

ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ОПЕРАТОРОВ ДЛЯ РАСЧЕТА СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМОВ

В. А. Дзюба^а, М. Г. Козлов^{б*}, С. Г. Порсев^{б†}, В. В. Фламбаум^а

^а Университет Нового Южного Уэльса
2052, Сидней, Австралия

^б Петербургский институт ядерной физики
188350, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 16 апреля 1998 г.

Предлагается метод расчета сверхтонкой структуры многоэлектронных атомов, основанный на сочетании наложения конфигураций с многочастичной теорией возмущений. Последняя используется для построения в конфигурационном пространстве эффективного гамильтониана и эффективного оператора сверхтонкой структуры. Метод применим для расчета матричных элементов любых одноэлектронных операторов. В качестве примера проведен расчет константы магнитной сверхтонкой структуры A для нескольких низколежащих уровней нейтрального таллия. Показано, что метод позволяет проводить расчеты с точностью порядка 1%, что ранее удавалось только для атомов с одним валентным электроном.

1. ВВЕДЕНИЕ

Недавно нами был предложен метод расчета низколежащих уровней энергии многоэлектронных атомов [1]. Расчеты атомов Tl [1] и Ca, Sr, Ba и Yb [2, 3] показали его эффективность. В этой работе мы хотим показать, что метод применим не только для расчета энергии, но и других наблюдаемых величин, таких как константы сверхтонкой структуры, амплитуд переходов и т. д. Для определенности мы остановимся здесь на расчете магнитной дипольной константы сверхтонкой структуры. Обобщение на другие одноэлектронные операторы является очевидным. Напомним, что расчет сверхтонкой структуры является одним из основных тестов при вычислении несохраняющих пространственную четность амплитуд.

В настоящее время существует несколько методов расчета многоэлектронных атомов. Для атомов с одним электроном поверх заполненных оболочек справедлива многочастичная теория возмущений по остаточному кулоновскому взаимодействию (см., например, [4]). Для атомов с несколькими валентными электронами применяются метод наложения конфигураций и многоконfigurационный метод Хартри—Фока [5]. В последнее время широкое распространение получил метод связанных кластеров [6–8]. Расчеты констант сверхтонкой структуры многократно проводились в рамках всех перечисленных выше методов (см., например, [9–14]).

Наиболее сложная проблема, с которой приходится сталкиваться в атомных расчетах, заключается в необходимости адекватно учесть как корреляции между валент-

* E-mail: mgk@mfl309.spb.edu

† E-mail: porsev@thd.pnpi.spb.ru

ными электронами, так и корреляции, включающие остовные электроны. Корреляции первого типа часто слишком сильны, чтобы их можно было учесть в рамках обычной многочастичной теории возмущений, но если число валентных электронов не слишком велико, они хорошо учитываются в рамках метода наложения конфигураций или многоконфигурационного метода Хартри—Фока. Напротив, корреляции второго типа могут быть более просто учтены с помощью многочастичной теории возмущений, так как число конфигураций, необходимых для описания этих корреляций в рамках метода наложения конфигураций и многоконфигурационного метода Хартри—Фока, оказывается слишком большим.

По этой причине возникает желание объединить многочастичную теорию возмущений с наложением конфигураций. При этом многочастичная теория возмущений используется для построения эффективного гамильтониана для валентных электронов. После этого уравнение Шредингера с эффективным гамильтонианом решается методом наложения конфигураций. На этой стадии только валентные электроны учитываются явно. В работах [1] показано, что для построения эффективного гамильтониана можно использовать теорию возмущений Бриллюэна—Вигнера и обычную диаграммную технику. В этой работе мы обсудим построение эффективных операторов для других наблюдаемых величин.

