

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

О.В. ГЛУШКОВ

АТОМНА ОПТИКА ТА СПЕКТРОСКОПІЯ. Ч.5

Конспект лекцій

Одеса

Одеський державний екологічний університет

2022

1

УДК 539.184:539.27

ГЗІ

Глушков О.В.

ГЗІ Атомна оптика та спектроскопія. Р.5 : конспект лекцій. Одеса : Одеський державний екологічний університет, 2022. 120 с.

ISBN 978-966-186-230-1

В конспекті лекцій надано викладення таких питань атомної оптики та спектроскопії як релятивістський енергетичний підхід до визначення сил осциляторів багатозарядних іонів, випромінювання атомів: електричний та магнітний тип, природна ширина спектральних ліній, теорія спектральних ліній і смуг в газовій фазі та плазмі, Оператор електромагнітної взаємодії. Електричне та магнітне мультипольне випромінювання. Релятивістська квантова теорія електромагнітного випромінювання.

Конспект лекцій призначений для аспірантів (третій освітньо-науковий рівень) спеціальності: 104- "Фізика та астрономія» (Оптика та спектроскопія квантових систем»).

УДК 539.184:539.27

Рекомендовано методичною радою Одеського державного екологічного університету Міністерства освіти і науки України як конспект лекцій

(протокол №3 від 30.11. 2022 р.)

ISBN 978-966-186-230-1

© Глушков О.В, 2022,

© Одеський державний екологічний університет, 2022

ЗМІСТ

ВСТУП	5
Розділ 1 Спектроскопія за рахунок зіткнень релятивістських електрон-іонних систем.....	6
1.1 Загальні зауваження і огляд експериментальних методів вивчення характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів.....	6
1.2 Основні уявлення про фізичну природу радіаційних переходів в релятивістської атомної спектроскопії.....	10
1.2.1 Вступні зауваження.....	10
1.2.2 Електричне дипольне випромінювання.....	13
1.2.3 Електричне мультипольне випромінювання.....	16
1.2.4 Магнітне мультипольне випромінювання.....	22
1.3 Елементи теорії спектрів автоіонізаційних станів та діелектронних сателітів для легких іонів в плазмі.....	24
1.4 Огляд теоретичних методів опису характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів.....	29
1.5 Висновки до розділу 1.....	39
Розділ 2 Новий релятивістський енергетичний підхід до обчислення характеристик процесів електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища.....	41
2.1. Вступні зауваження щодо характеристики процесів електрон-іонних зіткнень. Адіабатична формула Гелл-Мана і Лоу з електродинамічної матрицею розсіювання.....	41
2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи з урахуванням ефектів плазмового середовища.....	44
2.2.1 Метод урахування ефектів плазмового середовища. Гамільтоніан нульового наближення у дебаєвському наближенні.....	44
2.2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи: Нульове наближення та поправки першого порядку.....	48
2.3. Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи. Обмінно-кореляційні поправки.....	59

2.3.1 Основні обмінно-кореляційні ефекти.....	59
2.3.2 Метод штурмовських розкладів для урахування станів континууму.....	66
2.4 Калібрувально-інваріантний релятивістський підхід до генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення для електрон- атомної системи.....	70
2.5 Енергетичний підхід в теорії електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів у плазмі.....	78
2.6. Висновки до розділу.....	90
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	92

ВСТУП

Дисципліна «Атомна оптика та спектроскопія» є важливою дисципліною у циклі професійної підготовки аспірантів (третій рівень освіти) за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» (спеціалізація: «оптика та лазерна фізика»).

Метою вивчення дисципліни є засвоєння (формування) низки компетентностей, зокрема, оволодіння сучасним апаратом атомної оптики та спектроскопії, здатність розвитку нових та удосконалення існуючих методів опису спектрів атомів та багатозарядних іонів, їх енергетичних та спектроскопічних характеристик на основі методів квантової механіки атомів та квантової електродинаміки.

Після засвоєння цієї дисципліни аспірант повинен уміти використовувати сучасні або розроблювати нові підходи, зокрема, на основі методів квантової механіки, електродинаміки, квантової хімії, а також методів релятивістської квантової теорії тощо до опису спектрів атомів та іонів, їх енергетичних та спектроскопічних характеристик.

Місце дисципліни у структурно-логічній схемі її викладання: отримані знання при вивченні даної дисципліни використовуються при написанні дисертаційних робіт, тематика яких пов'язана із дослідженням спектрів атомів та багатозарядних іонів, їх енергетичних та спектроскопічних характеристик на основі методів квантової механіки молекул, квантової хімії, а також методів релятивістської квантової теорії.

Основні поняття дисципліни – це бажаний інструментарій досвідченого фахівця у галузі фізики та астрономії.

У роботі представлені основи теорії оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в спектроскопії атомів та іонів, значення релятивістських і кореляційних ефектів в теорії спектрів атомів та іонів. Наведені конкретні приклади обчислення спектроскопічних характеристик атомів та іонів.

Для аспірантів (а також магістрів (частково) і наукових співробітників) спеціальностей: 104- "Фізика та астрономія» (спеціалізація: Оптика та лазерна фізика).

РОЗДІЛ І

СПЕКТРОСКОПІЯ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ СИСТЕМ

1.1. Загальні зауваження і огляд експериментальних методів вивчення характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів

Як зазначено у вступі, величезний інтерес до вивчення процесів зіткнень за участю електронів, фотонів, атомів і іонів стимулюється новими класами завдань, зокрема сучасної лазерної фізики та фізики астрофізичної, термоядерної, лазерної плазми (див. [1-290]).

Серед атомних систем особлива увага приділяється експериментальному і теоретичному вивченню спектральних характеристик БІ. Традиційно вони використовуються в астрофізичних дослідженнях, в дослідженнях фізики лабораторної плазми, яка генерується різними джерелами: лазерними імпульсами, токамака, пінч, капілярними розрядами та ін., в дослідженнях термоядерного синтезу. Протягом декількох десятирічь розроблялися і вдосконалювалися методи експериментального вивчення спектроскопічних характеристик випромінювання БІ. Детальний опис експериментальних методик можна знайти в ряді відомих книг, оглядів і оригінальних експериментальних робіт (див., напр. [1-39, 67-69, 103-113, 182, 184-187]).

Зрозуміло, метод спектроскопії за рахунок зіткнень є одним з найбільш ефективних й інформативних методів, оскільки на його основі вдається, як правило, з досить високою роздільною здатністю виміряти кутовий і енергетичний розподіл розсіяних і вибитих частинок в умовах одноразових зіткнень. Надалі, як правило, ці експериментальні дані будуть нами використовуватися.

Фізичні механізми, задіяні в шуканих методиках, зводяться до кількох. По-перше, досить часто використовується непружне розсіювання електронів і протонів на атомах. Крім цього, також широко використовуються процеси і механізми формування збуджених станів в атом-атомних та іон-атомних зіткненнях.

По-друге, поширення набули методи вимірювання ймовірності утворення і розпаду автоіонізаційних станів іонів, які відіграють важливу роль в процесах у астрофізичній, лабораторній та лазерній плазмі. Шукані

стани спостерігаються також в спектрах світіння високотемпературної плазми, в спектрах оже-електронів, що утворюються в іон-атомних зіткненнях (див. [1-39, 67-69, 103-113, 182, 184-187]).

Широкий фронт експериментальних досліджень пов'язаний з вивченням спектрів лінійного випромінювання високотемпературної плазми (плазми токамаків, термоядерних реакторів), для яких важливими є спектроскопія автоіонізаційних станів та спектроскопія діелектронних сателітів. Справа в тому, що лінії-сателіти широко застосовуються з метою спектроскопічної діагностики плазми. Це стосується і спектрів високотемпературної лазерної плазми, мало індуктивної вакуумної іскри та інших джерел.

В одному з недавніх оглядів (Oks E., Auburn University, Auburn, USA [7]) проаналізовано стан сучасної теорії спектральних ліній атомів і іонів в плазмі, методик спектральної діагностики плазми і сформульовані основні завдання найближчого десятиріччя.

Важливо також зауважити, що в [7] відзначені провідні дослідницькі групи в цій галузі, зокрема з КЕД моделювання спектрів ізольованих атомів і іонів, а також за наявності зовнішніх електромагнітних полів відзначена група Глушкова О.В. (див. детальніше [7]).

Відзначимо далі, що на цей час досить велика кількість найважливіших експериментальних досліджень виконана за допомогою методу beam-foil-спектроскопії (див. [1-39, 67-69, 103-113, 182, 184-187]), заснованого на реєстрації продуктів розпаду збуджених БІ, що утворюються при проходженні швидких атомних частинок, як правило, крізь тверду фольгу. У шуканих експериментах є унікальна особливість, пов'язана з можливістю спостереження спектрів, що відносяться як до швидкої, так і до повільної атомної частинки, і зрозуміло, до широкої області енергій частинок, що стикаються.

Створення лазерів у ВУФ і м'яких рентгенівських областях спектра - один з напрямків, для успішного розвитку якого, поряд з розрахунками фундаментальних спектроскопічних констант необхідно теоретичне моделювання спектрів важких БІ в плазмі [8, 15, 24, 38, 39, 65-72].

Протягом останніх трьох десятирічч виконані численні експерименти зі спостереження посилення спонтанного випромінювання (ПСВ) на переходах неону- і нікелі-подібних іонів [8,15]. Розроблені методи вимірювання спектрів з високим просторовим і тимчасовим розділенням. Однак, незважаючи на відомий прогрес, величезна кількість проблем як

фундаментально-теоретичного, так і прикладного характеру як і раніше залишаються і ускладнюють вирішення вище перелічених актуальних завдань.

Зокрема, актуальними проблемами теоретичної спектроскопії Бі і теоретичних робіт зі створення і обґрунтування нових схем лазерної генерації на переходах в спектрах багатозарядних іонів (в плазмі) є:

1. коректна інтерпретація експериментальних інтенсивностей ліній спектрів випромінювання різних Бі, особливий інтерес становлять Be-, Ne-, Ni-, Ar- подібні іони; актуальною теоретичною проблемою є розробка альтернативних методів розрахунку спектроскопічних характеристик випромінювання Бі, що забезпечують задовільну точність для досить важких іонів ізоелектронних послідовностей; зокрема теоретичне визначення фундаментальних спектроскопічних констант Бі: рівнів енергій, імовірностей радіаційних переходів, імовірностей переходів між рівнями, спричинених зіткненнями з електроном;

2. розрахунок заселеності рівнів іона в плазмі з урахуванням всіх переходів за рахунок зіткнень всередині іона. Крім того, повинні враховуватись елементарні процеси в плазмі, що відбуваються між розглянутим іоном і іоном суміжної стадії іонізації;

3. пошук оптимальних умов в плазмі для виникнення інверсії між певними рівнями, розрахунок коефіцієнтів посилення в залежності від параметрів плазми, а також розрахунок часових залежностей коефіцієнтів посилення;

4. подання результату розрахунку інтенсивностей ліній у вигляді модельного спектра - візуалізація модельного спектра на екрані комп'ютера і у друкованому вигляді. Це дає можливість детального вивчення фрагментів спектра в заданому діапазоні довжин хвиль, а також при різній довжині плазмового шнура. З використанням модельних спектрів можна передбачити оптимальні умови в плазмі для спостереження посилення на кожному з можливих переходів, а також запропонувати нові схеми для створення рентгенівських лазерів.

Тож, актуальним є вирішення наступних проблем фізики рентгенівського лазера (разера) [3, 8, 15, 68, 70]:

1. збільшення інтенсивності вхідного лазерного променя. Для цього необхідно визначення оптимальних умов в плазмі для досягнення максимальної інверсії й коефіцієнта посилення;

2. просування в короткохвильову область спектра, в область з $\lambda=13^{-14}$ нм, $\lambda=11^{-12}$ нм, для цих довжин хвиль розроблені високоефективні багатошарові дзеркала. Для біологічних і медичних програм принципово важливим є створення лазера в області так званого "Водяного вікна": $23\text{\AA} < \lambda < 44\text{\AA}$.

Для вирішення цих проблем необхідна коректна інтерпретація експериментальних інтенсивностей ліній БІ; причому в багатьох випадках спектри цих іонів ще не вивчені прецизійними методами. Наприклад, в перших експериментах, виконаних в лазерній плазмі на переходах Ne-подібних іонів селену, цинку, германію, срібла, посилення спостерігалось на переходах $1s^2 2s^2 2p^5 3p[J=2] - 1s^2 2s^2 2p^5 3s[J=1]$ (на 2-1 3p-3s переходах). Це суперечило теоретичним прогнозам щодо найбільш сильного посилення на $1s^2 2s^2 2p^5 3p[J=0] - 1s^2 2s^2 2p^5 3s[J=1]$ (на 0-1 3p-3s переході). Однак в наступних експериментах, виконаних в капілярному розряді, в Ne-подібному аргоні, посилення спостерігалось лише на 0-1 3p-3s переході. В подальших експериментах посилення спостерігалось на різних переходах, в тому числі, і на переході між високозбудженими станами Ne-подібного германію $1s^2 2s 2p^6 3d[J=2] - 1s^2 2s^2 p^6 3p[J=1]$.

Зрозуміло, розрахунок плазмової кінетики неможливий без знання перерізів збудження і сил електрон-іонних зіткнень для БІ. Серед численних класів БІ найбільш вивченими є найбільш прості H- і He-подібні іони. Багатоелектронні іони вивчені значно гірше (див. [1-39, 67-69, 103-113, 182, 184-187]). Перш за все, це стосується вивчення різних радіаційних характеристик і характеристик зіткнень, в т.ч. перерізів і сил електрон-іонних зіткнень.

Облік зовнішніх полів, впливу плазмового середовища на спектри іонів і характеристики різних елементарних процесів зіткнень досі належить до далеких від свого вирішення, для проблеми спектроскопії за рахунок зіткнень лише в останні роки (див., напр., [3,7,21,22]) стали з'являтися ідеї розвитку послідовних підходів, що враховують полум'яне оточення. Причому в певному інтервалі густини і температур вплив плазмового середовища на процеси, пов'язані із зіткненнями за участю фотонів, електронів, іонів, може бути дуже радикальним (див. нижче), а також [3, 7, 8, 16-22, 106, 182, 184-189] і традиційно ті методи, які використовувались, типу ТЗ стають принципово не здатними відповідати дійсності.

1.2. Основні уявлення про фізичну природу радіаційних переходів в релятивістській атомній спектроскопії

1.2.1 Вступні зауваження

Як вказувалося, найбільш адекватною основою для послідовної теорії радіаційних атомних переходів є квантова електродинаміка [101,102,1,2,113]. Відоме фундаментальне обставина, пов'язане з порівняльною слабкістю електромагнітної взаємодії (мова йде про малість відповідної безрозмірною «константи зв'язку»-постійно тонкої структури $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$), відіграє вкрай важливу роль, зокрема, дозволяючи описувати взаємодію електронів з електромагнітним полем (фотонним вакуумом), як правило, в рамках формалізму теорії збурень [101].

Як правило, для опису електромагнітної взаємодії в класичній електродинаміці використовується вираз [101,102]

$$-ej^\mu A_\mu \quad (1.1)$$

в густини лагранжіана системи «поле + заряди» (A - 4- потенціал поля, j - 4-вектор густини струму частинок). Зрозуміло, щільність струму відповідають відомому рівнянню безперервності (закон збереження заряду):

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (1.2)$$

Слід згадати, що з шуканим законом збереження пов'язано таке фундаментальне властивість як калібрувальна інваріантність теорії. Очевидно, при заміні $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \chi$ до густини лагранжіана (1.1) додається величина $-ej^\mu \partial_\mu \chi$, яка в силу (1.2) представляється у вигляді 4-дивергенції

$$-e\partial_\mu(\chi j^\mu)$$

і тому випадає при інтегруванні по d^4x в дії: $S = \int L d^4x$.

Як відомо, в квантовій електродинаміці [101,102] відповідні 4-вектори j і A замінюються вдруге квантовими операторами, причому,

наприклад, оператор струму визначається стандартно через ψ - оператори згідно $\hat{j} = \hat{\psi}\gamma\hat{\psi}$, а роль узагальнених «координат» q в лагранжіані

$$\int \hat{L}_{\text{ВЗАИМ}} d^3 x = -e \int (\hat{j}\hat{A}) d^3 x$$

грають $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}$, \hat{A} в кожній точці простору. Нагадаємо, що внаслідок залежності густини лагранжіана тільки від самих «координат» q (але не від їх похідних по x), перехід до густини гамільтоніана зводиться лише до зміни знаку густини лагранжіана.

Оператор електромагнітної взаємодії (інтеграл по простору від густини гамільтоніана взаємодії) має стандартний вид

$$\hat{V} = e \int (\hat{j}\hat{A}) d^3 x. \quad (1.3)$$

Оператор вільного електромагнітного поля є сумою

$$\hat{A} = \sum_n [\hat{c}_n A_n(x) + \hat{c}_n^+ A_n^*(x)], \quad (1.4)$$

що містить оператори народження і знищення фотонів в різних станах (нумерованих індексом n).

Теорія випромінювання фотонів внаслідок радіаційного розпад збуджених атомних станів, природно, будується в рамках формалізму ТВ. Імовірність переходу під впливом збурень в першому наближенні дається відомими формулами ТВ.

Нехай початковий і кінцевий стани випромінює системи відносяться до дискретного спектру. Імовірність (в од. Часу) переходу $i \rightarrow f$ з випусканням фотона визначається відомим виразом (золоте правило Фермі):

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) dv, \quad (1.5)$$

де v умовно позначає сукупність величин, що характеризують стан фотона і пробігають безперервний ряд значень (при цьому хвильова функція фотона передбачається нормованою на δ - функцію «за шкалою v »).

Слід нагадати, що, якщо випускається фотон з певним значенням моменту, то єдиною безперервної величиною є частота ω . Інтегрування формули (1.5) по $d\nu \equiv d\omega$ усуває δ - функцію і тоді ймовірність переходу дається стандартним виразом:

$$\omega = 2\pi|V_{fi}|^2. \quad (1.6)$$

Далі, як зазвичай, якщо розглядати випускання фотона з заданим імпульсом \mathbf{k} , то очевидно:

$$d\nu = d^3k/(2\pi)^3 = \omega^2 d\omega d\Omega/(2\pi)^3.$$

Природно, тут передбачається, що хвильова функція фотона (плоска хвиля) нормована на один фотон в об'ємі $V = 1$ і $d\nu$ - число станів, що припадають на фазовий об'єм Vd^3k . В результаті, легко отримати вірогідність випускання фотона з заданим імпульсом в наступному вигляді

$$d\omega = 2\pi|V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (1.7)$$

і далі після інтегрування по $d\omega$:

$$d\omega = \frac{1}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega^2 d\Omega. \quad (1.8)$$

Далі в останній вираз підставляється стандартний матричний елемент виду (1.1), тобто

$$V_{fi} = e\sqrt{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} e_{\mu}^* j_{fi}^{\mu}(k) \quad (1.9)$$

Простота, на перший погляд, обчислення відповідних матричних елементів і відповідних ймовірностей в принципі зберігається лише для атома водню. Для багатоелектронних релятивістських систем ситуація виявляється значно складніше (див. нижче) [1,2,99,100,104-108, 125,126].

