ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2023, том 97, № 7, с. 1032–1037

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]

[a]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

[b]*МГУ 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 10^6–10^9 Гс, для нейтронных звезд порядка 10^{13} Гс [1, 15–17] и у магнитаров эта величина имеет порядок 10^{15} 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 физико-химические 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 возмущений [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

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

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 $p_r = -\mathrm{i}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r$. При выборе калибровки $f = 0$ векторного потенциала $A = \dfrac{1}{2}B \times r + \nabla f$ возмущение приобретает форму

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

где θ и φ – сферические углы.

Биспиноры невозмущенной проблемы имеют общую форму [41]

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

в которой угловая часть является собственными функциями оператора момента Дирака K и проекции полного момента на направление поля $J_z = L_z + \dfrac{1}{2}\sigma_z$ с собственными значениями $-\kappa$ 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

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

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 κ и $\kappa' = \kappa, -\kappa+1, -\kappa-1$, 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 κ, 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 $\delta\langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle = 0$ на пространстве $\|\psi\| = 1$, и $\psi \sim a\psi$ при $|a| = 1$. При этом, если экстремали ищутся в форме нормированных разложений $\sum_\alpha C_\beta^\alpha \chi_\alpha$ 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 $\langle\psi|H|\psi\rangle - \langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle^2$. Аналогично с тем, как это происходит в традиционном методе Ланцоша, градиенты этого функционала в функциональном пространстве

$$\left[H^2 - 2\langle\psi|H|\psi\rangle H\right]|\psi\rangle - \left[\langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle - 2\langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle^2\right]|\psi\rangle$$

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]

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

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

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-r/n^*-r/n^{*'}} r^{s+s'+3} L_{n+\eta}^{2s}(2r/n^*) L_{n'+\eta'}^{2s'}(2r/n^{*'})dr,$$

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

Вычисление последних для больших $|\kappa|$ 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

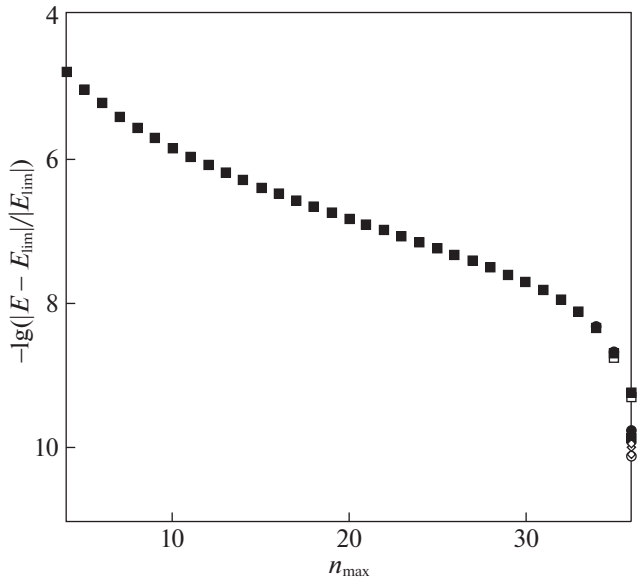


Рис. 1. Зависимость относительной ошибки оценки энергии основного состояния атома водорода в зависимости от размера базиса κ_{max} и n_{max} при $B/c = 0.1$ а.е. Разными точками показаны энергии для $\kappa_{max} = 4,\ldots,16$, и на оси абсцисс отложены значения $n_{max} = 4,\ldots,36$.

возникающие в матричных элементах H и H^2 выражения вида

$$\int_0^\infty t^{\alpha-1}\mathrm{e}^{-pt}L_m^\lambda(at)L_n^\beta(bt)dt = \frac{\Gamma(\alpha)(\lambda+1)_m(\beta+1)_n}{p^\alpha m!\,n!}\times$$
$$\times\sum_j^m\sum_k^n\frac{(-m)_j(-n)_k(\alpha)_j(\alpha+j)_k}{(\lambda+1)_j\,j!(\beta+1)_k\,k!}\left(\frac{a}{p}\right)^j\left(\frac{b}{p}\right)^k.$$

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, $E_{lim} = -0.54753240834$, которая была принята достаточной в данном качественном рассмотрении. Результат этого анализа представлен на рис. 1.