В следующем разделе дается определение валентного подпространства и приводятся основные формулы для эффективного гамильтониана. В разд. 3 обсуждаются другие эффективные операторы, а разд. 4 посвящен расчетам сверхтонкой структуры в Tl.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН ДЛЯ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Будем считать, что мы интересуемся низкоэнергетическими атомными состояниями с энергиями $E_i - E_0 < \epsilon$, где E_0 — энергия основного состояния атома. Тогда в первом приближении можно предположить, что внутренние электроны, энергии Хартри—Фока которых, $|\epsilon_n| \gg \epsilon$, образуют остов, описываемый волновой функцией

$$\Psi_{core} = (N_c!)^{-1/2} \det(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_c}), \quad (1)$$

$$h_{HFD} \phi_n = \epsilon_n \phi_n, \quad (2)$$

где h_{HFD} — оператор Хартри—Фока—Дирака. Несмотря на то что этот оператор используется для определения атомного остова, он может включать и поле всех или некоторых валентных электронов. Так, ниже мы рассматриваем таллий как атом с тремя валентными электронами и остовом $[1s^2 \dots 5d^{10}]$, а оператор h_{HFD} строим для конфигурации $1s^2 \dots 5d^{10}6s^2$ (V^{N-1} — приближение, где N — число электронов в атоме).

Будем называть валентным подпространством многоэлектронных состояний Ψ , для которых остовные электроны находятся в состоянии (1), и введем проектор P на это подпространство. Дополнительное подпространство, которому соответствует проектор $Q = 1 - P$, характеризуется тем, что хотя бы один из остовных электронов возбужден в состоянии, лежащие выше ϕ_{N_c} .

Можно показать [1], что уравнение Шредингера

$$H\Psi = E\Psi \quad (3)$$

эквивалентно следующему уравнению в P -пространстве для функции $\Phi = P\Psi$:

$$[PHP + \Sigma(E)]\Phi = E\Phi, \quad (4)$$

$$\Sigma(E) = PV'R_Q(E)V'P, \quad (5)$$

где V' — оператор остаточного кулоновского взаимодействия, а $R_Q(E)$ — функция Грина в Q -пространстве:

$$V' \equiv H - H_0, \quad (6)$$

$$R_Q(E) = Q \frac{1}{E - QHQ} Q. \quad (7)$$

Оператор H_0 выражается через оператор (2):

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_{HFD}(\mathbf{r}_i) - W. \quad (8)$$

Константа W введена в правую часть этого уравнения, потому что сумма одночастичных энергий ε_n дважды учитывает электростатическое взаимодействие электронов между собой и не может служить хорошим приближением для полной энергии атома E . Константу W можно определить из условия [1]

$$\langle \Psi_{core} | H_0 | \Psi_{core} \rangle = \langle \Psi_{core} | H | \Psi_{core} \rangle \equiv E_{core}, \quad (9)$$

или $\langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$, где Φ_0 — волновая функция основного состояния атома. Наконец, эту константу можно использовать в качестве свободного параметра и подобрать ее из условия наилучшего совпадения теории и эксперимента. Отметим, что в низшем порядке теории возмущений для оператора $\Sigma(E)$ переопределение константы $W \rightarrow W + \delta$ эквивалентно сдвигу по энергии $\Sigma(E) \rightarrow \Sigma(E + \delta)$.

Решения уравнений (3), (4) связаны между собой соотношением

$$\Psi = [P + R_Q(E)V'P]\Phi, \quad (10)$$

откуда видно, что $\Phi = P\Psi$.

Условие ортонормировки $\langle \Psi_i | \Psi_k \rangle = \delta_{i,k}$ приближенно может быть сведено к следующему условию для функций Φ :

$$\langle \Phi_i | 1 - \partial_E \Sigma(\bar{E}) | \Phi_k \rangle \approx \delta_{i,k}, \quad (11)$$

где $\bar{E} \approx (E_i + E_k)/2$. Отметим, что из уравнений (4)–(11) только последнее является приближенным.

Оператор, стоящий в скобках в уравнении (4), естественно назвать эффективным гамильтонианом H_{eff} для валентных электронов. Уравнения (4)–(7) позволяют применить для его построения обычные методы многочастичной теории возмущений, в частности диаграммную технику [1, 2]. Для этого можно использовать представление точной функции Грина через функцию Грина в приближении Хартри—Фока—Дирака:

$$R_Q(E) = R_Q^0(E) + R_Q^0(E)V'R_Q(E), \quad (12)$$

$$R_Q^0(E) = Q \frac{1}{E - QH_0Q} Q. \quad (13)$$

3. ЭФФЕКТИВНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ДЛЯ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Будем считать, что нам известны решения уравнения (4), и мы хотим использовать их для нахождения наблюдаемой величины a , которой отвечает одноэлектронный оператор A :