1.2.2 Електричне дипольне випромінювання

Отримані вище формули легко адаптуються до опису випускання фотона релятивістським електроном в заданому зовнішньому полі. Нагадаємо, що струм переходу в даному випадку - матричний елемент оператора $\hat{j} = \hat{\bar{\psi}}\gamma\hat{\psi}$, де, зазвичай, ψ - оператори передбачаються розкладеними по системі хвильових функцій стаціонарних станів електрона в даному полі. Переходу електрона зі стану i в стані f відповідає матричний елемент $\langle 0_i 1_f | j | 1_i 0_f \rangle$. Шукане зміна чисел заповнення, природно, здійснюється оператором $\hat{a}_f^\dagger \hat{a}_i$, і для струму переходу можна записати:

$$j_{fi}^\mu = \bar{\psi}_f \gamma^\mu \psi_i = (\psi_f^* \psi_i, \psi_f^* \alpha \psi_i), \quad (1.10)$$

де ψ_i і ψ_f - хвильові функції початкового і кінцевого станів електрона.

Далі, якщо хвильову функцію фотона вибрати в трьохмірно поперечного калібрування (4-вектор поляризації $e = (0, e)$), то неважко записати наступну відому формулу для ймовірності випромінювання (в 1 с) в елемент тілесного кута do фотона з поляризацією e [101,102]:

$$d\omega_{en} = e^2 \frac{\omega}{2\pi} |e^* j_{fi}(k)|^2 do, \quad (1.11)$$

де

$$j_{fi}(k) = \int \psi_f^* \alpha \psi_i e^{-ikx} d^3x. \quad (1.12)$$

З урахуванням підсумовування по поляризаціях фотона (шляхом усереднення за напрямками e в площині, перпендикулярній заданому напрямку $n = \frac{k}{\omega}$), вираз для ймовірності випромінювання прийме наступний вигляд:

$$d\omega_n = e^2 \frac{\omega}{2\pi} \left| \left[n j_{fi}(k) \right] \right|^2 do. \quad (1.13)$$

В атомній спектроскопії, як правило, розглядається випадок, коли довжина хвилі фотона λ велика в порівнянні з розмірами випромінюючої системи a .

Така ситуація пов'язана з децицею швидкостей частинок у порівнянні зі швидкістю світла. З іншого боку, типові для атомних радіаційних переходів довжини хвиль лежать у видимій і УФ частини спектру. Дипольне випромінювання відповідає першому наближенню по a/λ в струмі переходу (1.12).

В цьому випадку множник e^{-ikr} мало змінюється в області, де ψ_i або ψ_f помітно відмінні від нуля, і може бути замінений просто одиницею. Фактично, шукана заміна означає нехтування імпульсом фотона в порівнянні з імпульсами частинок в атомній системі.

У нерелятивістській теорії в рамках дипольного наближення інтеграл $j_{fi}(\mathbf{0})$, як зазвичай, замінюється його нерелятивістським виразом, тобто просто матричним елементом v_{fi} швидкості електрона на шредінгеровських хвильових функціях. Фактично, шуканий елемент має звичний вигляд: $v_{fi} = -i\omega r_{fi}$, а відповідно $er_{fi} = d_{fi}$, де d – дипольний момент електрона (в його орбітальному русі).

Формула для ймовірності дипольного випромінювання має такий відомий вид [101,102]:

$$d\omega_{en} = \frac{\omega^3}{2\pi} |e^* d_{fi}|^2 d\omega. \quad (1.14)$$

В (1.14), як зазвичай, напрямок n задано в неявному вигляді, тому що фактично вектор поляризації e повинен бути перпендикулярний n . Після тривіального підсумовування по поляризаціях, неважко записати:

$$d\omega_n = \frac{\omega^3}{2\pi} |[nd_{fi}]|^2 d\omega. \quad (1.15)$$

У нерелятивістській теорії, внаслідок нерелятивістського (по відношенню до електрона) характеру вище наведених формул, шукані вирази легко узагальнюються на будь-які електронні системи. При цьому під d_{fi} в (1.14,1.15) слід розуміти матричний елемент повного дипольного

моменту. Далі, очевидно, після інтегрування в усіх напрямках неважко визначити повну ймовірність випромінювання:

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2, \quad (1.16)$$

а повну інтенсивність I випромінювання отримати множенням ймовірності на $\hbar\omega$:

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3} |d_{fi}|^2. \quad (1.17)$$

Зрозуміло, записані формули виявляються повністю аналогічними класичним формулами електродинаміки для інтенсивності дипольного випромінювання системою періодично рухомих частинок, зокрема, інтенсивність випромінювання частоти $\omega_s = s\omega$ (де ω - частота руху частинок, s - ціле число) дається відомим виразом:

$$I = \frac{4\omega_s^4}{3c^3} |d_s|^2, \quad (1.18)$$

де d_s - компоненти Фур'є дипольного моменту, тобто коефіцієнти розкладання

$$d(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} d_s e^{-is\omega t}. \quad (1.19)$$

Зрозуміло, квантова формула (1.18) виходить з (1.19) заміною компонент Фур'є матричними елементами відповідних переходів. Детальний пояснення шуканих правил (фактично виражають собою відомий принцип відповідності Бора) можна знайти в класичних підручниках по квантовій механіці і атомної спектроскопії [13,15]. Природно, тут мова йде про окремий випадок загального відповідності між компонентами Фур'є класичних величин і квантовими матричними елементами.

1.2.3 Електричне мультипольне випромінювання

Далі розглянемо загальний випадок електричного мультипольного випромінювання (надалі особливу увагу ми приділимо електричним квадрупольним переходам). Зручніше розглядати випромінювання фотона не в заданому напрямку (тобто з заданим імпульсом), а випромінювання фотона з певними значеннями моменту j і його проекції m на деякий обраний напрям, скажімо, z . Нагадаємо, що в цьому випадку зазвичай розглядають фотони двох типів - електричного і магнітного. Природно, в разі атомних систем знову вважати, що розміри випромінюючої системи малі в порівнянні з довжиною хвилі.

Далі скористаємося поданням хвильових функцій фотона в імпульсному представленні, тобто, як зазвичай, розкладаючи 4-вектор потенціалу електромагнітного поля $A^\mu(\mathbf{r})$ у вигляді інтеграла Фур'є [101,102]. Цікавий матричний елемент тоді записується у вигляді:

$$V_{fi} = e \int j_{fi}^\mu(\mathbf{r}) A_\mu^*(\mathbf{r}) d^3x = e \int d^3x \cdot j_{fi}^\mu(\mathbf{r}) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A^*(\mathbf{r}) e^{-ikr} \quad (1.20)$$

тут, слідуючи стандартному спрощенню запису формул, опущені індекси $\omega j m$ у хвильових функцій фотона. Далі для електричного Ej - фотона використовується стандартне вираз для хвильової функції з вибором довільної калібрувальної постійної C у вигляді:

$$C = -\sqrt{\frac{j+1}{j}}.$$

Мотивація такого вибору пояснюється стандартно (див., Напр., [101,102]) і пов'язана з тим, щоб в просторових компонентах хвильової функції (A) скоротилися члени, що містять кульові функції порядку $j - 1$. В цьому випадку A буде містити тільки кульові функції порядку $j + 1$, в результаті чого відповідний внесок в V_{fi} виявиться більш високого порядку малості (по a/λ), ніж внесок від компоненти $A^0 \equiv \Phi$, містить кульові функції нижчого порядку j . Тоді можна стандартно записати:

$$A^\mu = (\Phi, \mathbf{0}), \quad \Phi = -\sqrt{\frac{j+1}{j}} \frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}} \delta(|\mathbf{k}| - \omega) Y_{jm}(\mathbf{n}) \quad (1.21)$$

де $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{\omega}$. Підстановка (1.21) в вираз (1.20) дозволяє після тривіального інтегрування по $|\mathbf{k}|$, отримати

$$V_{fi} = -e \sqrt{\frac{j+1}{j}} \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3x \cdot \rho_{fi}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{o}_n e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} Y_{jm}^*(\mathbf{n}). \quad (1.22)$$

Зазвичай далі для обчислення внутрішнього інтеграла використовується відоме розкладання виду:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l g_l(kr) Y_{lm}^*\left(\frac{\mathbf{k}}{r}\right) Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right), \quad (1.23)$$

с функцією

$$g_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr),$$

містить функцію Бесселя першого роду. Відзначимо, тут, що в подальшому при формулюванні нашої теорії ми також будемо використовувати вираз виду (1.23), застосовуючи, однак, інше позначення. Неважко показати (див. Детальніше викладення в [101,102]), що підстановка (1.23) в (1.22), дозволяє тривіально отримати:

$$\int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} Y_{jm}^*(\mathbf{n}) d\mathbf{o}_n = 4\pi i^{-j} g_j(kr) Y_{jm}^*\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \quad (1.24)$$

Природно, в силу умови $a/\lambda < 1$, справедливого для атома, в інтегралі по d^3x гратимуть роль лише відстані, для яких $kr \sim 1$. З цієї причини зазвичай функції $g_j(kr)$ замінюють першими членами їх розкладів по kr , тобто:

$$g_j(kr) \approx \frac{(kr)^j}{(2j+1)!!}, \quad (1.25)$$

що дозволяє остаточно отримати для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = (-1)^{m+1} i^j \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} e \left(Q_{j,-m}^{(\varepsilon)} \right)_{fi}, \quad (1.26)$$

де, як зазвичай, використовуються позначення для величин [101,102]:

$$\left(Q_{jm}^{(\varepsilon)} \right)_{fi} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int \rho_{fi}(r) r^j Y_{jm} \left(\frac{r}{r} \right) d^3x, \quad (1.27)$$

так званих $2j$ - рільний електричними моментами переходу системи за аналогією з відповідними класичними величинами. Це дозволяє для електрона на зовнішньому полі (з $\rho_{fi} = \psi_f^* \psi_i$) обчислювати (1.27) як матричні елементи від класичної величини

$$Q_{jm}^{(\varepsilon)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} r^j Y_{jm}.$$

Зрозуміло, в нерелятивістській теорії момент переходу фактично обчислюється аналогічним чином для будь-якої системи N взаємодіючих частинок. Природно, відповідна щільність переходу буде тривіально виражатися через хвильові функції системи у вигляді

$$\rho_{fi}(r) = \int \psi_f^*(r_1, \dots, r_N) \psi_i(r_1, \dots, r_N) \sum_{n=1}^N \delta(r - r_n) \cdot d^3x_1 \dots d^3x_N, \quad (1.28)$$

де інтеграл береться по всьому конфігураційному простору. Слід зауважити, що мова тут йде лише про загальних виразах, і зрозуміло, їх конкретна реалізація в разі переходів в спектрах багатоелектронних атомних систем стикається з відомими проблемами правильного і адекватного визначення як хвильових функцій частинок, так і ефектів міжчасткових кореляцій (див. Класичні монографії [101,102]). Далі неважко отримати вираз для імовірності електричного Ej – випромінювання:

$$\omega_{jm}^{(\varepsilon)} = \frac{2(2j+1)(j+1)}{j[(2j+1)!!]^2} \omega^{2j+1} e^2 \left| \left(Q_{j,-m}^{(\varepsilon)} \right)_{fi} \right|^2. \quad (1.29)$$

В окремому випадку розглянутого вище дипольного випромінювання (тобто при $j=1$) легко отримати звичайне вираз:

$$\omega_{1m}^{(\vartheta)} = \frac{4\omega^3}{3} e^2 \left| \left(Q_{1,-m}^{(\vartheta)} \right)_{fi} \right|^2, \quad (1.30)$$

де величини $Q_{1m}^{(\vartheta)}$ пов'язані з компонентами вектора електричного дипольного моменту відомими формулами:

$$eQ_{10}^{(\vartheta)} = id_z,$$

$$eQ_{1,\pm 1}^{(\vartheta)} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} (d_x \pm id_y). \quad (1.31)$$

Підсумовування у формулі (1.30) за значеннями m дозволяє легко отримати записану вище формулу для повної ймовірності дипольного випромінювання.

Корисним є також розгляд кутового розподілу мультипольного випромінювання.

З урахуванням нормування на повну вірогідність випускання ω_{jm} неважко записати шукану формулу у вигляді:

$$d\omega_{jm} = \left| Y_{jm}^{(\vartheta)}(\mathbf{n}) \right|^2 \omega_{jm} d\Omega = \frac{\omega_{jm}}{j(j+1)} \left| \nabla_{\mathbf{n}} Y_{jm} \right|^2 d\Omega. \quad (1.32)$$

В окремому випадку дипольного випромінювання $j=1$ в (1.32), як і слід було очікувати, будуть фігурувати величини

$$Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi},$$

де θ, ϕ - полярний кут і азимут напрямку \mathbf{n} щодо осі z .

Відповідні тривіальні обчислення дають наступні відомі формули для кутового розподілу дипольного випромінювання з певними значеннями m [101,102]:

$$d\omega_{10} = \omega_{10} \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta d\theta,$$

$$d\omega_{1,\pm 1} = \omega_{1,\pm 1} \frac{3}{8\pi} \frac{1+\cos^2 \theta}{2} d\theta. \quad (1.33)$$

Слід нагадати, що, якщо порядок величини розміру атомної системи є a , то, природно, порядок величини електричних мультипольних моментів є, як правило,

$$Q_{jm}^{(3)} \sim a^j. \quad (1.34a)$$

а ймовірність ж мультипольного випромінювання дається оцінкою:

$$\omega_{jm}^{(3)} \sim \alpha k (ka)^{2j}. \quad (1.34b)$$

Тобто, неважко помітити, що збільшення ступеня мультипольності на 1 зменшує ймовірність випромінювання щодо $\sim (ka)^2$.

Слід пам'ятати також, що залежність ймовірності випускання від квантових чисел m , M_i , M_f фактично визначається тензорним характером відповідних мультипольних моментів (Q_{jm} із заданим j - сферичний тензор рангу j). Відповідна залежність матричних елементів (точніше квадратів) від зазначених квантових чисел дається відомою формулою:

$$\left| \langle n_f J_f M_f | Q_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle \right|^2 = \begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2 \left| \langle n_f J_f | Q_{j,-m} | n_i J_i \rangle \right|^2, \quad (1.35a)$$

де літера n означає сукупність інших, крім J і M , квантових чисел стану системи, інші позначення є стандартними. Легко бачити, що шукана залежність визначається множником (природно, передбачається, що система не знаходиться в зовнішньому полі, тобто частота переходу ω не залежить від чисел M_i і M_f):

$$\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2. \quad (1.35б)$$

Тривіальне підсумовування ймовірності за всіма значеннями M_f (при заданому M_i):

$$\sum_{M_f} \left| \langle n_f J_f M_f | Q_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle \right|^2 = \frac{1}{2J_i + 1} \left| \langle n_f J_f || Q_{j,-m} || n_i J_i \rangle \right|^2 \quad (1.35в)$$

дозволяє отримати повну вірогідність випускання фотона даної частоти з початкового рівня атомної системи $n_i J_i$ [101].

Далі відзначимо, що характерні для різних типів випромінювання правила відбору, що обмежують можливі зміни стану випромінює системи, визначаються відповідними законами збереження моменту в парності. Наприклад, якщо початковий момент атомної системи дорівнює J_i , то після випромінювання фотона з моментом j момент системи може приймати лише значення J_f , визначаються правилом складання моментів ($J_i - J_f = j$):

$$|J_i - J_f| \leq j \leq J_i + J_f. \quad (1.35г)$$

Природно, можливі значення моменту фотона j при заданих значеннях J_i і J_f визначаються тими ж правилами.

В атомній спектроскопії протягом довгого часу основна увага приділялася електричним дипольним переходам в спектрах атомних систем як найбільш інтенсивним. Справа в тому, що в атомах ймовірність випромінювання швидко убуває зі збільшенням j і найбільш інтенсивне випромінювання відповідає, на відміну, скажімо, від ядер, найменшій можливій мультипольності. проекції M_i і M_f моментів J_i і J_f разом з проекцією m моменту фотона задовольняють звичайним правилом [104]:

$$M_i - M_f = m. \quad (1.36)$$

Парності P_i і P_f початкового і кінцевого станів випромінює атомної системи повинні задовольняти умові $P_f P_\Phi = P_i$, де P_Φ - парність випромінюваного фотона.

Очевидно, оскільки парності можуть мати лише значення ± 1 , це правило набуває вигляду:

$$P_i P_f = P_\Phi.$$

Природно, для фотона електричного типу $P_\Phi = (-1)^J$, звідси впливає правило відбору по парності для електричного мультипольного випромінювання:

$$P_i P_f = (-1)^J. \quad (1.36a)$$

Зрозуміло, шукані правила відбору по повному моменту і по парності є строгими і повинні дотримуватися при випромінюванні будь-якими атомними системами. З іншого боку, в різних частинах випадках і приватних системах можуть мати місце наближені правила відбору, які визначаються тими чи іншими особливостями випромінюючих систем [101-104]. Особливо багатою на відносно нові для класичної атомної спектроскопії областю, де вводиться багато нетрадиційних правил відбору, є наприклад лазерна-гамма-бета-альфа-електронна спектроскопія атомів і молекул (див. [1-3]).

1.2.4 Магнітне мультипольне випромінювання

Розглянемо тепер відомі елементи теорії магнітного мультипольного випромінювання, оскільки побудова послідовної теорії заборонених магнітних дипольних переходів відноситься до однієї з найважливіших завдань роботи. Хвильова функція фотона магнітного типу $A^\mu = (0, A)$, де потенціал A дається стандартною формулою [101,102]. Підстановка хвильової функції фотона магнітного типу в вираз (1.20) дозволяє отримати наступне відомий вислів для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = -e \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3x \cdot j_{fi}(\mathbf{r}) \int d\Omega_n \cdot e^{-ikr} Y_{jm}^{(M)*}(\mathbf{n}). \quad (1.37)$$

Тут компоненти вектора $Y_{jm}^{(M)}$ виражаються стандартним чином через кульові функції порядку j . Скориставшись далі формулами (1.23), (1.24) неважко отримати такий вираз:

$$V_{fi} = -ei^{-j} \frac{2\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} \int j_{fi}(r) r^j Y_{jm}^{(M)*} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) d^3x, \quad (1.37a)$$

де

$$Y_{jm}^{(M)} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{\sqrt{j(j+1)}} [\mathbf{r} \nabla Y_{jm}].$$

Зазвичай остаточно матричний елемент зручно представити у вигляді:

$$V_{fi} = (-1)^m i^j \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} e(Q_{j,-m}^{(M)})_{fi} \quad (1.37б)$$

з явно введеними 2^j -польними магнітними моментами переходу магнітними моментами переходу [101,102]:

$$(Q_{jm}^{(M)})_{fi} = \frac{1}{j+1} \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int [\mathbf{r} j_{fi}] \nabla (r^j Y_{jm}) d^3x. \quad (1.37в)$$

Неважко зрозуміти, що формули для випускання фотона магнітного типу відрізняються від аналогічних формул випускання фотона електричного типу заміною електричних моментів магнітними. Це стосується також і відповідних виразів для кутового розподілу. напр., Класична формула для повної ймовірності M_J -випромінювання записується в певний вид:

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mu_{fi}|^2. \quad (1.38a)$$

Зрозуміло, можна виявити зв'язок цієї формули зі звичайним квантовим нерелятивістським виразом оператора магнітного моменту. Струм переходу:

$$j_{fi} = -\frac{i}{2m} (\psi_f^* \nabla \psi_i - \psi_i \nabla \psi_f^*) + \frac{\mu}{e\hbar} \text{rot}(\psi_f^* \hat{s} \psi_i), \quad (1.38б)$$

де μ - магнітний момент, s - спін.

