СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

УДК 541.1

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ТЕРМОВ АТОМА ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ: ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД В БАЗИСЕ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ СПИНОРОВ

© 2023 г. Г. К. Озеров^{*a*,*}, А. А. Бодунов^{*b*}, Д. С. Безруков^{*a*,*b*}

^аСколковский институт науки и технологий, Москва, Россия ^bМГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия *e-mail: ozerow.georgiy.c@yandex.ru Поступила в редакцию 30.11.2022 г. После доработки 06.12.2022 г. Принята к публикации 07.12.2022 г.

С применением подхода неполной диагонализации гамильтониана Дирака в базисе состояний невозмущенного атома были получены решения уравнения Дирака атома водорода в постоянном однородном магнитном поле для широкого диапазона изменения напряженности. Полученные конечные выражения для матричных элементов оператора возмущения произвольного водородоподобного атома были использованы для оценки действия операторов в методе минимизации функционала дисперсии энергии. Реализованный подход позволил дать прецизионные и хорошо согласующиеся с результатами предшествующих исследований оценки энергии основного состояния и значения энергий переходов. Было показано, что предложенная техника минимизации функционала дисперсии энергии допускает приложения к методам неполной диагонализации операторов для произвольно выбранного блока целевых состояний при условии корректности исходного приближения

Ключевые слова: атом водорода, магнитное поле, метод Ланцоша **DOI:** 10.31857/S0044453723070208, **EDN:** SLRJBT

Исследование свойств молекул и атомов в магнитном поле является зарекомендовавшим себя направлением спектроскопических исследований [1], ведущее начало с открытия Зееманом расщепления атомных линий в магнитном поле [2]. В частности, свойства водородоподобных атомов в сильном магнитном поле представляют интерес, мотивированный приложениями в атомной спектроскопии [3-7] и физике твердого тела [8-10], а также рядом направлений астрофизических исследований [11-13], включающих изучение межзвездного вещества, низкотемпературной плазмы звездных корон и атмосфер компактных объектов. Описание вещества в последних, помимо учета эффектов общего релятивизма (например, как это сделано в [14]), требует рассмотрения сверхсильных магнитных полей: для белых карликов характерны значения напряженностей порядка 10⁶—10⁹ Гс, для нейтронных звезд порядка 10¹³ Гс [1, 15–17] и у магнитаров эта величина имеет порядок 10¹⁵ Гс [18, 19]. При таких напряженностях вклады в разложениях квантовой электродинамики для гамильтониана, обусловленные взаимодействием с внешним магнитным полем, становятся сопоставимыми или доминирующими над кулоновскими, определяя физикохимические свойства вещества. Эта особенность типичная в астрономических приложениях делает перспективным развитие направлений релятивистской квантовой химии, включающих соответствующие амплитудные слагаемые в эффективных операторах одно- и двухчастичных взаимодействий.

В связи с отмеченными приложениями и доминирующим вкладом водорода в составе звездных атмосфер исследование спектров атомарного водорода в магнитном поле представляет существенный интерес. Несмотря на видимую простоту соответствующая проблема оказывается в ряду классических аналитически нерешаемых задач за счет сильного падения симметрии при совместном наложении кулоновского и однородного магнитного полей как в релятивистском, так и в нерелятивистском случаях. В связи с этим спектральная проблема водорода активно исследовалась вариационными методами, подходами теории возмущений и в адиабатическом приближении как в нерелятивистском [20-29], так и в релятивистском [30–39] случаях. Для последнего из перечисленного ряда подходов прецизионные