$$a = \langle \Psi | A | \Psi \rangle. \quad (14)$$

Определим эффективный оператор A_{eff} так, что

$$a = \langle \Phi | A_{eff} | \Phi \rangle. \quad (15)$$

Используя (10), (14) и (15), получаем для A_{eff} следующее выражение:

$$A_{eff} = PAP + PV'R_Q(E)AP + PAR_Q(E)V'P + PV'R_Q(E)AR_Q(E)V'P. \quad (16)$$

Уравнения (12) и (16) позволяют построить разложение оператора A_{eff} в ряд по степеням V' . К сожалению, в большинстве случаев этот ряд очень медленно сходится, поэтому обычно вместо последовательной теории возмущений используют приближения, частично учитывающие все порядки по V' . Наиболее часто используется приближение случайной фазы (см., например, [15]). Посмотрим, как это приближение согласуется с формулой (16).

В правую часть уравнения (16) оператор A входит в комбинации с точной функцией Грина. Введем новый оператор \tilde{A} , потребовав, чтобы выполнялось следующее равенство:

$$\begin{pmatrix} A_{PP} & A_{PQ}R_Q \\ R_Q A_{QP} & R_Q A_{QQ}R_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{PP} & \tilde{A}_{PQ}R_Q^0 \\ R_Q^0 \tilde{A}_{QP} & R_Q^0 \tilde{A}_{QQ}R_Q^0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где $A_{PP} \equiv PAP$ и т.д. Если удастся построить оператор \tilde{A} , то из него нетрудно получить и оператор A_{eff} , так как при подстановке \tilde{A} в уравнение (16) все точные функции Грина заменяются на хартри-фоковские. Уравнение (17) эквивалентно следующей системе операторных уравнений:

$$\tilde{A}_{PP} = A_{PP}, \quad (18)$$

$$\tilde{A}_{PQ} = A_{PQ} + \tilde{A}_{PQ}R_Q^0V'Q, \quad \tilde{A}_{QP} = \tilde{A}_{PQ}^\dagger, \quad (19)$$

$$\tilde{A}_{QQ} = A_{QQ} + \tilde{A}_{QQ}R_Q^0V'Q + QV'R_Q^0\tilde{A}_{QQ} - QV'R_Q^0\tilde{A}_{QQ}R_Q^0V'Q. \quad (20)$$

Уравнения приближения случайной фазы для остовных электронов (рис. 1) похожи на (19), (20). Основное отличие оператора \tilde{A} от оператора приближения случайной фазы A_{RPA} заключается в том, что первый не является одночастичным. Кроме того, приближение случайной фазы не включает и ряд одночастичных поправок, которые учитываются в (19), (20). Но наиболее существенные члены уравнений (19), (20) учитываются в операторе A_{RPA} .

Из сказанного выше следует, что для эффективного оператора (16) можно написать следующее приближенное равенство:

$$A_{eff} \approx PAP + PV'R_Q^0(E)A_{RPA}P + PA_{RPA}R_Q^0(E)V'P. \quad (21)$$

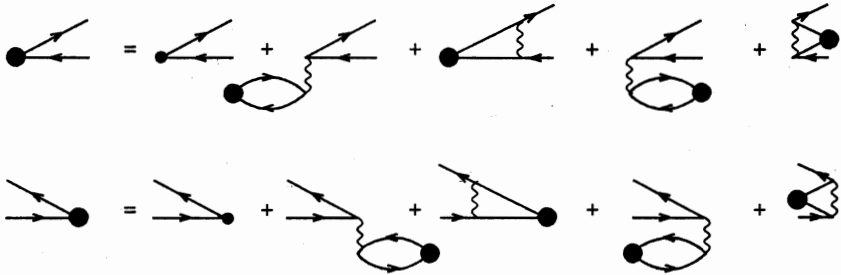


Рис. 1. Графическое представление уравнений метода случайной фазы для острова. Малый черный кружок соответствует затравочному матричному элементу одноэлектронного оператора A , большой черный кружок соответствует аналогичному матричному элементу в приближении случайной фазы. Волнистой линией обозначено кулоновское взаимодействие

В этом уравнении нет члена аналогичного последнему члену уравнения (16). Он оказался частично включен в два предыдущих члена. Неучтенная его часть соответствует так называемому структурному излучению, которое в большинстве случаев очень мало [14].