Вираз для μ_{fi} має звичайний вигляд:

$$\mu_{fi} = \int \psi_f^* \left(\frac{e}{2m} \hat{L} + \frac{\mu}{s} \hat{S} \right) \psi_i d^3x, \quad (1.39)$$

де $\hat{L} = -i[r\nabla]$ - оператор орбітального моменту частинки. Зрозуміло, μ_{fi} виявляється матричним елементом оператора

$$\hat{\mu} = \frac{e}{2m} \hat{L} + \frac{\mu}{s} \hat{S}, \quad (1.40)$$

складається з операторів орбітального і власного магнітних моментів частинки. Нарешті, відзначимо, що для магнітного мультипольного випромінювання правила відбору аналогічні правилам для електричного випадку.

Зокрема, для парності справедливо правило

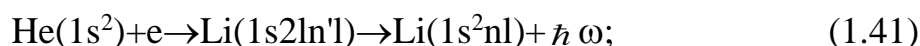
$$P_i P_f = (-1)^{j+1}.$$

1.3 Елементи теорії спектрів автоіонізаційних станів та діелектронних сателітів для легких іонів в плазмі

Аналізуючи ступінь вивченості атомів і іонів з точки зору знання їх спектральних, наприклад, автоіонізаційних параметрів, очевидно, слід констатувати вкрай високий ступінь неоднорідності вивчення різних класів легких, середніх та важких атомів і іонів. До числа найбільш вивчених природньо і досить простих з точки зору електронної структури іонів відносяться Н-і Не- подібні іони.

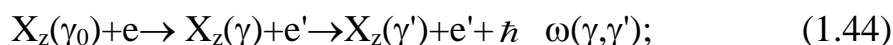
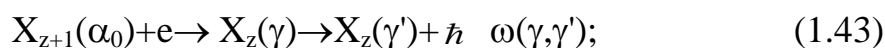
Розглянемо коротко, дотримуючись [291], основні характеристики розпаду автоіонізаційних станів (з утворенням в тому числі, діелектронних сателітів) на прикладі шуканих іонів. Сателіти резонансних ліній Н і Не- подібних іонів обумовлені переходами з двічі порушених рівнів відповідно Не- і Li- подібних іонів, тобто сателітами резонансних ліній $2p_{1/2} - 1s_{1/2}$, $2p_{3/2} - 1s_{1/2}$ є все лінії типу $2lnl'LSJ - 1snl''L'S'J'$, а сателітами резонансних ліній $1s2p^{l,3}P_1 - 1s^2 \ ^1S_0$ – лінії типу $1s2lnl'LSJ - 1s^2nl''L'S'J'$ при всіх можливих значеннях індексів l, L, S, J . К резонансним лініям Не- подібних іонів відносяться також лінії типу $1s2s^{n_1} 2p^{n_2} - 1s^2 2s^{n_1} 2p^{n_2-1}$.

Цікавими є також сателіти $1s2ln'l'SJ - 1s^22lL'S'J'$ до ліній $1snp^{1,3} P_1 - 1s^21S_0$. Зазначені сателіти, як правило, прийнято називати діелектронними сателітами (ДС), хоча, очевидно, що механізм діелектронної рекомбінації є не єдиним для освіщення даних автоіонізаційних станів. Зокрема, конкуруючим з ним є також механізм збудження електронним ударом. Як приклад розумно вказати наступні процеси [291],:



де He і Li - відповідно He- і Li- подібні іони.

У більш загальному вигляді (1.41) і (1.42) можна переписати як [291]:



де z - спектроскопічний символ іона $X_z(\gamma)$, який утворює сателітний спектр типу $\gamma - \gamma'$; $\omega(\gamma, \gamma')$ - частота переходу $\gamma - \gamma'$.

Сукупність квантових чисел γ , описують автоіонізаційні стани, і значення $\alpha_0, \gamma_0, \gamma'$ можуть бути самими різними залежно від стану плазми. Для наведеного прикладу (1.21) і (1.22) γ' є збудженим станом, а α_0, γ_0 - основними станами іонів з кратністю іонізації z і $z-1$.

Природно, до числа ключових характеристик сателітних спектрів відноситься безпосередньо довжини хвиль відповідних переходів, ймовірності та інтенсивності ліній.

Теоретичний опис, як правило, включає визначення енергій збудження, радіаційної та автоіонізаційної ширини, часу життя рівнів. Зазвичай інтенсивність ліній, що утворюються за рахунок цих двох механізмів, пропорційна факторам $Q_d(\gamma, \gamma')$ і $K(\gamma, \gamma')$

$$Q_d(\gamma, \gamma') = \frac{g_{\gamma'} A(\gamma, \gamma') \Gamma(\gamma)}{A(\gamma) + \Gamma(\gamma)} \quad (1.45)$$

$$K(\gamma, \gamma') = \frac{A(\gamma, \gamma')}{A(\gamma) + \Gamma(\gamma)} \quad (1.46)$$

де

$$g_\gamma = 2J+1;$$

$$A(\gamma) = \sum_{\gamma'} A(\gamma, \gamma');$$

$A(\gamma, \gamma')$ і $\Gamma(\gamma)$ - ймовірності радіаційних переходів і безрадіаційних розпадів.

Позначення (1.45) і (1.46) традиційно використовуються в роботах, присвячених розшифровці спектрів. В рамках методу теорії збурень (ТВ) по $1/Z$ (див. [126]) розрахунок довжин хвиль переходів зводиться до обчислення матриці енергії, яка в схемі LS - зв'язку має вигляд:

$$\begin{aligned} E(a_1L_1S_1J_1, a_2L_2S_2J_2) = & \delta(L_1, L_2, S_2) [\delta(a_1, a_2) E_0 Z^2 + \Delta E_1(a_1L_1S_1, a_2L_1S_1) Z + \\ & + \Delta E_2(a_1L_1S_1, a_2L_1S_1) + (\alpha^2/4) \delta(a_1, a_2) E_0^r Z^4 + (\alpha^2/4) \Delta E_1^r(a_1L_1S_1, a_2L_1S_1) Z^3] + \\ & + (\alpha^2/4) \{Z - A(a_1L_1S_1, a_2L_2S_2)\}^3 [Z - B(a_1L_1S_1, a_1L_2S_2) E^{(0)} Q_1 + \\ & + \varepsilon_{\delta Q}(a_1L_1S_1, a_2L_2S_2) Q^1 + \varepsilon_{\delta\delta}(a_1L_1S_1, a_2L_2S_2) Q_2]. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Коефіцієнти (1.47) детально розписані в [125]. В результаті діагоналізації шуканої матриці виходять значення енергії $E_J^J(aLS)$ і вектори проміжної схеми зв'язку $C_J(aLS', a'L'S')$. Ймовірність радіаційних переходів:

$$\begin{aligned} A(aLSJ, a'L'S'J') = & \frac{2}{2J+1} [E^J(aLS) - E^{J'}(a'L'S')]^3 \times \\ & \times \left| \sum_{a_1L_1S_1} \sum_{a'_1L'_1S'_1} B_3 C^J(aLS, a_1L_1S_1) C^{J'}(a'_1L'_1S'_1, a'L'S') \times \right. \\ & \left. \times \frac{1}{Z} \varepsilon(a_1L_1S_1, a'_1L'_1S'_1) [1 + \frac{1}{Z} \tau(a_1L_1S_1, a'_1L'_1S'_1)] \right|^2, \end{aligned} \quad (1.48)$$

де ε, τ - чисельні коефіцієнти.

Ймовірність безрадіаційного розпаду:

$$\begin{aligned} \Gamma(aLSJ) = & \sum_{a_1L_1S_1} \sum_{a_2} C^J(aLS, a_1L_1S_1) \Gamma(a_1L_1S_1, a_2L_1S_1) \times \\ & \times C^J(a_2L_2S_1, aLS), \end{aligned} \quad (1.49)$$

Таблиця 1.1 - Константи в (1.42) і (1.43) для сателітів резонансних ліній He-подібних іонів $E(\alpha_0)=E(1s^2)-E(1s)$; $E(\alpha)=E(1s2p,^1P)-E(1s)$; $E(z)=E(1s^22s)-E(1s^2)$; $-E(\alpha\alpha_0)=E(1s^2)-E(1s2p,^1P)$

Z	-E(α_0)	-E(α)	E(z)	E($\alpha\alpha_0$)	$C_d \cdot 10^{16}$	$T_m \cdot 10^6 K$	β_m	$\delta\beta_m$
6	28,82	6,19	4,73	22,63	7,93	0,79	4,53	0,946
7	40,57	8,92	7,18	31,65	7,05	1,26	3,97	0,900
8	54,34	12,15	10,1	42,19	6,47	1,87	3,575	0,856
10	87,89	20,12	17,6	67,77	5,81	3,57	3,00	0,779
12	129,5	30,1	27,1	99,40	5,42	6,02	2,61	0,709
13	153,3	35,8	32,5	117,5	5,28	7,56	2,45	0,678
14	179,2	42,1	38,5	137,1	5,16	9,33	2,32	0,651
16	237,0	56,1	52,0	180,9	4,98	13,6	2,10	0,604
20	377,0	90,1	85,1	286,1	4,76	25,4	1,78	0,529
22	459,4	110,2	105	349,2	4,67	33,0	1,67	0,502
26	649,0	156,4	150	492,6	4,57	52,8	1,47	0,449
28			176	573,8	4,52	64,5	1,41	0,430
32			267	856,5	4,43	108	1,25	0,390

Примітка. Значення $E(\alpha_0)$, $E(\alpha)$, $E(z)$, $E(\alpha\alpha_0)$ дані в Ry ($1Ry=0,158 \cdot 10^6$ K).

Слід підкреслити, що матрицю енергії зазвичай складають як для автоіонізаційних станів, описуваних сукупністю індексів $\gamma=aLSJ$, так і для нижніх збуджених станів $\gamma'=a'L'S'J'$.

У завданнях діагностики плазми виникає необхідність в знанні відносних інтенсивностей ДС. Звичайне визначення шуканої інтенсивності можна описати так:

$$i_d(\gamma-\gamma')=I_S(\gamma-\gamma')/I_R(\alpha-\alpha_0), \quad (1.50)$$

де $I_S(\gamma-\gamma')$ - інтенсивність сателітної лінії; $I_R(\alpha-\alpha_0)$ - інтенсивність відповідної резонансної лінії.

Як було показано Сафроновою і Вайнштейном (див. [126]), відносна інтенсивність ДС може бути представлена у вигляді:

$$i_d(\gamma-\gamma')=C_d\varphi_d(T)Q_d(\gamma-\gamma'); \quad (1.51)$$

де

$$C_d = 10^8 \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{g_0 B} \left(\frac{E(\alpha_0)}{E(\alpha)} \right)^{3/2} \frac{E(\alpha \alpha_0)}{E(z)}; \rho_d(T) = \delta\beta e^{\delta\beta \frac{\beta+\chi}{\beta+1}}; \quad (1.52)$$

$$\beta = \frac{E(\alpha \alpha_0)}{T}; \delta\beta = \frac{E(z)}{T} = \frac{E(\alpha \alpha_0) - E(\gamma \alpha_0)}{T}; z = Z = N + 1. \quad (1.53)$$

Індекси α , α_0 тут ставляться до резонансної лінії, а індекси γ - до сателіту, що розглядається. Зокрема, для сателітів до резонансних ліній Н- і Не- подібних іонів $E(\alpha)$ і $E(\alpha_0)$ можна записати:

$$E(\alpha) = E(2p); E(\alpha_0) = E(1s);$$

$$E(\alpha) = E(1s2p, {}^1P) - E(1s); E(\alpha_0) = E(1s^2) - E(1s). \quad (1.54)$$

Як приклад в табл. 1.1, взятої з [126], наведені значення всіх параметрів E для Не-сателітів. Розраховані значення множника C_d , отримані для всіх розглянутих іонів, також наведені в табл.1.1.

Стани $1s2s2p$ Li-подібних сателітів в спектрах Не-подібних іонів виходять внаслідок наступних процесів:

$$\begin{aligned} 1s^2 2p + e &\rightarrow 1s2s2p + e' \quad (1s - 2p \text{ збудження}); \\ 1s^2 2p + e &\rightarrow 1s2s2p + e' \quad (1s - 2s \text{ збудження}); \end{aligned} \quad (1.55)$$

Стани $1s2p^2$, $1s2s^2$:

$$1s^2 2s + e \rightarrow \begin{cases} 1s2s^2 + e' \\ 1s2p^2 (J=1/2) + e' \end{cases} \quad (1s - 2s \text{ збудження}); \quad (1.56)$$

$$1s^2 2p + e \rightarrow \begin{cases} 1s2p^2 + e' \\ 1s2s^2 (J=1/2) + e' \end{cases} \quad (1s - 2p \text{ збудження});$$

Природно, що в разі високої щільності необхідним є підсумовування по всіх каналах збудження з станів $1s^2 2s$ і $1s^2 2p^2 P_{1/2,3/2}$. Це відноситься і до інших станів, за винятком $1s^2 2p^2 P_{3/2}$, ${}^2D_{5/2}$, ${}^2D_{3/2}$.

Стани $1s^2 2p^2 P_{1/2}$, $^2S_{1/2}$ можуть бути збуджені як з $1s^2 2p^2 P_{1/2}$, так й з $1s^2 2s$ станів $2s 2p [^3P] 1s^2 P_{1/2,3/2}$ - з $1s^2 2p$, $1s^2 2s$ (1.25).

Характерно, що практично всі сучасні моделі спектрів випромінювання іонів в плазмі демонструють сильну розбіжність з експериментально вимірними інтенсивностями ліній, причому розбіжність має місце також і для вимірювань з хорошим просторово-тимчасовим дозволом (див. [125-129]).

На наш погляд, є, принаймні, три найважливіші причини, істотно ускладнюють моделювання спектрів випромінювання в плазмі: 1) непослідовність атомних розрахунків, що призводить в ряді випадків до великих помилок в значеннях швидкостей елементарних процесів, зокрема, розпаду АС; 2) невизначеність реальних функцій розподілу електронів за швидкостями і їх тимчасових характеристик для нестационарних джерел плазми; 3) в кінетиці заселеностей рівнів і в розрахунках констант атомних розпадів необхідно, в принципі, врахувати нескінченне число станів, що включають численні АС і стану континууму. Розглянемо докладнішу відповідні переваги та недоліки сучасних методів спектроскопії за рахунок зіткнень атомів та багатозарядних іонів.

1.4 Огляд теоретичних методів опису характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів

Характерно, що практично всі сучасні моделі спектрів випромінювання іонів в плазмі демонструють сильну розбіжність з експериментальними вимірюваннями інтенсивностей ліній, причому розбіжність має місце також і для вимірювань з достатнім просторово-часовим розділенням (див. 2, 7, 8, 16-22, 106, 182, 184-189]. На наш погляд, є, принаймні, три найважливіші причини, які істотно ускладнюють моделювання спектрів випромінювання:

1. непослідовність атомних розрахунків, що призводить в ряді випадків до великих помилок в значеннях швидкостей елементарних процесів;
2. невизначеність реальних функцій розподілу електронів за швидкостями і їх часових характеристик для нестационарних джерел плазми;
3. в кінетиці заселеностей рівнів і в розрахунках констант атомних розпадів необхідно, в принципі, врахувати нескінченне число станів.

Остання проблема повинна трактуватися з двох сторін:

- а) облік неперервного спектра під час розрахунків швидкостей атомних розпадів;
 б) облік рідберегівських і автоіонізаційних станів розглянутого іона в рівняннях балансу.

Фактично проблема розробки методу ефективного урахування безперервного спектра і чисельне дослідження збіжності методу за кількістю врахованих орбіталей, тобто за кількістю електронних конфігурацій в енергетичній матриці, залишається гострою досі. Загальновідомі нерелятивістські квантово-механічні моделі стали, відповідно, найбільш затребуваними спочатку і широко використовуваними підходами до опису процесів електрон-іонних зіткнень.

З перших років створення квантової механіки природним методом є метод розрахунку перерізу зіткнення на наближенні Борна [106, 107, 182], яке, як відомо, працює тільки в разі досить великих швидкостей налітаючої частинки. Слід, однак, відзначити, що спочатку інтерес до процесів кулонівського збудження і іонізації атомів (точніше слід назвати електромагнітним збудженням) виник при дослідженні енергетичних втрат швидких нерелятивістських електронів, протонів і альфа-частинок в різних середовищах. Відповідна квантова теорія була побудована Бете (Bethe, 1930). Вона може бути застосована в тому випадку, коли відношення швидкості електрона в атомі v_0 до швидкості налітаючої частинки v менше від одиниці.

$$\xi = \frac{v_0}{v} = \frac{\hbar}{m_e a v} = \frac{Z_a e^2}{\hbar v} \quad (1.57)$$

В (1.57), як зазвичай, m_e - маса електрона, Z_a - ефективний заряд ядра атома-мішені для розглядуваної електронної підоболонки.

У зіткненнях з участю важких частинок ($M \gg m_e$) дебройлевська довжина хвилі $\bar{\lambda} = \hbar / Mv$, як правило, значно менша від характерних атомних розмірів.

У більшості випадків ця обставина дозволяє вважати траєкторію частинки, яка налітає, класичною і розглядати збудження атома-мішені як результат взаємодії електрона в ньому з рухомих силовим центром (відомі наближення Мота-Мессі (1969) і Moller (1932) [107,182]).

Тож таке наближення, при якому внутрішні стани партнерів зіткнення описуються квантово-механічно, а їх відносний рух - класично (для атомів середньої маси це справедливо, починаючи вже з теплових енергій), можна називати напівкласичним підходом, точніше його першу частину, яка стосується поділу квантових і класичних степенів вільності.

Зважаючи на значні спрощення багатьох обчислень, в силу наочності і простоти фізичної інтерпретації, а також через можливість урахування нормувальних ефектів і узагальнення на багатоелектронні завдання, напівкласичний підхід став одним з найбільш популярних і плідних у фізиці атомних зіткнень в 60-80-ті роки ХХ ст. (див. огляди в [106, 107, 182]). У швидких зіткненнях при малих переданих імпульсах, коли переважну більшість траєкторій, що вносять істотний внесок в переріз непружних процесів, можна представити у вигляді прямолінійних, з постійними швидкостями.

Напівкласичний підхід зводиться до так званого методу прицільного параметра.

Різні аспекти обґрунтування напівкласичного підходу і методу прицільного параметра, виходячи з їх суворого квантово-механічного розгляду, містяться в багатьох роботах (див. огляди в [106, 107, 182]).

Класична траєкторія відносного руху однозначно визначається швидкістю, прицільним параметром \vec{b} і видом потенціалу міжатомної взаємодії $U(\vec{r})$. Наприклад, при кулонівському потенціалі відштовхування між ядрами, які мають заряди $Z_1 e$ та $Z_2 e$, між'ядерна відстань $R(t)$ і час пов'язані між собою параметрично таким чином (так зване наближення Айзенберга-Грайнера):

$$U(\vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (1.58)$$

$$R(t) = a(1 + e \cdot ch\chi),$$

$$t = \frac{a}{v}(\chi + e \cdot sh\chi),$$

де відзначено, що

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v^2}, e = \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2}, \quad (1.59)$$

де μ - приведена маса, v - швидкість налітаючої частинки далекої від атома-мішені.

Кут розсіювання θ в цьому випадку однозначно пов'язаний з величиною прицільного параметра: $b = a \cdot \text{ctg}(\theta/2)$. Такий жорсткий зв'язок має місце і в класичній задачі розсіювання для інших, більш складних міжатомних потенціалів.