оценки энергий низших состояний были получены в рамках подхода прямой теории возмушений [33] для слабых полей и вариационными подходами [35, 36, 39] также в области средних и больших напряженностей. Однако, при рассмотрении уравнения Дирака вариационные методы сталкиваются с проблемой неограниченности гамильтониана снизу. По этой причине соответствующие исследования затрагивают проблему спектра квадрата или обратного к гамильтониану Дирака либо специальные вариационные оценки, использующие функционал дисперсии энергии [36]. Такое рассмотрение позволяет с высокой точностью воспроизводить энергии целевых электронных состояний, но препятствуют использованию полученных собственных векторов для расчета одночастичных свойств или, в дальнейшем, конструировании базисов многочастичных решений для случая средних и сильных полей. Естественный способ преодолеть этот недостаток может быть найден в построении приближения к результатам полной диагонализации гамильтониана на подходящем базисе состояний в невозмущенном пределе Ландау [40] или Кулона [41]. В обоих случаях функции изначально включают необходимые релятивистские поправки и позволяют обойти проблему вариационного коллапса решений [42]. Использование базиса решений кеплеровой задачи обладает рядом преимуществ в отношении приложений теории к четырехкомпонентным расчетам атомов, для которых двухэлектронные интегралы операторов Брейта или Кулона-Гонта [43] допускают простую аналитическую оценку. К недостаткам данного подхода можно отнести вычислительную погрешность оценок ввиду численных проблем с расчетом матрицы оператора возмущений.

Цель настоящей работы состояла в решении спектральной проблемы оператора Дирака водорода во внешнем магнитном поле в диапазоне малых и средних напряженностей с применением вариационного метода в базисе решений гамильтониана Дирака—Кулона. При этом особое внимание уделялось точности оценки матричных элементов зависящих от поля слагаемых гамильтониана на решениях релятивистского водорода, которые характеризуются численными проблемами при больших значениях моментов и главных квантовых чисел.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Электронный гамильтониан Дирака—Кулона для движения электрона с координатой $\mathbf{r} = r\hat{r}$ в поле заряда Z с учетом внешнего магнитного поля $\mathbf{B} = (0, 0, B) = B\hat{z}$ в атомных единицах дается выражением

ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ том 97 № 7 2023

$$H = \begin{pmatrix} \frac{-Z}{r} + c^2 & c\sigma\left(p + \frac{1}{c}A\right) \\ c\sigma\left(p + \frac{1}{c}A\right) & \frac{-Z}{r} - c^2 \end{pmatrix} = c\alpha\left[p + \frac{1}{c}A\right] + \beta c^2 - \frac{Z}{r} = H_0 + H_1$$

где c = 137.0359895 а.е. — скорость света, r = |r|, \hat{r}, \hat{z} — единичные векторы в направлении соответствующей координаты, через σ обозначены матрицы Паули, $\alpha = \sigma_x \otimes \sigma$, $\beta = \sigma_z \otimes 1$. Гамильтониан невозмущенного атома

$$H_0 = c(\alpha \hat{r}) \left(p_r + \frac{\beta K}{r} \right) + \beta c^2 - \frac{Z}{r}$$

включает оператор момента Дирака $K = \beta [\Sigma L + 1]$, в котором $\Sigma = 1 \otimes \sigma$, и $p_r = -i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$. При выборе калибровки f = 0 векторного потенциала $A = \frac{1}{2}B \times r + \nabla f$ возмущение приобретает форму

$$H_1 = \alpha A = \sigma_x \otimes \frac{1}{2} Br \sigma(\hat{z} \times \hat{r}) =$$
$$= \sigma_x \otimes \frac{1}{2} Br \sin \theta(\sigma \hat{\phi}),$$

где **θ** и **φ** – сферические углы.

Биспиноры невозмущенной проблемы имеют общую форму [41]

$$\Psi_e = \begin{pmatrix} F \chi_{\kappa \mu} \\ i G \chi_{-\kappa \mu} \end{pmatrix},$$

в которой угловая часть является собственными функциями оператора момента Дирака *K* и проекции полного момента на направление поля $J_z = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$ с собственными значениями –к и µ. С учетом действия $(\sigma \hat{r})\chi_{\kappa\mu} = -\chi_{-\kappa\mu}$ для кулоновой задачи легко получить радиальные уравнения, решениями которых оказываются хорошо известные функции *F* и *G*, принимающие в области дискретного спектра форму

$$r^{-1} \sqrt{\frac{Z}{2}} \frac{(1 \pm E_{0,n\kappa}/c^2)(n+2s)n!}{n^{*2}(n^*-\kappa)(n+2s-1)!} x^s e^{-x/2} \times \left[L_{n-1}^{2s}(x) \pm \frac{\kappa-n^*}{n+2s} L_n^{2s}(x) \right]$$

для *F* и *G* соответственно, где через L_n^{2s} , L_{n-1}^{2s} обозначены полиномы Лагерра, $s = s(\kappa) = \sqrt{\kappa^2 - Z^2/c^2}$, $n = n(n, \kappa) = \sqrt{n^2 + 2ns + \kappa^2}$, x = 2Zr/n, а невозмущенные энергии имеют вид $E_{0,n\kappa} = (n + s)/n$.