Уравнение (21) также похоже на уравнение приближения случайной фазы для валентных электронов. Однако кроме диаграмм, входящих в приближение случайной фазы (рис. 2а), оно включает два дополнительных типа диаграмм (рис. 2б, в). Диаграммы рис. 2б можно назвать вычитательными по аналогии со сходными диаграммами для оператора Σ [1]. Они возникают только в том случае, когда при решении уравнений метода случайной фазы используется оператор Хартри—Фока, который включает поле (некоторых) валентных электронов. Напомним, что именно такой оператор используется при построении островной волновой функции (1). Диаграммы рис. 2в соответствуют двухчастичным поправкам A_{TP} к эффективному оператору. Существует еще важный тип диаграмм (рис. 2г), который не вошел в приближение (21). Эти диаграммы относятся к более высокому порядку многочастичной теории возмущений, но их вклад оказывается весьма существенным, а аналогичные диаграммы, где между вершиной A_{RPA} и оставшейся частью диаграммы стоит частичная, а не дырочная линия, учитываются при подстановке (21) в (15).

Объединяя вместе все перечисленные выше поправки, приходим к следующему приближенному выражению для эффективного оператора:

$$A_{eff} \approx P(A_{RPA} + A_{SBT} + A_{TP} + A_{\sigma})P, \tag{22}$$

где четыре члена в правой части соответствуют четырем типам диаграмм на рис. 2а–г. Ниже, при расчете констант сверхтонкой структуры, мы будем пользоваться формулами (15) и (22). Еще раз подчеркнем, что такое приближение точно учитывает только первый порядок многочастичной теории возмущений. Уже во втором порядке возникают поправки типа структурного излучения, не входящие в (22). С другой стороны, уравнение (22) учитывает ряд наиболее важных поправок высших порядков.

В заключение этого раздела напомним, что оператор A_{eff} применяется к решению уравнения (4). Это означает, что возбуждения валентных электронов учтены во всех порядках, что позволяет получить более высокую точность, чем та, которую можно достичь в рамках многочастичной теории возмущений.

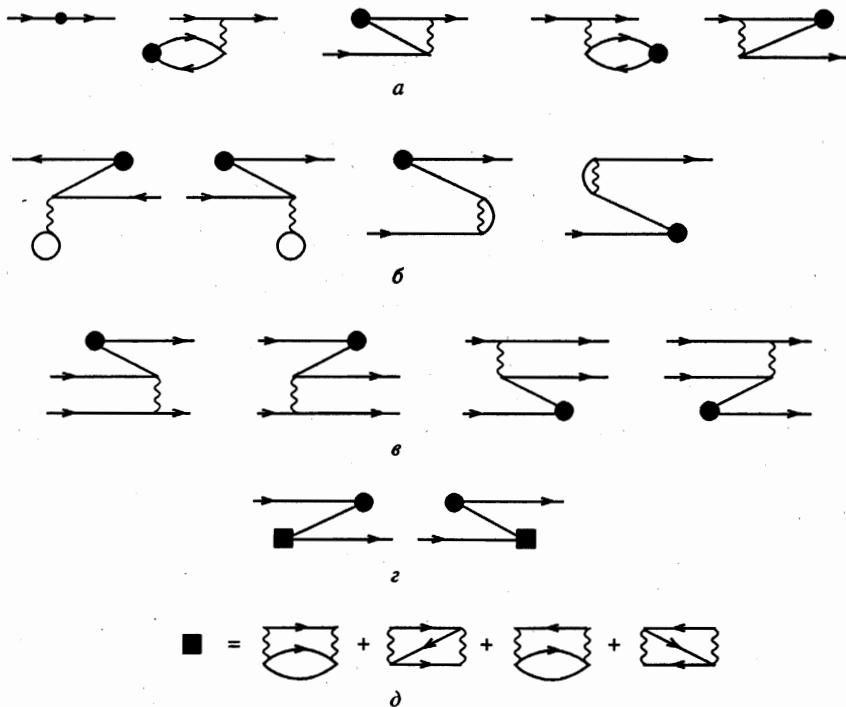


Рис. 2. Графическое представление эффективного оператора A_{eff} для валентных электронов: a — приближение метода случайной фазы A_{RPA} ; b — вычитательная поправка A_{SBT} ; c — двухчастичная поправка A_{TP} ; d — собственно-энергетическая поправка A_{σ} . Квадрат обозначает собственно-энергетический блок (δ)

