung. *Phys. Rev. A*, **44**, 5421 (1991).
- [8] D.K. McKenzie, G.W.F. Drake. *Phys. Rev. A*, **44**, 6973 (1991).
- [9] W.P. Earwood, S.R. Davis. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **54**, 215001 (2021).
- [10] S.A. Blundell, W.R. Johnson, Z.W. Liu, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **40**, 2233 (1989).
- [11] M.H. Chen, K.T. Cheng, W.R. Johnson, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **52**, 266 (1995).
- [12] J. Sapirstein, K.T. Cheng. *Phys. Rev. A*, **83**, 012504 (2011).
- [13] E. Eliav, U. Kaldor, Y. Ishikawa. *Chem. Phys. Lett.*, **82**, 222 (1994).
- [14] V.A. Yerokhin, A. Surzhykov, A. Müller. *Phys. Rev. A*, **96**, 042505 (2017).
- [15] Y.S. Kozhedub, A.V. Volotka, A.N. Artemyev, D.A. Glazov, G. Plunien, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, Th. Stöhlker. *Phys. Rev. A*, **81**, 042513 (2010).
- [16] V.A. Yerokhin, M. Puchalski, K. Pachucki. *Phys. Rev. A*, **102**, 042816 (2020).
- [17] I.I. Tupitsyn, S.V. Bezborodov, A.V. Malyshev, D.V. Mironova, V.M. Shabaev. *Opt. Spectrosc.*, **128**, 21 (2020).
- [18] I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev, J.R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, J. Ullrich. *Phys. Rev. A*, **68**, 022511 (2003).
- [19] 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**, 062503 (2005).
- [20] J. Olsen, B.O. Roos, P. Jørgensen, H.J.A. Jensen. *J. Chem. Phys.*, **89**, 2185 (1988).
- [21] R.N. Faustov. *Theor. Math. Phys.*, **3**, 478 (1970).
- [22] J. Sucher. *Phys. Rev. A*, **22**, 348 (1980).
- [23] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, **24**, 1167 (1981).
- [24] J.B. Mann, W.R. Johnson. *Phys. Rev. A*, **4**, 41 (1971).
- [25] I.P. Grant, N.C. Pyper. *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.*, **9**, 761 (1976).
- [26] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, **5**, 2395 (1972).
- [27] V.F. Bratzev, G.B. Deyneka, I.I. Tupitsyn. *Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser.*, **41**, 173 (1977).
- [28] V.M. Shabaev. *Theor. Math. Phys.*, **63**, 588 (1985).
- [29] V.M. Shabaev. *Sov. J. Nucl. Phys.*, **47**, 69 (1988).
- [30] C.W.P. Palmer. *J. Phys. B: At. Mol.*, **20**, 5987 (1987).
- [31] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Phys. Rev. A*, **88**, 012513 (2013).
- [32] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Comput. Phys. Commun.*, **189**, 175 (2015).
- [33] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. *Comput. Phys. Commun.*, **223**, 69 (2018).
- [34] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, D.V. Mironova. *Phys. Rev. A*, **101**, 052502 (2020).
- [35] P.J. Mohr, D.B. Newell, B.N. Taylor. *Rev. Mod. Phys.*, **88**, 035009 (2016).
- [36] M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, I.I. Tupitsyn, A.V. Malyshev, D.A. Glazov, G. Plunien, V.M. Shabaev. *Phys. Rev. A*, **99**, 032505 (2019).
- [37] I. Angeli, K.P. Marinova, *At. Data Nucl. Data Tables.*, **99**, 69 (2013).
- [38] M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, B. Pfeiffer. *Chin. Phys. C*, **36**, 1603 (2012).
- [39] V.A. Yerokhin, V.M. Shabaev. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **44**, 033103 (2015).
- [40] P. Indelicato, J.P. Desclaux. *Phys. Rev. A*, **42**, 5139 (1990).
- [41] F.W. King, D.G. Ballegeer, D.J. Larson, P.J. Pelzl, S.A. Nelson, T.J. Prosa, B.M. Hinaus. *Phys. Rev. A*, **58**, 3597 (1998).
- [42] Y. Ishikawa, K. Koc. *Phys. Rev. A*, **53**, 3966 (1996).
- [43] W.R. Johnson, S.A. Blundell, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **37**, 2764 (1988).