Включение магнитного поля приводит к взаимодействию между блоками состояний с к и к' = $\kappa, -\kappa + 1, -\kappa - 1$, оставляя от исходной симметрии кеплеровой задачи [44] сохранение проекции момента и четности $(-1)^{\pi}$. Последнее приводит к разделению пространств с данным μ на подпространства с $\pi = 0, 1$, отвечающие базисам с $\kappa = (-1)^{\pi+n} n$ для натуральных *n*. Наконец, набор электронных решений ψ_e необходимо дополнить функциями $\psi_p = \beta \alpha_2 \psi_e$, в которых учтено обращение знака моментов к, μ , и знака заряда в соответствующем блоке невозмущенного гамильтониана.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Искомые решения спектральной проблемы могут быть приближенно найдены с помощью решения задачи на экстремали функционала энергии экстремальной проблемы $\delta \langle \psi | H | \psi \rangle = 0$ на пространстве $\|\psi\| = 1$, и $\psi \sim a\psi$ при |a| = 1. При этом, если экстремали ищутся в форме нормированных разложений $\sum_{\alpha} C^{\alpha}_{\beta} \chi_{\alpha}$ по некоторой линейно независимой системе состояний $\{\chi_{\alpha}\}_{\alpha}$, вариационная задача становится эквивалентной обобщенной проблеме собственных значений

$$Hc = SCE$$
,

где *S* обозначена матрица перекрывания системы функций $\{\chi_{\alpha}\}_{\alpha}$. В контексте данной работы применяется базис нормированных собственных функций H_0 , в котором матрица перекрывания $S = 1, H_0$ диагональна, и единственный нетривиальный вклад в систему уравнений представлен матрицей H_1 .

Хотя решение проблемы собственных значений путем полной диагонализации матрицы $H_0 + H_1$ приводит к искомой системе одночастичных решений, такой подход сильно ограничивает точность вычисления для средних и больших напряженностях поля, в области которых оказывается необходимым использовать слишком большие базисы функций невозмущенной задачи. Один из простейших способов избежать ограничений, сопутствующих этой проблеме, состоит в применении методов неполной диагонализации матриц нормальных операторов, типичным представителем которых является метод Ланцоша [45]. В приложении к четырехкомпонентным расчетам прямая реализация этой идеи сталкивается с проблемой неограниченности снизу оператора Дирака, которая затрудняет прямой перенос итерационной процедуры построения пространства решений. Трудности, связанные с этой особенностью подхода, оказалось возможным обойти с помощью модификации подхода Ланцоша, основанной на применении функционала дисперсии энергии $\langle \psi | H | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle^2$. Аналогично с тем, как это происходит в традиционном методе Ланцоша, градиенты этого функционала в функциональном пространстве

$$\begin{bmatrix} H^{2} - 2\langle \psi | H | \psi \rangle H \end{bmatrix} | \psi \rangle - \\ - \begin{bmatrix} \langle \psi | H | \psi \rangle - 2\langle \psi | H | \psi \rangle^{2} \end{bmatrix} | \psi \rangle$$

использовались в качестве базиса модельного пространства, спектр и состояния оператора *H* на котором рассматривались как приближение к точным решениям.

Несмотря на то, что данный подход обладает рядом преимуществ относительно процедуры полной диагонализации, он предполагает адекватный выбор стартового приближения набора целевых состояний. В этой связи для сильных полей охватить высшие возбужденные состояния оказывается проблематичным, не захватывая предшествующие, что является существенным недостатком метода.