При квантовому розгляді, в силу принципу невизначеності Гейзенберга, в процес розсіювання на фіксований кут θ дає внесок ціла область траєкторій з прицільними параметрами, рівними приблизно класичним значенням. В деякому відношенні ситуація спрощується при проходженні заряджених частинок крізь кристалічну решітку в умовах каналювання, коли і в квантові межі можлива однозначна взаємна відповідність між прицільним параметром і кутом розсіювання (модель Lervig- Lindhard і ін., 1965) [182].

Відзначимо, що незважаючи на відому спрощеність і обмеженість напівкласичного підходу, він як і раніше використовується в сучасному моделюванні, принаймні на рівні якісних оцінок і розуміння фізики процесів.

Очевидно, що в разі вирішення завдань зіткнень за участю багатоелектронних атомних систем, а також низько-енергетичних процесів і т.д., структура атомних систем повинна описуватися на основі суворих методів квантової теорії.

Як правило, для опису хвильових функцій зв'язаних станів атомів і іонів застосовувалися моделі ХФ або Хартрі-Фока-Слетера (ХФС) [153, 154, 160], імплементовані у наближення сильного зв'язку. Ще один напрямок моделі центрального потенціалу (модельного потенціалу, псевдопотенціалу) полягає у використанні наближення перекручених хвиль.

Доречно зазначити далі, що сучасна квантова механіка атомів (а також молекул) за останні кілька десятиріч набула значного розвитку.

Виходячи з [3, 79-110], можна нагадати про таких відомих, поряд зі згаданими вище, методах як метод ТЗ Релея-Шредінгера, Меллера-Плессета, ТЗ по $1/Z$ (Z - заряд ядра атома) і міжелектронної взаємодії, ТЗ з модельним потенціалом «0» наближення, ХФ або ДФ з «0» наближенням, в нерелятивістському і релятивістському наближенні випадкових фаз, метод одно- та багатоканального квантового дефекту і багато інших. Однак, ці відомі методики в багатьох випадках виявилися просто не

коректними для вирішення класів задач як чисто спектроскопічних, так і радіаційних зіткнень. У зв'язку з цим в останні роки запропоновані нові вдосконалені версії досить прийнятних з теоретичної точки зору методів.

У цьому сенсі, звичайно, слід згадати також вельми поширений і широко використовуваний (в основному європейськими та американськими дослідницькими групами) в даний час – R-матричний метод і його різні перспективні модифікації, а також, узагальнення відомого ДФ методу на випадок урахування мультиполярності у відповідних операторах (див., напр., [18-20]).

Слід зауважити, що в залежності від використовуваного базису ТЗ різні версії R-матричного методу набули відповідних назв. Наприклад, в конкретних розрахунках [20, 23, 24, 191] використовувалися такі версії як R-MATR-CI3-5R і R-MATR-41 R-матричного методу з використанням відповідних хвильових функцій в багатоконфігураційному наближенні, зокрема 5, 41-конфігураційних хвильових функцій.

Як показали численні застосування R-матричного методу, він має певні переваги в сенсі точності і послідовності перед такими популярними підходами, як:

- метод ТЗ з урахуванням першого порядку (в іноземній науковій літературі абревіатура UFOMBТ),
- наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA);
- наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA),
- релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багато конфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA і ін.).

Запропоновані також вдосконалені моделі в теоріях типу coupled-channel VCDW (Variational Continuum Distorted Wave), наприклад, модифікація типу Брауна-Сротерса та ін. (див. [1-3, 20, 23, 24, 106-110, 165, 166]). Широкого розвитку набули і різні кластерні методи (див. детальніше [149, 155, 156]). Проте, не дивлячись на численні спроби розвинути послідовну і кількісно високоточну теорію опису як високоенергетичних, так і низько енергетичних процесів зіткнень в електрон-іонних, атомних і молекулярних системах, зазначені вище підходи мають ряд суттєвих недоліків.

Зрозуміло, розвиток методів супроводжувався і розвитком відповідних чисельних кодів (РС комплексів, програм). В останнє десятиріччя, серйозним проривом стало створення і використання в різних лабораторіях комплексів, програм на основі різних версій ДФ, в т.ч. так званий метод мега-ДФ, ДФ-Брейта "Hartree-Fock", "MCHF" packages, розроблені Froese-Fischer і ін., "Dirac"-package, "Beta-package", "QED", "GRASP", "BERTHA", а також "Superstructure", "Cowan-ISAN", "Superatom-ISAN" [1-3, 106-110, 165, 166, 189-198]. На основі зазначених методів і РС комплексів розраховувалися енергетичні, спектроскопічні характеристики (рівні енергій, ширини радіаційного та автоіонізаційного розпаду, ймовірності радіаційних переходів, оже-переходів, перерізи збудження, іонізації та ін.) за рахунок зіткнень для багатьох атомів і іонів. Ці розрахунки відіграли вкрай важливу роль у вивченні і розумінні спектрів багатьох атомів і іонів, а також процесів з їх участю.

У той же час, практично всі зазначені методи, включаючи і останні досить розвинені в теоретичному відношенні, методи мають поряд з відомими достоїнствами і цілий ряд недоліків. Виняток становлять КЕД методи і відповідні чисельні комплекси "Superatom-ISAN" і "QED" [1, 3, 189, 192], однак, останній застосовувався лише в ряді точкових спектральних задач із розрахунку спектрів релятивістських важких (малоелектронних, фактично, H-, He- подібних) іонів і до цих пір жодного разу не адаптувався до завдань пов'язаних із зіткненнями.

КЕД методи і РС комплекс "Superatom-ISAN" до цих пір не узагальнювались стосовно розрахунку характеристик атомів і іонів в плазмовому середовищі і при наявності зовнішнього ЕМП за рахунок зіткнень, не кажучи вже про молекулярні системи [3-5, 8-13, 25-27, 50-53, 76, 81-89, 108, 133-138, 175-179].

Однак в цілому ряді груп завдань атомної і молекулярної фізики, а також мезофізики ці методи були з успіхом розвинені і застосовані, набувши при цьому широкого визнання. Йдеться про нові підходи до опису характеристик кооперативних електрон альфа-бета-гамма-мюон-ядерних процесів в атомах і молекулах, теорії альфа і бета розпаду з урахуванням ефекту хімічного оточення атома, теорії чисто електронних і електрон-ядерних процесів в атомах і мезо-атомних системах, в завданні генерації електрон-позитронних пар за рахунок механізму зіткнень [3-5, 177-179].

Зрозуміло, необхідно згадати і про новий напрямок теоретичної атомної фізики та атомної спектроскопії, пов'язаний з розвитком принципово нових високоточних КЕД методів урахування релятивістських і кореляційних ефектів в атомних розрахунках енергетичних спектрів атомів і іонів, імовірностей і сил осциляторів переходів, КЕД теорії спектральних ліній атомів і іонів, в т.ч. в зовнішньому полі лазерного випромінювання, (відомий апарат Глушкова-Іванова - КЕД техніка моментів спектральних ліній) нарешті, нерелятивістське наближення КЕД ТЗ для опису енергетичних спектроскопічних параметрів молекулярних систем (потенційних кривих, потенціалів іонізації, енергій термів і т.д.), опису взаємодії з сильними зовнішніми полями в теорії атомів, іонів і двохатомних молекул (див. детальніше [3-5, 8-13, 25-27, 50-53, 76, 81-89, 108, 133-138, 175-179]).

Згадані вище недоліки більшості класичних методів теоретичної спектроскопії за рахунок зіткнень особливо яскраво проявляються при теоретичному дослідженні релятивістських багатоелектронних атомів і Бі і низько-енергетичних елементарних процесів зіткнень з їх участю. Зрозуміло, все вище сказане повною мірою відноситься і до молекулярних систем і стану справ в спектроскопії за рахунок зіткнень електрон-молекулярних систем [1-3, 112-131, 147-149, 165, 166], однак, для цих систем зазначені проблеми стають ще більш складними, істотно зростають обчислювальні труднощі.

До ключових недоліків шуканих підходів, крім добре відомих (див. напр., монографії [1-3, 106-110, 165, 166]), а саме, недостатньо високої точності обчислення матричних операторів різних фізичних величин, недостатньо швидкої збіжності відповідних рядів ТЗ, невиконання принципу калібрувальної інваріантності, недостатньо повного врахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи внесок таких специфічних ефектів як колективні ефекти в атомі або іоні, енергетична залежність міжчастинкової взаємодії, ефект швидкого розмазування вихідного стану по непрозорому набору конфігурацій, тиск континууму та ін., додалися і відносно нові проблеми.

Йдеться про розрахунки констант різних елементарних процесів зіткнень в плазмовому середовищі, зовнішніх електричного, магнітного, лазерного полів (див. огляди в [4]). Корисний детальний огляд методів урахування впливу зовнішнього ЕМП, а також плазмового середовища

представлений у відомих монографіях і оглядах (див., зокрема, [3, 4, 106-110, 165, 166, 182-188]).

Коротко відзначимо найбільш відомі моделі (див. детальніше [3, 16, 21, 22, 36-38, 182-186]). Однією з перших спроб вивчити ефект впливу плазмового екранування на характеристики атомних структур і різні атомні процеси є модель Дебая-Хюккеля, відома в теорії електролітів і плазми, і яка була використана для тих чи інших завдань, як правило, розрахунку енергій рівнів і сил осциляторів, багатьма дослідниками. Корисна інформація і численні посилання щодо використання цієї моделі в разі найпростішого атома водню даються, напр., в [182, 183]. Альтернативна модель опису впливу плазмового середовища - модель іонної сфери, в рамках якої передбачається, що вільні електрони розподілені однорідно по всій сфері. Умови її застосовності - низькі температури і високі густини.

Серед інших моделей згадаємо модель Stewart-Pyatt, нелінійну дебай-хюккелевську модель, модель поляризованої сфери, так звану гібридну модель, метод класичних траєкторій Монте-Карло і багато інших (див. детальніше [3, 16, 21, 22, 36-38, 182-186]). Слід підкреслити, що перераховані моделі в останні роки були імплементовані в різні чисельні коди, зокрема метод ДФ і метод конфігураційної взаємодії.

Незважаючи на це, застосування в розрахунках характеристик різних елементарних процесів за рахунок зіткнень традиційно генеруються у методах ХФ, ДФ, базисів електронних орбіталей і дають результати для перерізів, імовірностей переходів, розпадів і т.д., що відрізняються дуже часто на кілька порядків від відповідних експериментальних значень (див. [1-4, 165, 166]).

Загальновідомо, що спостереження фізичних характеристик квантових систем не повинні залежати від калібрування потенціалів ЕМП або фотонного пропатора [102].

Однак через неповний облік складних обмінно-кореляційних ефектів, тиску континууму і т.д., матричні елементи різних фізичних операторів, як правило, у другому і вищих порядках ТЗ, фактично залежать від калібрування фотонного пропатора. На практиці це призводить до того, що перерізи або сили осциляторів, розраховані при різних калібруваннях фотонного пропатора, можуть відрізнятися до 50% за величиною. У відомих монографіях [1-3] ці питання з різних точок зору

розглянуті дуже детально. Виходячи з [3], дамо коротке зведення основних знакових робіт в цьому напрямку.

Серед робіт, присвячених конструюванню калібрувальних інваріантних базисів орбіталей, слід згадати численні спроби Девідсона в рамках його методу натуральних орбіталей Davidson (див. [155, 156]), вельми цікавого, проте, не набувшого широкого застосування через непристосованість до масових розрахунків. Метод Dietz-Heß (див., напр., [92]) фактично модифікує відомий ХФ підхід, однак, має вкрай обмежену сферу застосування. Ще один метод - амплітудна схема спроби використання калібрувальної константи в якості параметра підгону (типу схеми Рудзікаса-Каняускаса і її модифікацій [94]) виявився насправді неспроможним.

Найбільш поширений підхід - це модифікація методу ДФ на випадок урахування взаємодії конфігурацій (багатоконфігураційне наближення), аж до наближення мега-ДФ [1, 2].

Однак, як недавно вказувалося, навіть у цих підходах, а саме, версіях багатоконфігураційних розрахунків за методом ДФ, а також їх радіаційно-релятивістських узагальненнях порушуються принципи поступової КЕД [102]. Як результат цих порушень можливі величезні помилки в розрахунках імовірностей радіаційних розпадів і розпадів зіткнень, це наприклад, може призвести до якісно неправильного спектра генеруючої плазми.

Одним з найбільш послідовних методів вирішення зазначених вище проблем очевидно, може бути розвиток нових методів розрахунку характеристик за рахунок зіткнень в електрон-іонних системах, основаних на використанні КЕД ТЗ і енергетичного підходу, що базується, по суті, на адіабатичному формалізмі Гелл-Мана і Лоу (див., напр., [3, 10, 80]), а також, зрозуміло, на застосуванні адекватних моделей врахування впливу плазмового середовища на спектри атомів і іонів та, звичайно ж, використанні адекватного методу побудови оптимізованого одноквазічастинкового уявлення. В якості останнього нам зручно стартувати з відомої КЕД методики Глушкова-Іванова [10], в якій в рамках адіабатичного формалізму Гелл-Мана і Лоу розроблена КЕД процедура мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину і розвинений метод генерації калібрувально-інваріантних базисів релятивістських орбіталей.

З метою розширення класу функцій для опису електронної густини в атомі Глушков-Малиновська-Хецеліус узагальнили шукану процедуру (див., напр., [9, 108, 109]). Надалі методика [10] була застосована дуже багатьма дослідниками в самих різних класах завдань, в тому числі, обчислення енергетичних і спектроскопічних характеристик атомів і молекул та ряді завдань ядерної фізики і фізики молекул (див., напр., [1-3, 7, 155, 165, 166]). Так, наприклад, в [25-27] з метою ідентифікації ефекту лазерного посилення і розрахунку кінетики заселення рівнів в плазмі Ne-, Ni-подібних іонів використана схема [10] з доповненням базису дискретних станів рівняння Дірака штурмовским доповненням для урахування станів континууму. Однак до цього часу цей підхід не застосовувався в масових розрахунках при вирішенні класу задач моделювання характеристик радіаційно-енергетичних параметрів БІ в плазмі, не кажучи вже про завдання з накладенням потужних зовнішніх електромагнітних полів [4].

Новий релятивістський енергетичний підхід в теоретичній спектроскопії релятивістських електрон-іонних систем і конкретно в описі характеристик процесів електрон-іонних зіткнень в плазмі багатозарядних іонів певної температури і густини, який пропонується в цій книзі, фактично базується на послідовній КЕД [3, 10] і, в принципі, вільний від недоліків, властивих багатьом версіям багатоконфігураційних розрахунків, а також практично всім перерахованим теоріям. Зрозуміло, відповідні розрахунки в рамках нашої теорії неминуче пов'язані з процедурою дослідження збіжності чисельних результатів за кількістю врахованих орбіталей.

Труднощі такого дослідження очевидні: вони пов'язані насамперед з проблемами розрахунку великих енергетичних матриць. Основною проблемою є врахування внеску безперервного спектра в матричні елементи. Можливість використання чисто дискретних функцій з метою урахування неперервного спектра в атомних розрахунках вперше була відзначена Фоком, в наступних роботах ця ідея використовувалася для розрахунку поправок теорії збурень до станів водньоподібних атомів [103, 104]. Штурмовські розкладання в методі ХФ застосовувалися в розрахунках штарківських зрушень [4], статичної та динамічної поляризованості атомів і іонів [132, 203, 207].

В нашому методі штурмовські розкладання використовуються в регулярних розрахунках з явним урахуванням багатоелектронних ефектів.

Ще один важливий елемент новизни пов'язаний з узагальненням нового релятивістського енергетичного підходу на випадок розгляду електрон-іонних систем в зовнішньому інтенсивному полі електромагнітного випромінювання, яке має цілий ряд переваг в порівнянні з розвиненими в останні роки моделями і теоріями (див. огляд, напр., [4, 165, 166]).

Далі буде розглянуті ключові аспекти релятивістського енергетичного підходу в спектроскопії релятивістських електрон-іонних систем, який фактично базується на енергетичному підході (адіабатичний S-матричний формалізм Гелл-Мана і Лоу), застосованому в калібрувально-інваріантному формулюванні до завдань пов'язаних із зіткненнями, методі КЕД ТЗ з *ab initio* модельним наближенням і ефективним урахуванням найскладніших кореляційних ефектів як ефектів вищих порядків ТЗ і дебаєвського методу урахування плазмового екранування. В якості базового підходу до опису атомної та іонної систем в початковому стані буде використано формалізм калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової ТЗ у варіанті [291].

1.5 Висновки до розділу 1

Основні висновки оглядового розділу зводяться до наступного:

1) Уявляється актуальною розробка теоретичних основ нової прецизійної релятивістської оптики і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем, а саме, розвитку нового релятивістського підходу до опису та обчислення основних енергетичних та спектральних характеристик процесів зіткнень для електрон-іон-атомних систем з одночасним, кількісно-послідовним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів у вільному стані, з урахуванням впливу плазмового середовища у дебаєвській плазмі багатозарядних іонів, та також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання.

2) Уявляється актуальною розробка в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, та формулювання методики урахування станів континууму в межах релятивістській версії методу штурмовських розкладань.

3). Уявляється актуальною розробка нової версії релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок

зіткнень для електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання, що базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу, для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля, і очевидно, подальше дослідження багатифотонних диференціальних перерізів ($e, 2e$) реакції для певного нейтрального атома при певних параметрах електрон-атомного зіткнення та відповідного зовнішнього поля.

4) Уявляється актуальним проведення обчислень енергій та імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перетинів збуджень сил електрон-іонних зіткнень для Be-, F-, Ne-подібних іонів в широкому інтервалі зарядів ядра, квантових станів з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища для широкого інтервалу параметрів плазми (густина, температура) і з'ясувати внесок обмінно-кореляційних поправок, а також калібрувальню-неінваріантний внесок в радіаційні ширини тощо.

РОЗДІЛ II

НОВИЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО ОБЧИСЛЕННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕСІВ ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ ПЛАЗМОВОГО СЕРЕДОВИЩА

2.1. Вступні зауваження щодо характеристики процесів електрон-іонних зіткнень. Адіабатична формула Гелл-Мана і Лоу з електродинамічної матрицею розсіювання

Стартовою основою для розвитку нашого нового підходу до розрахунку параметрів процесів електрон-іонних зіткнень для БІ з урахуванням впливу плазмового середовища є апарат аб ібітіо КЕД ТЗ та S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу [3, 10, 212, 222, 228, 229,291].

Зрозуміло, в залежності від визначення гамільтоніана нульового наближення ТЗ і урахування ключових фізичних характеристик квантової системи є різні альтернативні можливості побудови формалізму ТЗ.

Однак в будь-якому випадку, послідовний КЕД (релятивістський) варіант розрахунку зрушень рівнів атомів (іонів, в тому числі і молекул) ґрунтується на адіабатичній формулі Гелл-Мана і Лоу з електродинамічною матрицею [1-3, 102]. Як і метод функції Гріна, адіабатична формула Гелл-Мана і Лоу призводить до рядів ТЗ за константою зв'язку для зрушень ΔE . Ряди ТЗ стандартним чином діаграматизуються (з використанням звичайної техніки Фейнмановських діаграм).

При побудові нової версії формалізму релятивістської багаточастинкової ТЗ (як наближення до строгої КЕД ТЗ) будемо використовувати стандартні рецепти та правила, зокрема вимоги до визначення операторів (гамільтоніана нульового наближення, оператору збурення) та відповідної діаграматизації рядів ТЗ (докладно шукані рецепти викладені, напр., в [4]).