4. РАСЧЕТЫ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ

В приближении точечного ядра оператор магнитной сверхтонкой структуры имеет следующий вид:

$$H_{HFS} = \frac{\mu_n \mu_0}{I} \frac{I[\alpha r]}{r^3}, \tag{23}$$

где μ_n — ядерный магнитный момент, μ_0 — магнетон Бора, а α — матрицы Дирака. Для конечного ядра этим выражением можно пользоваться только при $r > r_n$, где r_n — радиус ядра. Внутри ядра оператор сверхтонкой структуры уже не выражается через магнитный момент ядра, а зависит от ядерной структуры. Точные формулы можно найти в работе [13]. Там же показано, что соответствующие поправки очень малы, поэтому мы здесь пользуемся приближением, в котором внутри ядра в операторе (23) меняется только радиальная зависимость: $1/r^3$ заменяется на r/r_n^4 . Такое приближение вполне пригодно для расчетов на процентном уровне точности.

Расчет сверхтонкой структуры атома ПИ начнем с построения эффективного гамильтониана и решения уравнения (4). Эта часть вычислений несколько отличается от расчета [1]. Мы увеличили базис радиальных функций, который теперь включает орбитали вплоть до $21s, 21p, 21d, 18f, 18g, 14h$ (процедура построения орбиталей была похожа

на описанную в [1, 16, 17]). Также было существенно увеличено число конфигураций. Кроме того, при расчете диаграмм для оператора $\Sigma(E)$ вычислялись и их первые производные по энергии. Это позволило учесть в первом приближении зависимость матричных элементов эффективного гамильтониана от энергии. Расчеты спектра таллия проводились с эффективным гамильтонианом, взятом при разных валентных энергиях, что, как говорилось выше, соответствует разному выбору константы W в формуле (8). Оказалось, что наилучшее согласие с экспериментальным спектром получается, если $\Sigma(E)$ берется при энергии $E_{val} \equiv E - E_{core} = -1.64$ ат. ед. (см. табл. 1)¹⁾. Важно отметить, что в этом расчете не только хорошо воспроизвелась низкоэнергетическая часть спектра нейтрального таллия, но и валентная энергия основного состояния отлично совпала с экспериментальной величиной 2.0722 ат. ед. [19].

Таблица 1

Валентные энергии низколежащих уровней Тl

Уровень	E_{val} , ат. ед.	ΔE , см ⁻¹	
		расчет	эксперимент [18]
$6p_{1/2}$	-2.072048	0	0
$6p_{3/2}$	-2.036471	7808	7793
$7s_{1/2}$	-1.951435	26472	26478
$7p_{1/2}$	-1.916363	34169	34160
$7p_{3/2}$	-1.911804	35170	35161
$6d_{3/2}$	-1.907348	36148	36118
$6d_{5/2}$	-1.907011	36222	36200

Примечание. Эффективный гамильтониан строился при энергии $E_{val} = -1.64$ ат. ед., которая была выбрана из условия наилучшего согласия расчетных и экспериментальных энергетических интервалов между уровнями.

На следующем этапе строится эффективный оператор (22). Все поправки, за исключением A_{TP} , определяются одночастичными операторами и могут быть сведены к эффективным одноэлектронным интегралам. Для них вычисление среднего значения (15) не представляет труда. Учет двухэлектронной поправки A_{TP} требует значительно более длительных вычислений. Поэтому при вычислении этих поправок отбрасывались вклады конфигураций, вес которых в волновой функции не превышал 10^{-4} .

Для определения погрешности, связанной с неполнотой метода наложения конфигураций, вклад виртуальных орбиталей, не включенных в наложение конфигураций, оценивался в низшем порядке теории возмущений. Будем называть соответствующие поправки валентными. Они оказались существенными только для уровней $6p_{3/2}$ и $7p_{3/2}$, где остальные вклады малы или сильно компенсируют друг друга.

Наконец, последняя поправка возникает при учете условий (11). Для нижних уровней с заданными моментом J и четностью P эти условия просто определяют поправки к нормировке. Для возбужденных состояний, строго говоря, требуется также учитывать

¹⁾ Более подробно проблема выбора энергии осуждается в статье, принятой к печати в журнале «Оптика и спектроскопия».