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ВОЗМУЩЕНИЯ

Так как угловая часть действия оператора H_1 легко выводится из общих свойств сферических спиноров [46]

$$\begin{aligned} -\mathrm{i}\,\sigma_{\varphi}\sin\theta\chi_{\kappa\mu} &= \frac{4\mu\kappa}{4\kappa^{2}-1}\chi_{\kappa\mu} + \\ &+ \frac{\sqrt{(\kappa+1/2)^{2}-\mu^{2}}}{|2\kappa+1|}\chi_{\kappa+l\mu} - \frac{\sqrt{(\kappa-1/2)^{2}-\mu^{2}}}{|2\kappa-1|}\chi_{\kappa-l\mu}, \end{aligned}$$

угловое интегрирование допускает простое отделение, оставляя проблему расчета парциальных радиальных интегралов

$$\int_{0}^{\infty} e^{-r/n^{*}-r/n^{*}} r^{s+s'+3} L_{n+\eta}^{2s} (2r/n^{*}) L_{n'+\eta'}^{2s'} (2r/n^{*}) dr,$$

$$\eta, \eta' = 0, -1.$$

Вычисление последних для больших |к| и *n* характеризуется проблемами численной неустойчивости, что является одной из причин, по которым такие базисы не использовались при описания связанных состояний в области сильных полей. В данном исследовании эта проблема была решена применением рациональной арифметики произвольной точности с приближением иррациональных значений цепными дробями. Это позволило вычислять с любой заданной точностью



Рис. 1. Зависимость относительной ошибки оценки энергии основного состояния атома водорода в зависимости от размера базиса κ_{max} и n_{max} при B/c = 0.1 а.е. Разными точками показаны энергии для $\kappa_{max} = 4,...,16$, и на оси абсцисс отложены значения $n_{max} = 4,...,36$.

возникающие в матричных элементах H и H^2 выражения вида

$$\int_{0}^{\infty} t^{\alpha-1} \mathrm{e}^{-pt} L_{m}^{\lambda}(at) L_{n}^{\beta}(bt) dt = \frac{\Gamma(\alpha)(\lambda+1)_{m}(\beta+1)_{n}}{p^{\alpha}m! \, n!} \times \sum_{j}^{m} \sum_{k}^{n} \frac{(-m)_{j}(-n)_{k}(\alpha)_{j}(\alpha+j)_{k}}{(\lambda+1)_{j}j!(\beta+1)_{k}k!} \left(\frac{a}{p}\right)^{j} \left(\frac{b}{p}\right)^{k}.$$

Используя данный подход, оказалось возможным воспроизводить единичную матрицу перекрывания и диагональную матрицу невозмущенного гамильтониана с точностью до 10^{-15} а.е. для базисов $35 < \kappa_{max}$, $50 < n_{max}$ и всех $|\mu| < \kappa_{max}/2 - 1/2$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для описания спектра релятивистского водорода в магнитном поле применялись базисы кулоновских решений с $|\kappa| \le 25$ со сдвигом на $|\mu| - 1/2$ и радиальными квантовыми числами $n \le 50$, при этом основное внимание уделялось состояниям с $\mu = \pm 1/2$. Напряженность поля варьировалась от B/c = 0 до 2 а.е. в единицах скорости света согласно соглашению работы [23], где 1 а.е. соответствует 2.35×10^9 Гс. Наибольшее значение n_{max} выбиралось так, чтобы обеспечить сходимость энергии основного состояния ($\pi = 0$, $\mu = -1/2$) при B/c = 0.1 с относительной ошибкой, $E_{\text{lim}} = -0.54753240834$, которая была принята достаточной в данном качественном рассмотрении. Результат этого анализа представлен на

Сравнение энергий основного состояния, полученных в данном исследовании, с результатами наиболее точных расчетов для собственных значений квадрата оператора Дирака [37] и оценок по ограничениям Като [38] приводится в таблице 1. В ней в том числе можно видеть, что с ростом напряженности различие с референсными значениями становится более значимым. Зависимости энергий основного и первых трех возбужденных состояний для слабых полей приведено на рис. 2, а для полного интервала исследуемых напряжен-

Таблица 1. Сравнение релятивистских энергий основного состояния атома водорода в магнитном поле. Значения сопоставляются прецизионным результатам более ранних релятивистских расчетов работы [37], а также верхним и нижним оценками из [38]

рис. 1.