Слідуючи [3], в найбільш послідовному релятивістському формулюванні при обчисленні енергетичних зсувів атомних рівнів є адіабатична формула Гелл-Мана і Лоу з електродинамічної S матрицею:

$$\delta E_i = \lim_{\gamma \rightarrow 0} i\gamma g \ln \langle \Psi_i | S_\gamma(0, -\infty | g) | \Psi_i \rangle |_{g=1} \quad (2.1)$$

де γ - адіабатичний параметр, g - константа зв'язку.

При цьому нові наближення в теорії багатоелектронних систем зручно формулювати як методи підсумку Фейнмановських діаграм певного типу. В [3, 212, 222] викладені різні схеми розрахунку в рамках КЕД енергетичного формалізму енергій рівнів а спектрах, радіаційних ширин рівнів, а також перерізів збудження і іонізації, які ґрунтуються на адіабатичній формулі. При цьому в енергетичному підході в нерелятивістській теорії розпадів атомних станів відома методика, пов'язана з діагоналізацією власної матриці M , для розрахунку зрушень енергії ΔE станів.

Аналогічна методика розвинена і для випадку релятивістського атома, при цьому на відміну від нерелятивістського наближення відповідні матричні елементи стають комплексними.

В серії робіт [3-7,23-35,212,222] викладені різні схеми визначення гамільтоніану нульового наближення (в тому числі в рамках таких моделей як кулонівське наближення, метод квантового дефекту та модельного потенціалу, DF, RHF та інші) та процедури підсумовування фейнманівських діаграм поляризаційного та сходового типів, в залежності від чого формулюється та чи інша версія формалізму ГЗ.

При цьому визначальним є фізична сутність задач, що розв'язуються, зокрема, у перелічених вище роботах головною метою було прецизійне обчислення енергій рівнів, сил осциляторів, радіаційних ширин, перерізів електрон-атомних зіткнень. обчислення сталих надтонкої структури тощо для атомних систем у вільному стані, або у стані зіткнення з фотонами.

Наш клас задач пов'язаний із інтенсивною взаємодією атомних систем з полем ЛВ. Тому в релятивістському наближенні формалізм Gell-Mann & Low дозволяє встановити визначення енергетичного зсуву δE атомного рівня через матрицю розсіювання, яка включає одночасно й взаємодію атома з полем фотонного вакууму (радіаційний розпад), й взаємодію атома з полем ЛВ (відповідна техніка була розвинута ще в [39-42], а її спрощені версії використані , напр., в [29,31,32]).

Зрушення повної енергії стану зазвичай подається у вигляді:

$$\Delta E = \text{Re}\Delta E + i \text{Im}\Delta E, \quad (2.2a)$$

$$\text{Im} \Delta E = -\Gamma/2, \quad (2.26)$$

де ймовірність розпаду фактично співпадає із повною (сумою радіаційної та автоіонізаційної) шириною:

$$P = \Gamma. \quad (2.2в)$$

При побудові енергетичної матриці M використовується адіабатична формула Гелла-Манна і Лоу для ΔE .

Метод є послідовно КЕД і враховує однаково розгляд безлічі вимушених і спонтанних процесів, що розрізняються за своєю фізичною природою, у чому ми переконаємося в розділі 2 при формулюванні нової теорії опису електрон-іонних зіткнень в присутності зовнішнього ЕМП.

Як вказувалося, на відміну від нерелятивістського випадку в релятивістській теорії елементи секулярної матриці є комплексними вже у другому порядку ТЗ (перший порядок міжелектронної взаємодії), а уявні частини елементів секулярної матриці пов'язані з ймовірністю радіаційного розпаду, формула (2.2) [3, 10-12, 80, 82].

Наша мета – розвинути принципово релятивістський ЕП і відповідно КЕД формалізм ТЗ для опису характеристик процесів електрон-іонних зіткнень для релятивістських атомних систем (атомів і Бі) з урахуванням впливу плазмового середовища, причому не обмежуючи себе випадком, скажімо, швидких зіткнень, тобто високо-енергетичними процесами та включаючи в розгляд і повільні зіткнення (найбільш складний з теоретичної точки зору клас задач) [212, 222, 228, 229]. Зрозуміло, при цьому особлива увага повинна приділятися забезпеченню досить високої точності обчислення матричних операторів різних фізичних величин, досягненню швидкої збіжності відповідних рядів ТЗ та виконанню принципу калібрувальної інваріантності.

Також повинен забезпечуватися максимально повний облік, крім ефектів плазмового середовища або зовнішнього ЕМП та інших складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи вклади вищих рідбергівських і автоіонізаційних станів, тобто мова йде про використання адекватних і повних базисів одноквазічастинкових станів атома (іона), урахування таких специфічних ефектів як колективні ефекти в атомі або йоні, енергетична залежність міжчастинкової взаємодії, ефект швидкого розмазування вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, тиск континууму та ін., в такому формулюванні з урахуванням вище сказаного, що буде розвинене нами нижче, безумовно,

нова версія енергетичного КЕД підходу і формалізму КЕД ТЗ в теоретичній спектроскопії електрон-іонних і атомних систем за рахунок зіткнень матиме принципові переваги в порівнянні з традиційними методами розрахунку характеристик процесів електрон-іонних зіткнень для БІ з урахуванням впливу плазмового середовища.

2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи з урахуванням ефектів плазмового середовища

2.2.1 Метод урахування ефектів плазмового середовища. Гамільтоніан нульового наближення у дебаєвському наближенні

Як зазначалося вище, однією з адекватних моделей урахування ефекту впливу плазмового екранування на характеристики атомних структур і різні атомні процеси є модель Дебая-Хюккеля, відома в теорії електролітів і плазми [182, 183].

Надалі ми будемо дотримуватися прагматичної мети урахування ефектів плазмового екранування в розрахунках характеристик ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ ЗІТКНЕНЬ при характерних параметрах плазми (токамака, лазерної плазми і т.д.), яка виникає у відповідних експериментальних установках (ЕВІТ, Токамак, та ін.), тому характерні параметри електронної температури плазми, концентрації частинок будуть спочатку фіксованими, а також будуть орієнтиром для відповідних наближень.

Слід нагадати, плазмові стани речовин займають велику область фазових діаграм і надзвичайно різноманітні. Термодинаміка плазми відносно проста лише на периферії цієї діаграми, тобто при екстремально високій густині і при високих температурах. У граничних випадках - це системи ідеальних газів-електронів та іонів, але в першому випадку вироджених, у другому-класичних.

До шуканих областей примикають області слабкої неідеальності, в яких методами ТЗ можна знайти поправки на слабкі міжчастинкові взаємодії. Природно, в значній частині фазової діаграми плазма є недосконалою і послідовний теоретичний опис можливий, якщо здійснене перенормування взаємодії, як наприклад, в разі утворення пов'язаних електрон-іонних пар, тобто атомів в низькотемпературній плазмі. Модель класичної однокомпонентної плазми є плазмою точкових зарядів із

зарядом Ze (e - заряд електрона), поміщених в рівномірно розподілене середовище електронів [182, 183].

Стан плазми характеризується так званим параметром неідеальності:

$$\gamma = (Ze)^2 / ak_B T. \quad (2.3)$$

тут k_B – константа Больцмана,

T - температура,

a – середня відстань між частинками:

$$a = [3/(4\pi N)]^{1/3} \quad (2.4)$$

де N – концентрація.

Плазма вважається недосконалою, якщо параметр $\gamma > 1$ (відомий приклад - плазма Сонця і надр зірок білих карликів, де величина параметра неідеальності сягає близько 100, а електронний газ у них виродився).

На звичайній фізичній мові, неідеальну плазму визначають якісно як плазму, в якій потенційна енергія взаємодії між частинками порівнянна або перевищує їх кінетичну енергію.

З урахуванням наведених вище співвідношень плазма, заряджені частинки якої взаємодіють за кулонівським законом, стає неідеальною (середня енергія кулонівської взаємодії $e^2 N_e^{1/3}$ з тепловою енергією $k_B T$), тобто коли плазмовий параметр взаємодії:

$$\gamma = e^2 N_e^{1/3} / k_B T \geq 1 \quad (2.5)$$

Якщо далі ввести дебаєвський радіус екранування:

$$r_D = \mu^{-1} = \sqrt{k_B T / 4\pi e^2 N} \quad (2.6a)$$

то, очевидно, умова (2.5) перепишеться у вигляді:

$$1 / N_e r_D^3 \geq 1 \quad (2.6b)$$

Параметр (2.7) називають зазвичай плазмовим параметром ідеальності, тобто, плазма є ідеальною, якщо

$$1/N_e r_D^3 \ll 1 \quad (2.6в)$$

Очевидно, зі зменшенням, число частинок в дебаєвській сфері $(4\pi/3)N_e r_D^3$ зменшується і уявлення про дебаєвське екранування втрачається [183].

Слід зазначити, що цікавить нас надалі лазерна плазма, яка має характерні параметри $T \sim 1 \text{ кеВ}$, $N \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ і параметр μ , який має порядок 10^{-1} в атомних одиницях; відповідно, в плазмі ЕВІТ - $T \sim 0.05 \text{ кеВ}$, $N \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та $\mu \sim 10^{-3}$.

Зручно для оцінок використовувати наведену формулу:

$$\mu = 2.2511 \cdot 10^{-13} (N/T)^{1/2}, \quad (2.7)$$

де щільність N в см^{-3} , а температура T в кеВ.

Слід також відзначити, що в розрахунках швидкісних коефіцієнтів ми, як правило, використовували максвеллівський розподіл часток плазми за швидкостями. Як відомо, в плазмі знаходиться в термодинамічній рівновазі при температурі T , розподіл часток маси m описується формулами:

$$F(v) = 4\pi v^2 (m/2\pi T)^{3/2} \exp(-mv^2/2T) \quad (2.8а)$$

або

$$F(E) = 2T^{-1} (E/\pi T)^{1/2} \exp(-E/T) \quad (2.8б)$$

де v та E – швидкість і енергія частинки.

Тут температура T дається в енергетичних одиницях. Природно, в реальній плазмі розподіл часток за швидкостями може в тій чи іншій мірі відрізнятись від чисто максвеллівського [53,82]. Зокрема, наявність навіть слабого постійного електричного поля призводить до спотворення

функції $F(v)$ електронів в області високих енергій і виникає потік так званих тікають нетеплових електронів.

Хоча при цьому частка нетермічних електронів по відношенню до максвеллівського може бути досить малою. Як правило, вказане відноситься до випадку збільшення числа частинок в хвості максвеллівського розподілу. За відсутності значних зовнішніх впливів полів, пучків і т.д., в принципі можлива інша ситуація, коли за рахунок зіткнень, що супроводжуються порушенням або іонізацією, число швидких електронів виявляється менше максвеллівського.

Хоча зазначені відступи від чисто максвеллівського розподілу зустрічаються нерідко, випадок чисто максвеллівської функції представляє основний інтерес у великому числі додатків.

Як завжди, швидкість зіткнень процесу $\langle v\sigma \rangle$ характеризує число актів процесу в одиницю часу на один атом (іон) і один електрон і визначається виразом (в $\text{см}^3/\text{с}$):

$$\langle v\sigma \rangle = \int_{\Delta E}^{\infty} v\sigma F(E) dE \quad (2.9a)$$

де σ - переріз процесу зіткнення,

ΔE – порогова енергія процесу;

Для процесів збудження (іонізації) електронами (2.9a) прийме наступний вигляд :

$$\langle v\sigma \rangle = K \int_{\Delta E}^{\infty} (\sigma / \pi a_0^2) E R y^{1/2} T^{-3/2} \exp(-E/T) dE \quad (2.9b)$$

де

$$K = 2\sqrt{\pi} \hbar a_0 / m = 2,18 \cdot 10^{-18} (\text{см}^3 / \text{с})$$

У релятивістській теорії природно описувати розподіл електронів континууму релятивістської функцією розподілу Максвелла-Больцмана (див., напр., [3,116]):

$$F(E) = [E(E^2 - 1)^{1/2} / \theta \exp(1/\theta) K_2(1/\theta)] \exp[-(E-1)/\theta], \quad (2.9b)$$

де: E - повна електронна енергія в одиницях m_0c^2 , включаючи масу спокою;

$\theta = k_b T / m_0c^2$ - характеристична безрозмірна температура;

k_b - стала Больцмана.

З урахуванням (3.5) відповідно релятивістський швидкісний коефіцієнт також представляється у вигляді

$$\langle v\sigma^{(i)} \rangle.$$

Детальний опис розподілу Максвелла-Больцмана і виразів для швидкісних коефіцієнтів дано, напр., в [2,3,116].

2.2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи: Нульове наближення та поправки першого порядку

В цьому підрозділі ми викладемо основи формалізму КЕД ТЗ, враховуючи, що гамільтоніан атомної системи визначено виразом (2.10). Далі розрахунок поправок першого, другого і вищих порядків ТЗ можна провести аналогічно тому, як це робиться в стандартному формалізмі (див. напр., [3]).

Далі будемо виходити з того, що релятивістська багатоелектронна система (багатозарядний іон) описується рівнянням Дірака з релятивістським гамільтоніаном в дебаєвському наближенні (нижче, якщо спеціально не обумовлено, використовуються атомні од.) [228, 229]:

$$H = \sum_i \{ \alpha c p - \beta m c^2 + \exp(-\mu r_i) [-Z / r_i + V_c(r_i)] \} + \sum_{i>j} V(r_{ij}) \exp(-\mu r_{ij}) \quad (2.10)$$

В потенціалі Дебая-Хюккеля є множник - кулонівський потенціал типу $1/r$ і другий (\exp) - плазмово-екрануючий множник, параметр μ пов'язаний з параметрами плазми: щільністю частинок плазми (точніше $N =$ сумі густини електронів і густини іонів) і електронною температурою T (2.6).

Як потенціал $V(r_{ij})$ в подальшому ми будемо використовувати релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії, який включає

релятивістський ефект запізнювання (шляхом введення відповідної експоненти) і магнітну (Брейтовську) взаємодію [3]:

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}, \quad (2.11)$$

де α_i – матриці Дірака.

Слід зазначити, що фактично рівняння (2.10), (2.11) повністю враховують всі одноелектронні релятивістські поправки (крім зсуву Лемба), і двоелектронні поправки - з точністю до членів $\approx (\alpha Z)^2$, де α – стала тонкої структури.

Як об'єкти конкретних розрахунків характеристик електрон-іонних зіткнень будуть розглядатися іони ізоелектронних послідовностей берилію, неону, аргону, які в рамках стандартного формалізму КЕД багаточастинкової ТЗ за класифікацією Глушкова-Іванова відносяться до так званих двохквазічастинкових систем, тобто до атомних систем, що включають остов заповнених електронних оболонок і 2 квазічастинки (електрон-електрон або електрон-вакансія) над остовом електронних оболонок іона. Слід зауважити, що в подальшому також знадобиться знання енергетичних спектрів відповідних одноквазічастинкових систем (відповідно Li-, F-, Na-, Cl-, K-подібних іонів).

Як завжди, згідно з [3, 228], в поданні вторинного квантування функції стану атомної системи з квазічастинкою, скажімо, електроном над остовом або однією вакансією в остові визначаються як:

$$a_\alpha^+ \Phi_0, \quad a_\alpha \Phi_0 (-1)^{j_\alpha - m_\alpha} \quad (2.12)$$

Тут a_α^+ , a_α – оператори народження, знищення електрона в стані $\alpha = n_\alpha l_\alpha j_\alpha m_\alpha$. Зрозуміло, множник $(-1)^{j_\alpha - m_\alpha}$ тут забезпечує правильні тензорні властивості комбінації.

Наступний крок – визначення нульового наближення в формалізмі КЕД ТЗ. У поданні вторинного квантування гамільтоніан нульового наближення H_0 і відповідно оператор збурення ТЗ запишемо у вигляді:

$$H_0 = \sum_i a_i^+ a_i E_i \quad (2.13a)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{ij} a_i^+ a_j V_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^+ a_j^+ a_k a_l \quad (2.136)$$

$$V_{ij} = \int d\vec{r} \cdot \varphi_i(\vec{r}) [-V_C(r)] \cdot \varphi(\vec{r}) \quad (2.13в)$$

$$V_{ijkl} = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi(\vec{r}_1) \varphi(\vec{r}_2) V(r_1 r_2) \varphi_k(\vec{r}_2) \varphi_l(\vec{r}_1) \quad (2.13г)$$

тут $\varphi(\vec{r})$ – одноелектронні функції (біспінори),

E_i – одноелектронні енергії;

$V_c(r_i)$ – центральний потенціал, який імітує ефективний потенціал остовних електронів (скажімо, у фторо-, неону- або аргону-подібному іоні).

Слід прокоментувати, що вираз (2.13), природно, включає весь одноелектронний спектр, разом з позитивним і негативним континуумами. Формально теорію можна було б узагальнити на випадок урахування і так званих радіаційних поправок (поляризація вакууму, власно-енергетична частина лембовського зсуву і т.д.), вкрай важливих для важких і надважких атомних систем, однак, в подальшому ми будемо вивчати іони, для яких в нашому класі задач, електрон-іонних і атомних зіткнень, внеска шуканих радіаційних поправок є дуже незначним [3]. Тому в подальшому ми не обговорюємо це питання.

Гамільтоніан нульового наближення має вигляд:

$$H_0 = \sum_i^N h(r_i) + \sum_i^N V_c(r_i) \quad (2.14)$$

де потенціал $V_c(r_i)$ описує взаємодію «остов-квазічастинка». В якості потенціалу самоузгодженого поля можна використовувати або стандартні потенціали типу ДФ, релятивістського Хартрі-Фока (РХФ), або теорії функціоналу густини, зокрема, Дірака-Кона-Шема, або накінець один із варіантів методів модельного потенціалу, або псевдопотенціалу.

Для багатозарядних іонів одним з найбільш коректних потенціалів є відомий потенціал Іванова-Іванової [84, 85]:

$$V_C(r/b) = V_K + V_L = 2[1 - \exp(-ar)(1+r)]/rZ +$$

$$+8[1-\exp(-ar)(1+0,6r+0,16r^2+0,036r^3)]/rZ \quad (2.15)$$

Тут a – параметр потенціалу, який в подальшому буде визначено в рамках відомої КЕД процедури Глушкова-Іванова [10].

У (2.15) ми використовуємо зручні при розгляді ізоелектронних послідовностей кулонівські одиниці (1 К.О. $\approx 27,054Z^2$ eV для енергії; 1 К.О. $\approx 0,529 \cdot 10^{-8}/Z$ cm для довжини; 1 К.О. $\approx 2,419 \cdot 10^{-17}/Z^2$ c для часу).

Слід зауважити, що потенціал (2.18) з успіхом застосовувався в розрахунках енергетичних спектрів, а також сил осциляторів для великої групи Бі. Зокрема, його використання проводилося в рамках формально точної релятивістської ТЗ Іванова-Іванової-Глушкова [12, 84-86] з емпіричним модельним нульовим наближенням, причому шуканий параметр вибирався за умови найкращого збігу з експериментальними значеннями одноквазічастинкових рівнів енергій.

Справа в тому, що для простих атомних систем в літературі є досить точно визначені експериментальні й теоретичні дані (див., напр., [108]). З іншого боку, претендуючи на розвиток повністю неемпіричної теорії та враховуючи відсутність для багатьох важливих з точки зору додатків Бі будь-яких більш-менш надійних даних про енергетичні спектри, ми будемо використовувати неемпіричну схему визначення (2.18).