и нарушение ортогональности к нижележащим состояниям, однако, мы здесь ограничились только учетом нормировки. Результаты расчета констант сверхтонкой структуры таллия приведены в табл. 2.

Таблица 2

Константы магнитной сверхтонкой структуры для нижних уровней ^{205}Tl (МГц)

	$6p_{1/2}$	$6p_{3/2}$	$7s_{1/2}$	$7p_{1/2}$	$7p_{3/2}$	$6d_{3/2}$	$6d_{5/2}$
ХФД	17554	1302	7612	1957	188	21	9
НК	+925	-1369	+3655	-88	+114	-149	+307
$\Sigma(E)$	+3197	+48	+421	+290	-41	+90	-135
СФ	+1359	+327	+1043	+134	+71	+6	+14
A_{SBT}	-1225	-120	-72	-116	-17	-16	-11
A_{TP}	+1130	+44	-10	+105	+6	+12	+8
A_{σ}	-1090	-19	-303	-105	-10	+2	-6
Валентная	-13	+53	+43	-6	+6	-1	-1
Нормировочная	-214	-2	-82	-14	-2	0	-1
Теория [14]	21760	-1919	12470	2070	195	-	-
Теория [13]	21300	339	12760	-	-	-	-
Настоящая работа	21623	264	12307	2157	315	-35	184
Эксперимент	21311	265	12297	2155	309	-43	229

Примечание. Приведены значения констант сверхтонкой структуры в приближении Хартри—Фока—Дирака (ХФД) и поправки, которые дают наложение конфигураций (НК) и добавка оператора Σ к гамильтониану. Учтены поправки к оператору сверхтонкой структуры от использования метода случайной фазы (СФ), вычитательная A_{SBT} и двухчастичная A_{TP} поправки, собственно-энергетическая поправка A_{σ} , валентная поправка на неполноту наложения конфигураций и нормировочная поправка.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение результатов из табл. 1 и из работы [1] показывает, что даже приближенный учет зависимости оператора Σ от энергии в совокупности с оптимальным выбором константы W , которая определяет гамильтониан начального приближения (8), позволяет существенно увеличить точность расчета атомного спектра. Наибольшее отличие от эксперимента в этом расчете составляет всего лишь 0.2%, тогда как в предыдущем расчете оно составляло около 1%. Такое уточнение спектра сказалось и на результатах расчета сверхтонкой структуры.

Приведенные в табл. 2 результаты показывают, что приближение Хартри—Фока—Дирака для магнитной константы сверхтонкой структуры очень плохо согласуется с экспериментом. В некоторых случаях оно даже дает или неправильный знак, или неправильный порядок величины этой константы. Учет одного лишь наложения конфигураций не приводит к существенному улучшению согласия.

Принципиальное увеличение точности достигается только при одновременном учете наложения конфигураций и многочастичной теории возмущений. Последняя дает

три типа поправок, возникающих: 1) от замены валентного гамильтониана на эффективный (учет $\Sigma(E)$), 2) от использования эффективного оператора сверхтонкой структуры (случайная фаза, A_{SBT} , A_{TP} и A_{σ}) и 3) от условия нормировки (11). Последняя поправка составляет не более 1%, тогда как две другие оказываются значительно больше.

Следует отметить, что между различными поправками многочастичной теории возмущений имеются существенные сокращения, которые частично обусловлены тем, что при суммировании по промежуточным состояниям возникают вклады, нарушающие принцип Паули. Такие вклады, очевидно, должны сократиться. Например, принцип Паули выполняется для суммы $A_{RPA} + A_{SBT} + A_{TP}$, но нарушается каждым из ее членов в отдельности. По этой причине отдельные вклады в эту сумму не имеют физического смысла. Кроме того, в большинстве случаев частичная компенсация имеет место между поправкой от использования эффективного гамильтониана и поправкой A_{σ} . Здесь она обусловлена тем, что вклады промежуточных электронных и дырочных состояний имеют разные знаки и сравнимые величины. В результате суммарная поправка многочастичной теории возмущений оказывается меньше, чем отдельные вклады.