<i>B/c</i> (a.e.)	<i>E</i> (a.e.)	E (a.e.) [37]	<i>E</i> (a.e.) [38]
0.000	-0.500006656		
0.001	-0.500499750		
0.025	-0.512350305		
0.05	-0.524382965		
0.1	-0.547532408	-0.5475324083429	-0.5475324083429
			-0.5475324083434673
1	-0.831173226	-0.831173226	
2	-1.022218030	-1.022218029	-1.0222180290
			-1.0222182



Рис. 2. Энергии первых четырех состояний $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ в серии $\pi = 0$, $\mu = -1/2$ в интервале B/c = 0.0, ..., 0.2 а.е.

ностей — на рис. 3. При этом, судя по данным работы [37], при дальнейшем возрастании поля предложенный метод для выбранных максимальных размеров базиса начинает переоценивать энергию связывания.

Таким образом, в данной работе реализован и апробирован метод расчета матричных элементов взаимодействия релятивистского водорода с магнитным полем на решениях задачи Дирака-Кулона, а также подход неполной диагонализации неограниченного снизу эрмитового оператора, которые позволили воспроизводить релятивистский спектр энергий электронных состояний водородоподобных атомов в области слабых и средних полей (B/c < 1 a.e.). Показано, что базис водородоподобных решений может применяться для прецизионных расчетов атомов в магнитных полях средних напряженностей, не приводя к проблеме вариационного коллапса. Анализ энергии основного состояния выявил быструю сходимость по размеру базиса в области умеренных полей.

Тот факт, что разработанный метод в отличие от упомянутых во введении альтернативных вариационных подходов предоставляет непосредственный доступ к орбиталям без необходимости решения отдельной задачи поиска фундаментальных решений или обращения гамильтониана, делает его удобным средством в приложениях, связанных с четырехкомпонентными многочастичными расчетами релятивистских атомов в магнитном поле. При этом преимущество до-



Рис. 3. Зависимости энергий основного и первых возбужденных состояний от напряженности магнитного поля. Серии $\mu = -1/2$ зависимости изображены квадратами со сплошной и пунктирной линиями для $(-1)^{\pi} = \pm 1$ соответственно, а аналогичные результаты для $\mu = 1/2$ показаны кругами.

ступности одночастичных базисов дополняется представленностью почти аналитических схем расчета интегралов двухчастичных взаимодействий, типичными представителями которых являются, например, слагаемые Брейта-Кулона или Гонта-Кулона, на невозмущенных решениях водородоподобных атомов. Последнее открывает путь к исследованию спектров более сложных атомных частиц вблизи и на поверхностях компактных объектов, а приближение атомных релятивистских решений системой гауссовых функций – к расчету более сложных молекулярных систем.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ гранта 22-23-01180).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hanns Ruder, Günter Wunner, Heinz Herold, Florian Geyer. Atoms in Strong Magnetic Fields: Springer Berlin Heidelberg, 1994.
- 2. Zeeman P. // Nature. 1897. V. 55. № 1424. P. 347.
- 3. *Holle A., Wiebusch G., Main J. et al.* // Physical review letters. 1986. V. 56. № 24. P. 2594.
- Main J., Wiebusch G., Holle A., Welge K.H. // Ibid. 1986. V. 57. № 22. P. 2789.
- 5. *Holle A., Main J., Wiebusch G. et al.* // Ibid.1988. V. 61. № 2. P. 161.
- 6. Iu Chun-ho, Welch G.R., Kash M.M. et al. // Physical review letters. 1991. V. 66. № 2. P. 145.