Інший підхід, який буде використано в роботі базується на методі Дірака-Кона-Шема, причому використано найбільш послідовну релятивістську версію.

$$V^{DKS}(r) = [V_{Coul}^D(r) + V_X(r) + V_C(r|a)], \quad (2.16a)$$

який містить кулонівський потенціал ядра, обмінний потенціал Kohn-Sham $V_X(r)$ та модифікований кореляційний потенціал виду (див. [26]):

$$V_C[\rho(r), r/a] = -0.0333 \cdot a \cdot \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (2.16b)$$

де ρ – електронна густина, a – так званий калібрувальний параметр оптимізації (див. далі).

В якості потенціалу квазіоднчастинкового обмінно-кореляційного потенціалу у подальшому зручно використовувати узагальнений потенціал Kohn-Sham-Gunnarsson-Lundqvist (2.16b), вперше докладно застосованого Glushkov et al (див., напр., [3, 10, 75, 78, 84]).

Але на відміну від останніх версій ми запишемо цей потенціал у декілька іншій формі без додаткових параметрів, а саме:

$$V_{xc}[\rho(r), r] = V_x^{KS}(r) \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} - 0.0333 \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (2.17)$$

$$\beta = 3\pi^2 \rho(r)^{1/3} / c,$$

де c – швидкість світла,

V_x^{KS} – стандартний обмінний потенціал Kohn-Sham, який визначається як [82]:

$$V_x^{KS}(r) = -(e^2 / \pi)[3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}. \quad (2.18)$$

Таким чином, у використовуваному нами далі одноквазічастинковому наближенні калібрувально-інваріантної ТЗ [291] нульове наближення буде згенеровано ab initio гамільтоніаном, на відміну від багатьох робіт із спектроскопії за рахунок зіткнень (див. огляд в [3]).

Оператор збурення в даній релятивістській багаточастинковій ТЗ має звичайний вигляд:

$$V_{\text{int}} = - \sum_i^{N_{\text{tot}}} V_C(r_i) + \sum_{i>j}^{N_{\text{tot}}} V(r_i r_j) \quad (2.19)$$

з відповідним компенсуючим членом $-(-V_C)$.

В Кед формування оператор збурення ТЗ запишеться у стандартному вигляді як:

$$V^{DKS}(\mathbf{r}) = J_\mu(\mathbf{x})A^\mu(\mathbf{x}), \quad (2.20)$$

де A - вектор-потенціал електромагнітного поля, J -оператор струму

Далі нам треба перейти до опису процедури побудови власної енергетичної матриці M для розрахунку зрушень енергії ΔE станів, елементи якої, як підкреслювалося вище, на відміну від нерелятивістського наближення стають комплексними.

Оскільки спектр порушених станів неону- і т.д. подібних іонів є вкрай щільним з майже виродженими рівнями, далі зручно розглядати всі порушені стани з двома квазічастинками над остовом замкнутих електронних оболонок іона як групу вироджених станів. Основи побудови апарату ТЗ в цьому випадку були створені ще на початку 70-х років ХХст. в роботах В. Толмачова і Л.Іванова (див., напр., [12]).

В цьому випадку, секулярна матриця M розраховується між усіма цими станами (див., напр., [3]) і подається у вигляді суми:

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + M^{(3)} + \dots + M^{(k)} \quad (2.21)$$

Тут, як завжди,

k — число квазічастинок;

$M^{(0)}$ — внесок вакуумних Фейнмановських діаграм,

$M^{(1)}$ — внесок одноквазічастинкових Фейнмановських діаграм,

$M^{(2)}$ — внесок двоквазічастинкових Фейнмановських діаграм, і т.д.

Ми не будемо детально зупинятися на діаграматизації рядів формалізму ТЗ, який ми розвиваємо, відсилаючи зацікавленого читача до класичних монографій, зокрема [1, 2].

Відзначимо, що член у виразі (2.21) $M^{(0)}$ пропорційний одиниці. Відповідні елементи рівнів енергії остова, яка формально не залежить від конкретного стану i , зрозуміло, числа частинок над остовом.

Далі величина $M^{(1)}$ дорівнює сумі одноквазічастинкових енергій, природно, без урахування їх взаємодії.

$$M^{(1)} = \sum_i E^{(0)}(n_i l_i j_i) \quad (2.22)$$

На цьому етапі в багатьох методиках, як правило, використовуються (див., напр., [3,291,84-86]) експериментальні одноквазічастинкові енергії.

Нас цікавить випадок атомної системи з двома квазічастинками (електрон-електрон, електрон вакансія) над остовом, тож можна записати:

$$M^{(1)} = E(n_1 l_1 j_1) - E(n_2 l_2 j_2), \quad (2.23)$$

де $E(nlj)$ – одноквазічастинкова енергія, відрахована від остова.

Енергія довільного порушення двохквазічастинкового стану подана у вигляді ряду ТЗ:

$$E(n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 n_3^{-1} l_3^{-1} j_3^{-1}) = E^0 + \Delta E_1 + \Delta E_2 + \dots, \quad (2.24)$$

де E^0 – поправка нульового наближення; ΔE_1 – поправка першого порядку і т.д.

Відповідні одноквазічастинкові енергії визначаються розв'язанням одноелектронного релятивістського рівняння Дірака. Відповідний біспінор записується у вигляді:

$$\Psi_{jlm}(r) = \begin{pmatrix} \Phi_{jlm}(r) \\ \chi_{jlm}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r) \Omega_{jlm}(r) \\ G(r) \Omega_{jlm}(r) \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

де $\Omega_{jlm}(r)$ - кульовий спінор,

$$l = j \pm 1/2,$$

$$l' = 2j - l.$$

Радіальні (велика і мала) компоненти функції Дірака $F(r)$ і $G(r)$ задовольняють системі звичайних диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial r} + (1 + \chi) \frac{F}{r} - (\varepsilon + m - V)G &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial r} + (1 - \chi) \frac{G}{r} + (\varepsilon - m - V)F &= 0 \end{aligned}, \quad (2.26)$$

де F та G – велика і мала компоненти;

χ - квантове число Дірака (стала тонкої структури $\alpha = 1$);

Рівняння (2.26) у відповідному блоці комплексу "Superatom-ISAN" розв'язуються чисельно методом Рунге-Кутта. Функції безперервного спектра в моделі ДФ були визначені ітеративним шляхом у «замороженому» кістяку дочірнього атома.

Відповідно, як звичайно, граничні умови правильних розв'язків визначаються першими членами розкладання функцій у ряд [4,5]. Відповідно стандартна умова $f, g \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ визначає квантовані 1-QP енергії. З чисельної точки зору система рівнянь (2.26) розв'язується методом Рунге-Кутта 4 порядку (в відповідному блоці комплексу "Superatom-ISAN" [3-7,192-195]).

При обчисленні 1-QP функцій континууму уваги потребує визначення нормувального множника. Правильно нормовані функції континууму мають асимптотики (з точністю до першого члена розкладання) [3,4,9]:

$$\left. \begin{matrix} F \\ G \end{matrix} \right\} \rightarrow (\pi\xi)^{-\frac{1}{2}} \begin{cases} \left(\xi + (\alpha z)^{-2} \right)^{\frac{1}{2}} \text{Sin}(kr + \sigma) \\ \left(\xi - (\alpha z)^{-2} \right)^{\frac{1}{2}} \text{Cos}(kr + \sigma) \end{cases}$$

(2.27a)

а нормувальний множник:

$$N = \lim_{r \rightarrow \infty} N(r), \dots N^2(r) = \pi\xi \left[F^2 \left[\xi + (\alpha z)^{-2} \right] + G^2 \left[\xi - (\alpha z)^{-2} \right] \right]. \quad (2.27б)$$

Самоузгодження функції безперервного спектра вважалось досягнутим, коли нормовані функції на двох сусідніх ітераціях розрізнялися менш ніж на $5 \cdot 10^{-4}$ по відношенню до їх значень в точці максимуму функції.

Важливо нарешті зазначити, що для різних енергій для досягнення необхідної точності потрібно від 3 (при більшій енергії) до 10 (при малій енергії) ітерацій.

Перейдемо до розгляду поправки першого порядку нашої релятивістської ТЗ для багатоелектронних атомних систем. Слід зазначити, що це питання досить докладно розглядалось у літературі й було досить послідовно розв'язано у багатьох робітах (див., напр., [21,27,2,3,12,84-86,291])

Звичайно у цьому місці також нагадують, що, як було показано ще Толмачовим, а також незалежно Kelly (див., напр., [3]), в першому порядку ТЗ немає діаграм, що містять компенсаційний член - $V_C(r)$ повного

збурення V_{int} і потрібно розрахувати тільки матричні елементи оператора ТЗ.

Ці матричні елементи дають стандартний внесок першого порядку в $M(2)$ (для випадку двох електронних станів) (див., напр., [2,3,12,84-86,291]):

$$\begin{aligned}
 M_1^{(2)} &= \langle n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 [J] | V_{int} | n_4 l_4 j_4 \quad n_3 l_3 j_3 [J] \rangle = \\
 &= P_1 P_2 (-1)^{1+j_2+j_4+J} [(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)]^{1/2} \times \quad (2.28), \\
 &\times \sum_{i,k} \sum_a \left\{ \begin{matrix} j_i j_k J \\ j_2 j_1 a \end{matrix} \right\} (\delta_{i,3} \delta_{k,4} + (-1)^J \delta_{i,4} \delta_{k,3}) \cdot Q_a
 \end{aligned}$$

де $P_{1,2}$ – просто числові коефіцієнти в залежності від умов, що накладаються на розглядаємі стани.

Важливо, що у (2.28) фігурують величини Q_a , які виражаються я через матричні елементи (радіальні інтеграли) Слетеровського типу. Величини Q_λ^{Qu} та Q_λ^{Br} відповідають стандартному поділу «потенціалу» на кулонівську: $\cos \omega / r_{12} / r_{12}$ і брейтовську: $\cos \omega / r_{12} \alpha_1 \alpha_2 / r_{12}$ частини (див., напр., [21,27,2,3,12,84-86,291]).

Зазначимо, що методика, яка використовується та викладається нижче, була докладно розроблена в роботах Іванова-Іванової-Глушкова [21,27,2,3,12,84-86,291] й, як правило, всі багаточисленними дослідниками викладається у схожій манері.

Величина Q_λ^{Qu} відповідає кулонівській взаємодії між електронами. Звичайно кулонівська частина Q_λ^{Qu} визначається через відомі радіальні інтеграли R_λ і кутові коефіцієнти S_λ (формули нижче з монографії [3]):

$$\begin{aligned}
 Q_\lambda^{Qu} &= \{ R_\lambda (1243) S_\lambda (1243) + R_\lambda (\tilde{1} 24\tilde{3}) S_\lambda (\tilde{1} 24\tilde{3}) + \\
 &+ R_\lambda (1\tilde{2}\tilde{4}3) S_\lambda (1\tilde{2}\tilde{4}3) + R_\lambda (\tilde{1} \tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_\lambda (\tilde{1} \tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \}, \quad (2.29)
 \end{aligned}$$

де $R_\lambda(1,2;4,3)$ – радіальний інтеграл кулонівської взаємодії між електронами з великими і малими компонентами діраковської хвильової функції (тильда означає малі компоненти).

Для прикладу наведемо вираз, скажімо, для радіальних інтегралів. Справа у тому, що, коли ми перейдемо до оригінальної теорії розрахунку перерізів збудження та, взагалі, фундаментальних характеристик спектроскопії за рахунок зіткнень для багатозарядних іонів, інформація, яка наводиться нижче, легко пояснить й технічні деталі обчислення матричних елементів у перерізах збудження за рахунок зіткнення.

Зокрема, $R_\lambda(1243)$ має вигляд :

$$R_\lambda(1243) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1(r_1) f_3(r_1) f_2(r_2) f_4(r_2) Z_\lambda^{(1)}(r_<) Z_\lambda^{(1)}(r_>) \quad (2.30a)$$

де f – велика компонента радіальної частини діраковської функції одноелектронного стану, а функція Z_λ визначається виразом:

$$Z_\lambda^{(1)} = \left[\frac{2}{|\omega_{13}| \alpha Z} \right]^{\lambda+1/2} \frac{J_{\lambda+1/2}(\alpha |\omega_{13}| r)}{r^\lambda \Gamma(\lambda + 3/2)}.$$

Кутовий множник в (2.29) має стандартний вигляд (див., наприклад, [3]):

$$S_\lambda(1243) = \{\lambda l_1 l_3\} \{\lambda l_2 l_4\} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.30b)$$

де $\{\lambda l_1 l_3\}$ означає, що $(\lambda + l_1 + l_3)$ є парною величиною.

Решта членів у виразі (2.29) включають також інтеграли з малими діраковськими компонентами. Як завжди, знак «~» позначає, що в (2.29) велику радіальну компоненту f_i потрібно замінити на малу g_i , а у (2.30б) l_i замінити на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\alpha_i > 0$ та $l_i + 1$ для $\alpha_i < 0$.

Обчислення радіальних інтегралів оператора міжелектронної взаємодії виконано нами на основі оригінальної схеми, вперше реалізованої Івановим-Івановою-Глушковим (див., напр., [80, 12]). Так, наприклад, для інтеграла вигляду (який описує взаємодію електронів в станах $1s$ та nlj):

$$R_k(1s\ nlj; 1s\ nlj) = \iint dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 f_{1s}(r_1) f_{nlj}(r_2) w_k(r_1 r_2) f_{1s}(r_2) f_{nlj}(r_1) \quad (2.30в)$$

виражається через функції Бесселя першого і другого порядку (див., напр., [21, 27, 2, 3, 12, 84-86, 291]).

Схема його обчислення зводиться до розв'язання системи диференціальних рівнянь:

$$Y_1'(r) = f_{nlj}(r) j_{k+1/2}(\alpha z w, r) f_{1s}(r) r^{3/2}$$

$$Y_2'(r) = f_{1s}(r) j_{k+1/2}(\alpha z w, r) f_{nlj}(r) r^{3/2}$$

$$Y_3'(r) = \frac{(-1)^k \pi}{2} (Y_1(r) f_{1s}(r) j_{-k-1/2}(\alpha z w, r) + Y_2(r) j_{k+1/2}(\alpha z w, r) f_{1s}(r)) r^{3/2} \quad (2.31)$$

Всі шукані функції при $r \rightarrow 0$ дорівнюють 0. При загальних обчисленнях рівняння для бesselевських функцій, діраковських хвильових функцій і т.д. включаються в загальну систему диференціальних рівнянь. Інтеграл (2.31) визначається як $Y_3(\infty)$.

Слід зауважити, що облік плазмових ефектів модифікує тільки радіальні інтеграли, абсолютно не впливаючи на кутові множники. Величина Q_λ^{Br} у (2.32) відповідає Брейтовській взаємодії між електронами.

Відомо, що в ряді випадків Брейтовська взаємодія може істотно змінювати характеристики перерізів та інших характеристик електронно-іонних зіткнень. [3, 108, 212, 222].

Далі зазначимо, що відповідна брейтовська частина взаємодії між електронами визначається виразом:

$$Q_\lambda^{Br} = Q_{\lambda, \lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda, \lambda}^{Br} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{Br}, \quad (2.32)$$

де $Q_{\lambda, \lambda}^{Br}$ визначається виразом:

$$Q_{\lambda}^{\text{Br}} = \{R_{\lambda}(12\tilde{4}\tilde{3})S_{\lambda}^l(12\tilde{4}\tilde{3}) + R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43)S_{\lambda}^l(1243) +$$

$$+ R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3)S_{\lambda}^l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})S_{\lambda}^l(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})\} \quad (2.33)$$

відповідно з радіальними інтегралами та кутовими частинами (1243).

Докладніше елементи використаної нами відомої методики описані в роботах Іванова-Іванової-Глушкова [21,27,2,3,12,84-86,291], де до речі надані й огляди багаточисленних робіт, де вони використані.

2.3. Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи. Обмінно-кореляційні поправки

2.3.1 Основні обмінно-кореляційні ефекти

При описі такої складної системи як електрон-іонна або іон-молекулярна система зіткнень, вкрай важливим є прецизійне врахування внеску складних обмінно-кореляційних ефектів, відповідних поправок другого і вищих порядків ТЗ.

Слід нагадати, що в стандартних методах типу багатоконфігураційного наближення ХФ або ДФ, а також різних версіях R-матричного методу [20, 165, 166] облік обмінно-кореляційних ефектів здійснюється шляхом використання багатоконфігураційної хвильової функції.

Більш ефективний підхід до врахування поправок другого і вищих порядків ТЗ зводиться до модифікації затравочного потенціалу та потенціалу взаємодії квазічастинок між собою.

Дуже важливо підкреслити, що при цьому зберігається аналітичний вигляд поправок найнижчого порядку [3, 12, 84-86]. З іншого боку, ця методика не дозволяє повною мірою врахувати внесок високо розташованих рідбергівських станів і станів континууму, який, як неважко зрозуміти, відіграватиме вкрай важливу роль в розрахунках перерізів електрон-іонних зіткнень в плазмі, де фактичним третім параметром буде енергія ϵ_0 (нижня межа станів континууму, до якої прирівнюються серії рідбергівських станів; як правило, ця величина підбирається з урахуванням знання повного спектра енергетичних рівнів іона в плазмі [228]; прийнятна оцінка для ϵ_0 лежить в інтервалі $[0.01T_e; 0.1T_e]$, де T_e – електронна температура)

Традиційним методом урахування обмінно-кореляційних ефектів в сучасній теорії багатоелектронного атома [1-3, 155, 156] є використання двох основних засобів уточнення результатів розрахунку в першому порядку багаточастинової ТЗ:

а) перший пов'язаний з розширенням секулярної матриці M шляхом введення нових збуджених станів; в цьому випадку елементи секулярної матриці розраховуються в першому порядку ТЗ; у задачах, пов'язаних із зіткненнями, такий підхід може призвести до суттєвих обчислювальних труднощів, очевидно, складно подоланим, як це продемонстрували навіть роботи недавніх років з розрахунку перерізів електрон-іонних зіткнень в рамках таких методів як метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBТ), а також наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багато-конфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (див. [1-3, 20, 23, 24, 106-110, 165, 166]).

б) другий спосіб в першому порядку ТЗ полягає у внесенні поправок вищих порядків в кожен з матричних елементів; розмір матриці зберігається. Поправки другого і вищих порядків ТЗ фактично враховують накладення додаткових станів у кожному з елементів M_{ij} .

Виходячи з [2], доречно нагадати, що зазвичай розрізняють два види додатково накладуваних станів:

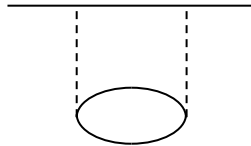
а) стан з порушеним остовом; їх накладення враховує поляризаційна взаємодія квазічастинок між собою; при цьому фактично зовнішні квазічастинки залишаються замороженими (шукана поправка відповідає урахуванню внеску послідовності так званих поляризаційних діаграм);

б) стан із замороженим остовом і віртуально порушуваними квазічастинками; накладення таких станів враховує внесок ефектів вищих порядків від явної взаємодії квазічастинок між собою (шукана поправка відповідає урахуванню внеску послідовності ступеневих діаграм; ефект екранування та антиекранування квазічастинок). Фактично тут мова йде про перенормування екранувального параметра в гамільтоніані (2.3).

Детальний виклад повної теорії і технічних аспектів її реалізації в конкретних атомних розрахунках з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів можна знайти в роботах (див., напр., [1-3, 12, 108-110, 155, 156, 165, 166, 196-198]).