Из данных табл. 2 видно, что для всех уровней за исключением d -уровней имеется очень хорошее согласие с экспериментом. Наибольшие поправки многочастичной теории возмущений имеют место для уровня $6p_{1/2}$, где они составляют более 3000 МГц. Этим объясняется менее высокая точность расчета этой константы (1.4%). Две другие большие константы (для уровней $7s$ и $7p_{1/2}$) оказались вычисленными на порядок точнее, что соответствует заметно меньшей величине поправок многочастичной теории возмущений. Для уровней $6p_{3/2}$, $6d_{3/2}$ и $6d_{5/2}$ мы имеем очень плохое начальное приближение. Поэтому идеальное совпадение с экспериментом для уровня $6p_{3/2}$ в известной мере случайно. Отметим, что здесь оказалось необходимо учесть все поправки, для того чтобы получить правильный результат.

В целом можно утверждать, что использованный здесь метод оказался весьма эффективным и для расчета спектра, и для вычисления констант сверхтонкой структуры. Отметим, что этот метод в несколько упрощенном виде недавно был применен для расчета констант сверхтонкой структуры и P, T -нечетных матричных элементов для молекулы ВаF [20], где также удалось существенно улучшить согласие с экспериментом. Для его дальнейшего уточнения необходимо увеличить число учитываемых поправок высших порядков. Это можно сделать, используя методы, которые уже применялись ранее при расчете для атомов цезия и таллия в рамках чистой теории возмущений [14, 21]. В первую очередь следует учесть поправки высших порядков к оператору Σ . Главные поправки такого типа соответствуют вставке поляризационного оператора в фотонные линии. В первом приближении такие поправки можно учесть с помощью экранировочных коэффициентов (см., например, [3]). Кроме того, надо учесть поправку к эффективному оператору сверхтонкой структуры, связанную со структурным излучением.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-17663).

Литература

1. V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and M. G. Kozlov, Письма в ЖЭТФ **63**, 844 (1996); Phys. Rev. A **54**, 3948 (1996).
2. М. Г. Козлов, С. Г. Порсев, ЖЭТФ **111**, 838 (1997).
3. V. A. Dzuba and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **57**, 2459 (1998).
4. I. Lindgren and J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*, Springer-Verlag, Berlin (1985).
5. I. P. Grant and H. M. Quiney, Adv. At. Mol. Phys. **23**, 37 (1988).
6. S. A. Blundell, W. R. Johnson, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **43**, 3407 (1991).
7. E. Illibaev and U. Kaldor, Phys. Rev. A **47**, 137 (1993).
8. E. Illibaev, U. Kaldor, and Y. Ishikawa, Phys. Rev. A **49**, 1724 (1994); Phys. Rev. A **50**, 1121 (1994); Phys. Rev. A **51**, 225 (1995).
9. I. Lindgren, Rep. Prog. Phys. **47**, 345 (1984).
10. T. Olsson, A. Rosen, B. Fricke, and G. Torbohm, Phys. Scripta **37**, 730 (1988).
11. D. R. Beck and D. Datta, Phys. Rev. A **48**, 182 (1993).
12. P. Jönsson and C. Froese Fisher, Phys. Rev. A **48**, 4113 (1993).
13. A.-M. Mårtensson-Pendrill, Phys. Rev. Lett. **74**, 2184 (1995).
14. V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, O. P. Silvestrov, and O. P. Sushkov, J. Phys. B **20**, 1399 (1987).
15. A.-M. Mårtensson-Pendrill, *Methods in Computational Chemistry, v. 5: Atomic and Molecular Properties*, ed. by S. Wilson, Plenum Press, New York (1992).
16. P. Bogdanovich and G. Žukauskas, Sov. Phys. Collection **23**, 13 (1983).
17. P. Bogdanovich, G. Žukauskas, and S. Šandžiuvienė, Sov. Phys. Collection, **24**, 20 (1984).
18. C. E. Moore, *Atomic Energy Levels*, Circ. № 467, Nat. Bur. Stand. USA, Washington (1958).
19. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Справочник по атомной и молекулярной физике*, Атомиздат, Москва (1980).
20. М. Г. Козлов, А. В. Титов, Н. С. Мосягин, and П. В. Сочко, Phys. Rev. A **56**, R3326 (1997).
21. V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and O. P. Sushkov, Phys. Lett. A **141**, 147 (1989).