- Welch G.R., Kash M.M., Iu Chun-ho et al. // Ibid. 1989.
 V. 62. № 8. P. 893.
- 8. *Yafet Y., Keyes R.W., Adams E.N.* // J. of Physics and Chemistry of Solids. 1956. V. 1. № 3. P. 137.
- Elliott R.J., Loudon R. // Ibid.1960. oct. V. 15. № 3–4. P. 196.
- 10. *Cabib D., Fabri E., Fiorio G.* // Il Nuovo Cimento B (1971–1996). 1972. V. 10. № 1. P. 185.
- 11. *Ruderman M.* // Annual Review of Astronomy and Astrophysics. 1972. V. 10. P. 427.
- 12. Kemp J.C., Swedlund J.B., Landstreet J.D., Angel J.R.P. // The Astrophysical J. 1970. V. 161. P. L77.
- Garstang R.H. // Reports on Progress in Physics. 1977. V. 40. № 2. P. 105.
- 14. Lasenby A., Doran C., Pritchard J. et al. // Physical Review D. 2005. V. 72. № 10. P. 105014.
- 15. Schmidt G.D., Allen R.G, Smith P.S., Liebert J. // The Astrophysical J. 1996. may. V. 463. P. 320.
- 16. Lai D. // Rev. Mod. Phys. 2001. Aug. V. 73. P. 629.
- 17. *Mori K., Ho W.C.G.* // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2007. May. V. 77. № 2. P. 905.
- Duncan R.C., Thompson C. // The Astrophysical J. 1992. Jun. V. 392. P. L9.
- 19. Kouveliotou C., Dieters S., Strohmayer T. et al. // Nature. 1998. May. V. 393. P. 235.
- Praddaude H.C. // Physical Review A. 1972. Oct. V. 6. № 4. P. 1321.
- 21. Friedrich H. // Ibid. 1982. V. 26. № 4. P. 1827.
- 22. Liu C-R., Starace A.F. // Ibid. 1987. V. 35. № 2. C. 647.
- Rau A.R.P., Spruch L. // The Astrophysical J. 1976. V. 207. P. 671.
- Rosner W., Wunner G., Herold H., Ruder H. // J. of Physics B: Atomic and Molecular Physics (1968– 1987). 1984. V. 17. № 1. P. 29.
- 25. Forster H., Strupat W., Rosner W. et al. // J. of Physics B: Atomic and Molecular Physics (1968–1987). 1984. V. 17. № 7. P. 1301.
- 26. Handy C.R., Bessis D., Sigismondi G., Morley T.D. // Physical review letters. 1988. V. 60. № 4. P. 253.
- Shertzer J. // Physical Review A. 1989. V. 39. № 8. P. 3833.

- 28. Fonte G., Falsaperla P., Schiffrer G., Stanzial D. // Ibid. 1990. V. 41. № 11. P. 5807.
- 29. *Stubbins C., Das K., Shiferaw Y. //* J. of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2004. V. 37. Nº 10. P. 2201.
- Lindgren K.A.U., Virtamo J.T. // Ibid. 1979. V. 12. № 21. P. 3465.
- Manakov N.L., Rapoport L.P., Zapryagaev S.A. // Ibid. 1974. V. 7. № 9. P. 1076.
- 32. *Szmytkowski R.* // Physical Review A. 2002. V. 65. № 3. P. 032314.
- 33. *Poszwa A., Rutkowski A.* // Ibid. 2004. V. 69. № 2. P. 062320.
- 34. *Rutkowski A*. // J. of Physics B: Atomic and Molecular Physics. 1986. V. 19. № 2. P. 149.
- Chen Z., Goldman S.C. // Physical Review A. 1991. V. 44. № 7. P. 4459.
- 36. Chen Z., Goldman S.C. // Ibid. 1992. V. 45. № 3. P. 1722.
- Goldman S.C., Chen Z. // Physical review letters. 1991.
 V. 67. № 11. P. 1403.
- Chen Z., Fonte G., Goldman S.C. // Phys. Rev. A. 1994. Nov. V. 50. P. 3838.
- 39. *Hill R.N., Krauthauser C.* // Physical review letters. 1994. V. 72. № 14. P. 2151.
- 40. *Weaver D.L.* // Journal of Mathematical Physics. 1977.
 V. 18. № 2. P. 306.
- 41. Swainson R.A., Drake G.W.F. // J. of Physics A: Mathematical and General. 1991. V. 24. № 1. P. 79.
- 42. *Kutzelnigg W.* // Chemical Physics. 2012. feb. V. 395. P. 16.
- 43. *Sun S., Stetina T.F., Zhang T. et al.* // J. of Chemical Theory and Computation. 2021. V. 17. № 6. P. 3388.
- 44. *Chen J.-L., Deng D.-L., Hu M.-G.* // Physical Review A. 2008. V. 77. № 3. P. 034102.
- 45. Lanczos C. // J. of Research of the National Bureau of Standards. 1950. V. 45. № 4. P. 255.
- 46. *Judd B.R.* Operator techniques in atomic spectroscopy: New York, McGraw-Hill Book Co., Inc., 1963. V. 276. P. 82.