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]

B/c (а.е.)	E (а.е.)	E (а.е.) [37]	E (а.е.) [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

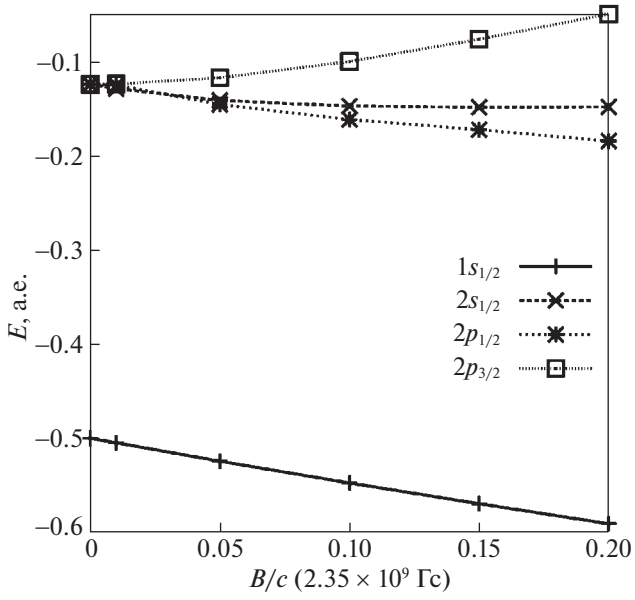


Рис. 2. Энергии первых четырех состояний $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ в серии $\pi = 0$, $\mu = -1/2$ в интервале $B/c = 0.0,..., 0.2$ а.е.

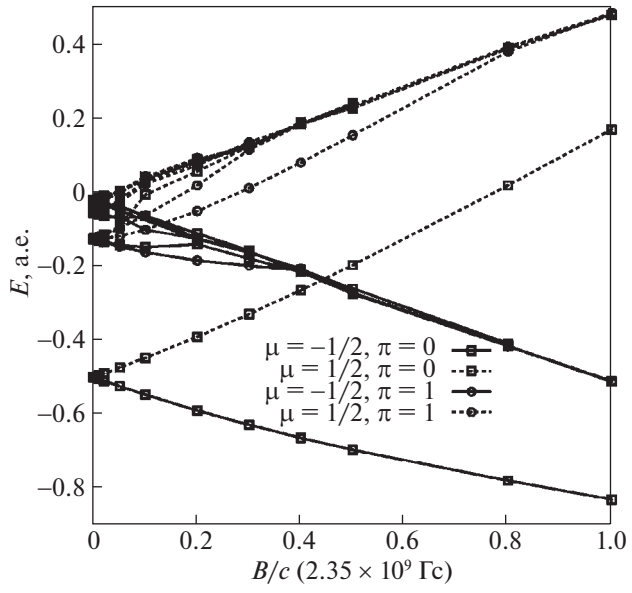


Рис. 3. Зависимости энергий основного и первых возбужденных состояний от напряженности магнитного поля. Серии $\mu = -1/2$ зависимости изображены квадратами со сплошной и пунктирной линиями для $(-1)^{\pi} = \pm 1$ соответственно, а аналогичные результаты для $\mu = 1/2$ показаны кругами.

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 ($B/c < 1$ а.е.). 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 доступности 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

1. *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.
4. *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.

7. *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.
9. *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.
13. *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.
18. *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.
20. *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.
23. *Rau A.R.P., Spruch L.* // The Astrophysical J. 1976. V. 207. P. 671.
24. *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.
27. *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. № 10. P. 2201.
30. *Lindgren K.A.U., Virtamo J.T.* // Ibid. 1979. V. 12. № 21. P. 3465.
31. *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.
35. *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.
37. *Goldman S.C., Chen Z.* // Physical review letters. 1991. V. 67. № 11. P. 1403.
38. *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.