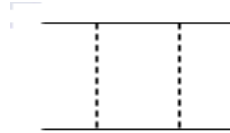
У даній теорії ми використовували техніку Іванова-Іванової-Глушкова, детально викладену в роботах [3, 12, 80, 84-88].

Виходячи з [3], проаналізуємо внески діаграм другого порядку, відповідні описаним вище ефектам поляризаційної взаємодії квазічастинок та екранування зовнішніх квазічастинок (або антиекранування в разі, скажімо, електрона і вакансії). Послідовність поляризаційних діаграм типу



та аналогічних відповідає ефектам поляризаційної взаємодії квазічастинок.

Відповідно послідовність так званих сходових діаграм типу



відповідає ефектам екранування зовнішніх квазічастинок.

Слід нагадати, що ще в ранніх роботах Толмачова (МДУ) та Іванова-Іванової (МФТІ-ІСАН) [10-12, 80, 84-88] було доведено факт компенсації внеску двохквазічастинкових діаграм 2-го порядку з потенціалом - VC внесками так званих ХФ діаграм 2-го порядку з власно-енергетичними вставками. Ця обставина в точності зберігається і в даній теорії.

В рамках формалізму ТЗ внесок поляризаційної і екранувальної поправок другого порядку ТЗ визначають сумою енергій, обумовлених поправками за рахунок поляризації та екранування:

$$\Delta E_{corr} = \Delta E_{scr} + \Delta E_{pol} + \Delta E_{int\ erf} \quad (2.35)$$

У вищих порядках ТЗ до доданків в (2.35) додадуться внески діаграм $\Delta E_{int\ erf}$, що описують інтерференцію поляризаційного і екранувального ефектів.

Ефективний спосіб урахування ефекту поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок через поляризованість остова замкнених електронних оболонок без істотного збільшення розмірів секулярної матриці М запропонований в [12] і полягає в додаванні до оператора кулонівської міжквазічастинкової взаємодії поляризаційного оператора,

матричні елементи якого відповідають урахування внеску від прямої і зворотної поляризаційних діаграм:

$$\Delta E_{pol}^{(2)} = \iint dr_1 dr_2 \rho_1(r_1) \left[V_{pol}^d(r_1 r_2) + V_{pol}^{ex}(r_1 r_2) \right] \rho_2(r_2). \quad (2.36)$$

де ρ_1, ρ_2 – густини розподілу для зовнішніх квазічастинок.

Поляризаційний оператор тут визначається виразами з електронною щільністю $\rho_c^{(0)}$ остова під час відсутності зовнішніх квазічастинок (електронів або вакансій), яка визначається в рамках калібрувально-інваріантної КЕД процедури генерації нульового наближення ТЗ.

У конкретних розрахунках ми використовуємо обмінно-поляризаційний потенціал у формі, запропонованій Глушковим [157]. Зокрема, шуканий потенціал прямої поляризаційної взаємодії (діаграма 2.2а) має вигляд:

$$V_{pol}^d(r_1 r_2) = X \left\{ \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'| \cdot |r' - r_2|} - \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'|} \int \frac{dr'' (\rho_c^{(0)}(r''))^{1/3} \theta(r'')}{|r'' - r_2|} \right\} / \left\langle \left(\rho_c^{(0)} \right)^{1/3} \right\rangle \quad (2.37)$$

$$\left\langle \left(\rho_c^{(0)} \right)^{1/3} \right\rangle = \int dr \left(\rho_c^{(0)}(r) \right)^{1/3} \theta(r),$$

з релятивістським фактором:

$$\theta(r) = \left\{ 1 + \left[3\pi^2 \cdot \rho_c^{(0)}(r) \right]^{2/3} / c^2 \right\}^{1/2} \quad (2.38)$$

де X – числовий коефіцієнт.

Відзначимо, що кутові частини матричних елементів: $V_{pol}^d, V_{pol}^{ex}, (1 - \alpha_i \alpha_j) / r_{ij}$ збігаються, тому облік поправки $\Delta E_{pol}^{(2)}$ фактично зводиться

лише до модифікації радіальних інтегралів, що входять у вираз для поправки першого порядку ТЗ $\Delta E^{(1)}$ по міжквaziчастинковій взаємодії.

Аналогічно для потенціалу обмінної поляризаційної взаємодії (діаграма 2.2d) маємо [157]:

$$\begin{aligned}
 V_{pol}^{ex}(r_1, r_2) = & -\frac{X}{2} (0,375)^{1/3} \times \\
 & \times \left\{ \frac{\left[\left(\rho_c^{(0)}(r_1) \right)^{1/3} \theta(r_1) + \left(\rho_c^{(0)}(r_2) \right)^{1/3} \theta(r_2) \right]}{|r_1 - r_2|} - \left(\int dr \cdot \left(\rho_c^{(0)}(r) \right)^{1/3} \theta(r) \right)^{-1} \times \right. \\
 & \left. \times \int dr' \left(\rho_c^{(0)}(r') \right)^{-2/3} \theta^{-2}(r') \cdot \left[\frac{\left(\rho_c^{(0)}(r_1) \right)^{-1/3} \theta^{-1}(r_1)}{|r_1 - r'|} + \frac{\left(\rho_c^{(0)}(r_2) \right)^{-1/3} \theta^{-1}(r_2)}{|r' - r_2|} \right] \right\}
 \end{aligned}
 \tag{2.39}$$

Техніка визначення матричних елементів поляризаційних потенціалів (2.37) і (2.39) викладена в роботах [3, 12, 222] і фактично зводиться до визначення поправки до радіальних інтегралів міжелектронної взаємодії у вигляді:

$$R_\lambda^d = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 r_1^2 r_2^2 r_3^2 \rho_1(r_1) \tilde{u}_\lambda(r_1 r_3) \rho_c^{1/3}(r_3) \tilde{u}_\lambda(r_3 r_2) \rho_2(r_2) \tag{2.40}$$

В рамках методу диференціальних рівнянь Глушкова-Іванова-Іванової [80] розрахунок всіх радіальних інтегралів даної задачі зводиться до розв'язання системи диференціальних рівнянь з відомими граничними умовами при $r=0$. Зокрема, розглянемо інтеграл (2.40), що входить в поляризаційну поправку. Вводячи:

$$R^d = \lim_{r \rightarrow \infty} Y(r). \tag{2.40a}$$

функцію $Y(r)$ можна визначити з розв'язання системи шести диференціальних рівнянь з нульовими граничними умовами:

$$\begin{aligned}
Y'_1 &= \left(\rho_1 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_1 \right) / r; \\
Y'_2 &= \left(\rho_2 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_2 \right) / r; \\
Y'_3 &= \left(\rho_c^{1/3} r^2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(1)} - (2\lambda + 1)Y_3 \right) / r; \\
Y'_4 &= \left(\rho_2 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_4 \right) / r; \\
Y'_5 &= \left(\rho_1 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_1 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_5 \right) / r;
\end{aligned} \tag{2.406}$$

$$Y'(r) = \left(\rho_1 r^2 Y_4 + \rho_2 r^2 Y_5 + \rho_c^{1/3} r^2 Y_2 Z_\lambda^{(2)} \right) Z_\lambda^{(2)}$$

Повна система рівнянь завдання включає також рівняння для модифікованих функцій Бесселя $Z_\lambda^{(1)}$, $Z_\lambda^{(2)}$, діраковського рівняння для одноквазічастинкових радіальних функцій і т.д. Всі інші радіальні інтеграли завдання, включаючи інтеграли першого порядку ТЗ, визначаються як розв'язання диференціальних рівнянь.

Альтернативним дуже популярним в останні роки є, крім, використання так званих багаточастинкових ХС функціоналів густини (див., напр., [2-4,107-115,291]) або параметризованих модельних потенціалів (див., напр., [4,33,49,65,66]), також є метод ФГ з комплексною енергією та самоузгодженим DKS потенціалом (див., напр., [2,3,97]). Цей же підхід, як показано, напр., [3,37,46,145,146,159], може бути взятий за основу при обчисленні поправок, обумовлених обмінно-кореляційними, або обмінно-поляризаційними ефектами, як ефектами другого та вище порядків ТЗ.

При цьому є можливим урахування всіх класів основних діаграм (обмінно-поляризаційних поправок другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків, у т.ч., екранування кулонівської взаємодії електронів, поляризаційна взаємодія квазічастинок, а також взаємодія квазічастинка-дірка, ітерацій масового оператора квазічастинки тощо.

На основі методу ФГ урахування кореляційних поправок другого порядку до енергії квазічастинки зводиться до обчислення інтегралів виду:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \int \int \int \int \psi + (r_1) G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) [(1 - a_1 \alpha_3) / r_{13}] \Pi(\omega, r_3, r_4) [(1 - a_2 \alpha_4) / r_{24}] \psi(r_2) dr_1, dr_2, dr_3, dr_4 \tag{2.41}$$

де Π — поляризаційний оператор, який визначається формулою:

$$\Pi(\omega, r_1, r_2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) G(\varepsilon, r_1, r_2) = i \sum_n \psi_n(r_1) [G(\varepsilon_n + \omega, r_1, r_2) + G(\varepsilon_n - \omega, r_1, r_2)] \psi_n(r_2) \quad (2.42a)$$

Для підсумовування нескінченного ланцюжка екранувальних (або сходових) діаграм звичайно використовується прийом, пов'язаний із сумуванням геометричної прогресії з перенормуванням Π .

Ітерації масового оператора квазічастинки і внесок, напр., прямої власно-енергетичної діаграми враховуються таким чином:

$$\sum_a(\varepsilon, r_1, r_2) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \iint G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) [(1 - \alpha_1 \alpha_3)/r_{13}] \mathcal{P}(\omega, r_3, r_4) [(1 - \alpha_3 \alpha_4)/r_{34}] dr_3 dr_4 \quad (2.42b)$$

та аналогічним чином для обмінної діаграми.

Слід відмітити, що викладена нами кратко схема урахування ХС поправок суттєво базується на методі релятивістської ФГ, при чому на відміну від існуючих алгоритмів типу, нар., [37,46,145,146,159], є більш послідовною, оскільки у вище наведених виразах фігурує релятивістський потенціал e - e взаємодії, в той час як у [46,145,146,159] використано простий кулонівський потенціал $1/r_{12}$.

Облік поправки, зумовленої так званим ефектом екранування зовнішніх електронів (антиекранування вакансії і електрона) зазвичай виконується шляхом додавання до потенціалу взаємодії зовнішнього електрона з остовом електронних замкнених оболонок в гамільтоніані нульового наближення ТЗ додаткового екранувального потенціалу, який виникає від присутності іншої квазічастинки (в наближенні без урахування плазмового середовища):

$$W(r) = \int dr' \Psi_{nj}^2(r')/r_>, \quad (2.43)$$

де $r_>$ — більше за r та r' .

Включення $W(r)$ в нульовий порядок дозволяє ефективно врахувати діаграми ступеневого типу всіх порядків ТЗ.

Слід зауважити, що викладена вище методика має низку істотних переваг в порівнянні з класичними підходами (див., напр., [155, 156]).

Мова, перш за все, йде не тільки про більшу «фізичність» опису між квазічастинкових кореляцій, а й про економності обчислювальної процедури.

У стандартних підходах накладення станів як першого, так і другого типів приводить до обчислення надзвичайно громіздких матричних елементів. Стани другого типу можуть бути враховані в секулярній матриці, проте, при цьому вкрай важливим є облік цілого континууму високих станів для досягнення необхідної точності (детальне обговорення шуканого питання дано, наприклад, в [1, 3]).

Добре відомі обчислювальні труднощі, що виникають при значному розширенні секулярної матриці (див., напр., [194-196]).

З іншого боку, з огляду на те, що в реальній електрон-іонній системі зіткнень в плазмі багатозарядних іонів роль рідбергівських станів є важливою частиною в будь-якому випадку для збільшення точності розрахунку характеристик за рахунок зіткнень доводиться обов'язково враховувати стани шляхом розширення секулярної матриці додатково.

Зрозуміло, вкрай важливим є і облік станів континууму. Ефективним методом урахування цих станів є метод штурмовських розкладів.

Розглянемо цей підхід детальніше, дотримуючись наших робіт [231-235, 291].

2.3.2 Метод штурмовських розкладів для урахування станів континууму

Проблема урахування станів континууму в розрахунках радіаційних характеристик і характеристик зіткнень атомів і іонів є відомою проблемою, яка істотно ускладнює обчислювальну процедуру і різко зменшує точність опису атомних характеристик, в тому числі характеристик випромінювання і зіткнень за участю фотонів, електронів та іонів.

Як відомо, простір функцій атомних станів можна натягнути на простір штурмовських орбіталей, який є і розрахунковим і дискретним [12, 27, 80, 132, 231-235, 291]. Ця ідея лежить в основі досить ефективного і формально точного підходу для того, щоб виключити з теорії проблему урахування безперервного спектра. Набір штурмовських орбіталей вводиться зі спеціально заданою асимптотикою, що є принциповим для

збіжності спектрального розкладання, включаючи спектральне розкладання функцій Гріна.

Серед прикладів ефективного використання методу штурмовських розкладів в різних завданнях атомної і молекулярної фізики слід вказати роботи Іванова і співр., Груздева і співр., Dalgarno et al, Vuchachenkoetal, Глушкова і співр. і т.д. (див., напр., [3, 12, 27, 45-47, 80, 132, 156, 231-235, 291, 214]).

Основна ідея нашого підходу полягає в наступному. В звичайному формулюванні в якості базисних функцій використовується система власних функцій узагальненої задачі на власні значення для пучка операторів:

$$(H_0 - \varepsilon)\Phi_\nu = \Lambda_\nu \hat{g}\Phi_\nu \quad (2.44)$$

де H_0 – незбурений гамільтоніан системи, \hat{g} - ваговий оператор, взагалі кажучи, не комутуючий з оператором H_0 ; Λ_ν, Φ_ν - власні значення і власні функції рівняння Дірака.

Таким чином, ми з самого початку працюємо вже в релятивістському наближенні, на відміну від робіт типу [45-47, 132], де незбурений гамільтоніан системи брався в нерелятивістському наближенні. Ваговий оператор в (2.44) зазвичай вибирається таким чином, щоб на відміну від спектра оператора H_0 , повний спектр був чисто дискретним.

Неважко показати, що оператор Гріна незбурений, завданий діагоналлю в поданні, яке задається набором функцій Φ_ν і відповідно розкладається:

$$G_0(\varepsilon) = \sum_\nu |\Phi_\nu\rangle \langle \Phi_\nu| / \Lambda_\nu(\varepsilon) \quad (2.45)$$

містить лише одноразові підсумування по квантових числах $\{\nu\}$.

В якості оператора H_0 – в нашому підході використовується гамільтоніан системи в наближенні (2.10).

Відповідне рівняння Дірака (вигляду (2.23)) можна записати в такому загальному вигляді:

$$[h_D(x) - \varepsilon_n]\psi_n(x) = 0 \quad (2.46)$$

Поряд з дискретним спектром вираз ($\varepsilon = \varepsilon_n \leq \varepsilon_F$) має безперервний спектр власних значень ($\varepsilon > \varepsilon_F$), відповідних діраковським віртуальним орбіталям.

У штурмовській постановці завдання шукаються власні значення і власні функції рівняння:

$$[h_D(x) - \varepsilon]\phi_v = \tau_v \zeta(x) \phi_v, \quad (2.47)$$

При $\varepsilon < 0$ рівняння (2.47) має чисто дискретний спектр власних значень $\tau_v = \tau_v(\varepsilon)$.

Як вагові оператори зазвичай використовуються оператори, пропорційні деякій частині або навіть всій потенційній енергії в гамільтоніані H_0 .

Фур'є-образ одночастинкової функції Гріна в наближенні ДКШ можна представити у вигляді розкладання за власними функціями задачі (2.47):

$$G^{(+)}(x, x'; \varepsilon) = \sum_v \frac{\tilde{\varphi}_v(x) \tilde{\varphi}_v^*(x')}{\tau_v(\varepsilon) - 1}, \quad (2.48)$$

де $\tilde{\varphi}_v(x)$ - спроектована штурмовська функція:

$$\tilde{\varphi}_v(x) = \varphi_v(x) - \sum_{k=1}^N \psi_{n_k}(x) \langle \psi_{n_k} | \varphi_v \rangle \quad (2.49)$$

У разі одночастинкового збуреного оператора, скажімо,

$$W(x) = \sum_{a=1}^N w_a(x)$$

поправка другого порядку до енергії атома визначається стандартним виразом вигляду:

$$\delta E^{(2)} = - \sum_{k=1}^N \langle u_{n_k} | w G^{(+)}(\varepsilon_{n_k}) w | u_{n_k} \rangle =$$

$$= - \sum_{k=1}^N \sum_{\nu} | \langle \tilde{\varphi}_{\nu} | w | u_{n_k} \rangle |^2 / [\tau_{\nu}(\varepsilon_{n_k}) - 1] \quad (2.50)$$

і фактично містить тільки підсумовування по зайнятих станах (кістяка) і віртуальних діраковських орбіталях штурмовського типу, що належать до суто дискретного спектра.

Як було показано Dalgarno et al, Груздева в нерелятивістському наближенні і Глушковим та ін. в релятивістському (див. напр., [45-47, 132, 231-235, 291, 214]), в разі, якщо у оператора $w_{\nu}(x)$ є взаємодія із зовнішнім електричним полем, вираз (2.50) визначає здатність до поляризації багатоелектронного атома.

У практичній реалізації метод штурмовських розкладів на прикладі конкретного неону-подібного іона виглядає таким чином. На першому етапі розв'язується система релятивістських рівнянь Дірака (2.23) щодо діраковських радіальних функцій і діагональних параметрів Лагранжа $\varepsilon^{4s}, \varepsilon^{3p}, \varepsilon \varepsilon^{3s}$ і т.д.

На другому етапі чисельно розв'язується система рівнянь, яка еквівалентна (2.47) [222]:

$$(-i\alpha c \nabla + V(r) + \delta_i V_C(r) - \varepsilon_i) \varphi_i = 0, \quad (2.51)$$

де, як і вище:

V – потенціал, що включає і потенціал електрон-ядерної взаємодії, обмінно- кореляційний потенціал, а також екранувальний потенціал;

V_C - потенціал середнього поля, що створюється іншими електронами (остова);

кожній i орбіталі реального або штурмовського стану відповідають два параметри: ε_i, δ_i .

Для орбіталей реальних станів параметр $\delta_i=1$.

Важливо також підкреслити, що всі орбіталі штурмовського доповнення рівняння (2.48) мають експонентну асимптотику при $r \rightarrow \infty$, яка збігається з асимптотикою останньої орбіталі реального стану у відповідному базисі орбіталей реальних станів.

У кожному разі функції явно врахованих реальних станів представляють редуковане спектральне розкладання для функції Гріна G .

Залишкова частина при цьому зменшується як $\exp[-r(-2\varepsilon)^{1/2}]$ при $r \rightarrow \infty$, (ε -власна енергія останнього явно врахованого реального стану).

Абсолютно ту ж асимптотику мають всі орбіталі штурмовського доповнення у відповідному базисі. Ця обставина є дуже суттєвою в плані збіжності методу.

Кількість функцій реальних станів, які явно враховуються, як зазвичай, визначається числовим дослідженням методу для розглянутих в нашому випадку радіаційних характеристик за рахунок зіткнень.

Зрозуміло, треба відзначити фундаментальну роль, яку відіграє використання оптимізованого одноквазічастинкового уявлення, що генерує відповідні базиси релятивістських хвильових функцій електрона (вакансії) в різних станах.

У вступі вказувалося на недоліки традиційних методів теоретичної спектроскопії за рахунок зіткнень, що призводять в результаті до досить великої похибки обчислення відповідних констант елементарних атомних процесів, включаючи радіаційні процеси зіткнень.

У нашому методі ми використовуємо коректну КЕД процедуру генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення, яка, природно, модифікується в нашому випадку внаслідок урахування плазмових ефектів 207.

Оскільки принципові моменти (див. деталі в [3, 10, 212, 222, 228, 229]) відповідної процедури в нашому випадку не змінюються, ми обмежимося викладом лише основних її аспектів, акцентуючи увагу на урахування особливостей наших завдань і теорії

2.4 Калібрувально-інваріантний релятивістський підхід до генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення для електрон-атомної системи

В цьому підрозділі ми викладемо калібрувально-інваріантний метод генерації оптимізованого нульового наближення КЕД ТЗ, узагальнюючий оригінальне формулювання [10], для використання в розрахунках відповідних матричних елементів перерізів збудження і сил електрон-іонних зіткнень за участю електронів і Бі в плазмі. Слід зазначити, що питання побудови одноквазічастинкового явлення в теорії атомних систем досить докладно розглядалось у літературі й було досить послідовно

охарактеризовано о у багатьох робітах (див., напр., [21,27,2,3,12,84-86,291])

Одним з найбільш послідовних методів вирішення зазначеної проблеми є відома релятивістська методика Глушкова-Іванова [22], в якій в рамках адіабатичного формалізму Гелл-Мана і Лоу розроблена КЕД процедура мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину і розвинений метод генерації калібрувально-інваріантних базисів релятивістських орбіталей.

З метою розширення класу функцій для опису електронної густини в атомі Глушков-Малиновська-Хецеліус узагальнили шукану процедуру (див., напр., [9, 108, 109]). Надалі методика [10] була застосована дуже багатьма дослідниками в самих різних класах завдань, в тому числі, обчислення енергетичних і спектроскопічних характеристик атомів і молекул та ряді завдань ядерної фізики і фізики молекул (див., напр., [1-3, 7, 155, 165, 166,202]).

Раніше в публікаціях (див., напр., [1-3]), присвячених дослідженню енергетичних спектрів, імовірностей радіаційних переходів і сил осциляторів, імовірностей автоіонізаційного і оже-розпаду різних атомів, іонів, перерізів розсіювання за участю атомів, іонів, фотонів, а також в ряді специфічних завдань мезоатомної і ядерної фізики (див., напр., [3-5, 9, 51, 52, 91, 212, 222, 228, 229] та ін.) було показано, що цей підхід забезпечує спектроскопічну точність опису шуканих характеристик.

Ми розглянемо багатоелектронний атом з однією квазічастинкою над остовом замкнутих електронних оболонок, причому квазічастинка знаходиться в першому збудженому стані, пов'язаному з основним станом дипольним електричним переходом.

У нульовому порядку ТЗ КЕД визначається одноелектронний затравочний потенціал

$$V_N(r) + V_C(r).$$

Потенціал ядра $V_C(r)$ пов'язаний зі щільністю електронів в остові $\rho_C(r)$ стандартним чином [12]. Більш того, всі виникаючі у всіх порядках ТЗ енергетичні поправки фактично є функціоналом густини $\rho_C(r)$. Мова тут йде про багатоелектронні поправки другого і вищих порядків атомної ТЗ (або четвертого порядку КЕД ТЗ), фактично залежним від калібрування фотонного пропагатора.

Виходячи з [3], нагадаємо класичний приклад порушення принципу калібрувальної інваріантності – розбіжність величин сил осциляторів, розрахованих в моделях Хартрі, поля за допомогою операторів переходу у вигляді "довжини" і "швидкості".

В [10] для побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення КЕД ТЗ для багатоелектронних іонів використовується енергетичний підхід, що базується на адіабатичному формалізмі Гелл-Мана і Лоу [102]. У другому та четвертому порядку ТЗ КЕД (тобто першому та другому порядку звичайної стандартної атомної ТЗ) з'являються діаграми), внески яких в уявну частину енергетичного зрушення $\text{Im}\Delta E$ враховують поляризаційні ефекти остова (поляризацію ядра із заповненою оболонкою квазічастинками).

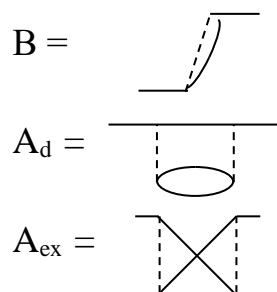


Рис. 2.1 - Діаграми першого та другого порядку теорії збурень, які дають ненульовий внесок для уявної частини зрушення

Відповідний внесок залежить від калібрування електромагнітних потенціалів (калібрувальний неінваріантний внесок). Завдання зводиться до оптимізації густини ρ_c на основі фундаментального принципу мінімізації енергетичного функціонала, що представляє собою внесок поляризаційних діаграм четвертого порядку КЕД ТЗ (другий порядок атомної ТЗ).

Як завжди, оператор збурення в КЕД ТЗ:

$$-V_c(r) - J_\mu(x)A^\mu(x) \quad (2.52)$$

де A — вектор-потенціал електромагнітного поля, J — оператор струму.

Діаграма B є єдиною діаграмою другого порядку ТЗ, яка дає внесок в уявну частину енергетичного зсуву (або радіаційну ширину атомного рівня) $\text{Im}E$. У четвертому порядку КЕД ТЗ шуканими діаграмами є діаграми A_d (пряма поляризаційна діаграма; (рис. 2.1)) і A_{ex} (обмінна

поляризаційна діаграма; (рис. 2.1)), які описують ефект поляризації остова замкнених електронних оболонок. Далі з використанням стандартної техніки обчислюються внески у величину $\text{Im}E$, відповідних різних діаграм (рис. 2.3). Електронний пропагатор подається в стандартному вигляді. Кожній пунктирній лінії відповідає вираз: $\gamma^\mu D_{\mu\nu} \gamma^\nu$.

Вигляд фотонного пропагатора $D_{\mu\nu}$, визначається калібруванням. Зазвичай використовують кулонівське калібрування:

$$D_{\mu\nu} = -\frac{1}{8\pi^2} \delta_{\mu\nu} \frac{1}{r_{12}} \int d\omega \exp(-i\omega t_{12} + i|\omega|r_{12}) \quad (2.53)$$

Після інтегрування за часом пунктирній лінії відповідає "оператор" міжелектронної взаємодії:

$$\frac{e^2}{4\pi r} \exp(i|\omega|r_{12}) (1 - \alpha_1 \alpha_2) \quad (2.54)$$

згідно [10], внесок у $\text{Im}E$ діаграми B подається у вигляді:

$$\text{Im} E_\alpha(B_1) = \sum \text{Im} E(\alpha - s | B_1) \quad (2.55)$$

Вираз (2.55) являє собою суму порціальних внесків переходів з початкового стану $|\alpha\rangle$ в кінцевий стан $|s\rangle$ (рівні α та s пов'язані електрично дипольним радіаційним переходом). Калібрування фотонного пропагатора можна записати в такому стандартному вигляді:

$$D = D_T + C \cdot D_L \quad (2.56)$$

$$D_T = \frac{\delta_{\mu\nu}}{k_0^2 - k^2}, \quad (2.57)$$

$$D_L = \frac{k_\mu k_\nu}{k_0^2 - k^2}, \quad (2.58)$$

де D_T представляє обмін електронів поперечними фотонами, D_L - поздовжніми фотонами, C - калібрувальна константа.

Внесок діаграми другого порядку в парціальну радіаційну ширину рівня α дорівнює за умови $D=D_T$ (см. [10]):

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_\alpha^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_T(r_1 r_2) \psi_\alpha(r_2) \psi_s(r_1) \quad (2.59)$$

Аналогічно при $D=D_L$ внесок діаграми другого порядку в парціальну радіаційну ширину рівня α дорівнює:

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_\alpha^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_L(r_1 r_2) \psi_\alpha(r_2) \psi_s(r_1) \quad (2.60)$$

тут

$$D_T(r_1 r_2) = (1 - \alpha_1 \alpha_2) \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} / r_{12} \quad (2.61)$$

$$D_L(r_1 r_2) = [1 - (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} + \\ + \omega_{\alpha_s} [1 + (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \cos \omega_{\alpha_s} r_{12} \quad (2.62)$$

Слід нагадати, що в силу відомої теореми Гранта, якщо електронні хвильові функції атома Ψ_α , Ψ_s відповідають одному і тому ж рівнянню Дірака, то внесок $D_{\mu\nu}$ дорівнює 0. При обчисленні внеску $\text{Im}E_{\text{inv}}(\alpha-s)$ використовується уявлення D у вигляді $D=D_T+CD_L$. Калібрувально-неінваріантний внесок діаграми A_d в лінійному по C наближенні, згідно [10], набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
\text{Im } E_{ninv}(\alpha - s | A_d) = & -C \frac{e^2}{4\pi} \iiint \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \Sigma \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{\alpha_s}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha_s}} \right) \Psi_{\alpha}^+(r_1) \Psi_m^+(r_2) \Psi_s^+(r_3) \Psi_n^+(r_4) (1 - \alpha_1 \alpha_2) / r_{12} \cdot \\
& \{ [(\alpha_3 \alpha_4 - (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34})) / r_{34} \cdot \sin[\omega_{\alpha_n} (r_{12} + r_{34}) + \omega_{\alpha_n} \cdot \\
& \cos[\omega_{\alpha_n} (r_{12} + r_{34})] (1 + (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34}))] \} \Psi_m(r_3) \Psi_{\alpha}(r_4) \Psi_n(r_2) \Psi_s(r_1)
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Як показано в [10], вираз (2.63) подається у вигляді суми:

$$\Sigma \langle \alpha m | W_1 | ns \rangle \langle sn | W_2 | m\alpha \rangle / (\omega_{mn} \pm \omega_{\alpha_s}) \tag{2.64}$$

з чотирма різними комбінаціями операторів W_1 та W_2 . Якщо ввести індекс f у межі заповнених оболонок, то умова $n \geq f$ вказує незайняті, пов'язані і континуальні стани зовнішнього електрона; $m \leq f$ вказує кінцеве число станів в ядрі і стани негативного континууму (враховують поляризацію електрон-позитронного вакууму). Як зазначалося вище, нас цікавлять класи БІ з відносно невеликим Z , коли радіаційними поправками можна знехтувати.

Далі реалізується процедура мінімізації функціонала густини $\text{Im} \Delta E_{ninv}$, що призводить до відповідного інтегро-диференціального рівняння для ρ_c . Його розв'язок дозволяє точно отримати оптимізоване одноквазічастинкове уявлення. Для обчислення сум вигляду (2.56) зазвичай використовується метод диференціальних рівнянь Глушкова - Іванова-Іванової [80, 84-86]. Інтеграл (2.63) апроксимується матричним елементом оператора поляризаційної взаємодії. Процедура мінімізації функціоналу (2.63) $\text{Im } E_{ninv}$ виконується за умови:

$$\int dr r^2 \rho_c(r) = 1 \tag{2.65}$$

і зводиться до ланцюжка наступних варіацій [3]:

$$\begin{aligned}
\delta \rho_c \rightarrow \delta V_c \rightarrow \delta \{f_{\alpha}, f_s, g_{\alpha}, g_s\} \rightarrow \delta X, \\
\delta Y \rightarrow \delta Y_i \rightarrow \delta Z_i \rightarrow \delta I \rightarrow \delta E
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Тут f, g - розв'язок рівняння Дірака з V_N+V_C .

Перша ланка ланцюжка варіацій реалізується за допомогою:

$$\delta V_C = \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \delta \rho_c(r') + \int_0^\infty dr' r' \rho_c(r') \quad (2.67)$$

або

$$\delta V_C(r) = \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \delta \rho_c(r') + \int_r^\infty dr' r' \delta \rho_c(r') + X \delta \rho_c(r) / \rho_c^{2/3}(r) \quad (2.68)$$

Останній доданок в (2.68) описує внесок обмінних ефектів у відомому наближенні Слетера. На наступному етапі розраховується поправка першого порядку по δV_C до функцій $f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s$ - розв'язком рівняння Дірака з потенціалом V_N+V_C ..., який є фактично біспінор вигляду:

$$\Phi_{\mu m} = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \mu_i m_i} \langle n_i \mu_i m_i | V | n \mu m \rangle / (\epsilon_{n_i \mu_i m_i} - \epsilon) \quad (2.69)$$

де $(n \mu m)$ – квантові числа одноелектронних станів, ϵ - енергетичний параметр.

Відповідні компоненти біспінора (2.69) задовольняють систему рівнянь діраковського типу Глушкова-Іванова-Іванової [80, 81] (в кулонівських од.):

$$G' / \alpha Z + (1 - \mu) G / \alpha Z r + A_+ F = \delta V_C f_{n_i \mu_i}, \quad (2.70a)$$

$$- F' / \alpha Z + (1 + \mu_i) F / \alpha Z r + A_- G = \delta V_C g_{n_i \mu_i}, \quad (2.70b)$$

де функції A_\pm визначаються:

$$A_\pm = V_C(r) \pm 1 / (\alpha Z)^2 - \epsilon. \quad (2.71)$$

Розв'язки системи (2.62) подаються у формі квадратур і містять пари фундаментальних рішень без прaviх частин. В результаті внесок (2.63) апроксимується сумою радіальних інтегралів типу:

$$I = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 X(r_1)Y(r_2)Z(r_3)L(r_1 r_3)M(r_2 r_3), \quad (2.72)$$

де використані такі позначення:

$$\begin{aligned} \{L_1, M_1\} &= Z_\lambda^{(1)} r^p, \{L_2, M_2\} = Z_\lambda^{(2)} r^q, \\ \{X, Y\} &= \{f_\alpha f_s r^t; g_\alpha g_s r^t; f_\alpha g_s r^u; g_\alpha f_s r^u\}, \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$Z(r) = \rho_C^{1/3}(r) r^v,$$

де $\lambda=0,1$; p, q, t, u, v - деякі цілі числа.

Обчислення функцій Z і Y і їх варіацій зводиться до чисельного розв'язання системи диференціальних рівнянь, для чого використана стандартна чисельна процедура Рунге-Кутта четвертого порядку (комплекс «Superatom-ISAN»). Особлива увага повинна бути приділена нормуванню хвильових функцій вільного електрона. Радіальні компоненти f , g задовольняють системи радіальних діраковських рівнянь (в кулонівських од.):

$$\begin{aligned} f' &= -f(k+|k|)/r - gX_2, \\ g' &= g(k-|k|)/r + fX_1, \\ X_1 &= (\varepsilon - U)Z\alpha, \\ X_2 &= (\varepsilon + 2(Z\alpha)^2 - U)Z\alpha. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Тут всі позначення стандартні; відзначимо лише, що U - затравочний потенціал остова заповнених електронних оболонок плюс ядро, ε - одноелектронна власна енергія (позитивна для стану вільного електрона). Докладніше (див., напр., [3-5, 9, 51, 52, 91, 212, 222, 228, 229]).

2.5 Енергетичний підхід в теорії електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів у плазмі

У серії робіт (див., напр., [3-5, 9, 51, 52, 91, 212, 222, 228, 229]) ЕП був адаптований до ряду завдань, зокрема, ефект Штарка, народження електрон-позитронних пар в ядерних зіткненнях (а також зіткненнях важких іонів), елементарних процесів, відповідальних за створення ліній випромінювання в плазмі, а також процесів зіткнень у системах з участю електронів, для ізольованих атомів і іонів.

Там же дано детальне обґрунтування застосовності релятивістського енергетичного підходу у завданні про квазістаціонарні стани квантових систем, теорії зіткнень, задачі про народження електрон-позитронних пар в зіткненнях важких іонів (ядер) і т.д.

Наша основна задача далі - адаптувати шуканий підхід для завдання розрахунку перерізів і сил електрон-іонних зіткнень у плазмі дебаєвського наближення. У зв'язку з подальшим вивченням двохквазічастинкових атомних систем (Ве-, Ne-подібні іони і т.д.) нижче викладається теорія, яка оперує конкретно з процесами збудження електронів за рахунок зіткнень таких систем.

Зокрема, виходячи з [200, 211, 221, 226-229], ми розглядаємо Ne-подібний іон (основна конфігурація: $1s^2 2s^2 2p^6$; низько розташовані порушені стани: $1s^2 2s^2 2p^5 n l_j$, $n=3,4,\dots$, можуть розглядатися в частково-дірковому формалізмі як двохквазічастинкові стани з одним електроном $n l_j$ і однією вакансією $2p$ в остові заповнених електронних оболонок $1s^2 2s^2 2p^6$):

$$((2j_{iv})^{-1} 3j_{ie} [J_i M_i], \epsilon_{in}) \rightarrow (\Phi_o, \epsilon_{sc}).$$

Тут Φ_o – стан іона із заповненою оболонкою (основний стан Ne-подібного іона);

J_i – повний кутовий момент початкового шуканого стану;

індекси iv, ie відносяться до початкових станів вакансії і електрона;

величини ϵ_{in} та ϵ_{sc} – енергія, відповідно формально налітаючого електрона і електрона, що буде розсіюваним. У поданні вторинного квантування початковий стан системи (іон в збудженому стані з одним електроном і вакансією в остові заповнених оболонок плюс налітаючий електрон):

$$|I\rangle = a_{in}^+ \sum_{m_{iv}, m_{ie}} a_{ie}^+ a_{iv} \Phi_0 C_{m_{ie}, m_{iv}}^{J_i, M_i} \quad (2.75)$$

Тут $C_{m_{ie}, m_{iv}}^{J_i, M_i}$ – коефіцієнти Клебша-Гордона.

Кінцевим станом, природно, є стан:

$$|F\rangle = a_{sc}^+ \Phi_0. \quad (2.76)$$

де Φ_0 – стан іона із заповненою електронною оболонкою (основний стан Ne-подібного іона);

$|I\rangle$ відповідає триквазічастинковому стану;

$|F\rangle$ відповідає одноквазічастинковому стану.

Оскільки, на відміну від робіт [25, 26, 228, 229], ми розглядаємо процеси зіткнень з урахуванням ефектів плазмового середовища [200, 211, 221], слід звернути детальну увагу на внесок рідбергівських станів, що сходяться до відповідної нижньої межі континууму $-\varepsilon_0$. Фактично величина $-\varepsilon_0$ є третім (якщо вважати електронну щільність і температуру першими двома) параметром плазмового середовища. Фізично він визначає термалізовану енергетичну зону рідбергівських і автоіонізаційних рідбергівських станів, що сходяться до порогу іонізації кожного іона, наявного в плазмі. Як затравочну можна використовувати оцінку ε_0 у вигляді:

$$\varepsilon_0 = 0.1 \cdot T_e \quad (2.77)$$

Зрозуміло, кінцеві результати не повинні залежати від параметрів моделі у послідовній теорії, тому в подальшому конкретне значення ε_0 вибирається таким чином, щоб ефект його варіації в межах $[0.01 \cdot T_e, 0.1 \cdot T_e]$ (для Ne-подібних іонів) не впливав на кінцеві результати. У зонах рідбергівських станів виділяються кілька підзон (див. рис. 2.2).

Фактично, таким чином, враховуються серії рідбергівських станів, в спектрі основного стану Na-подібного іона і серії автоіонізаційних рідбергівських станів, що сходяться до відповідних (36) збуджених станів остова.

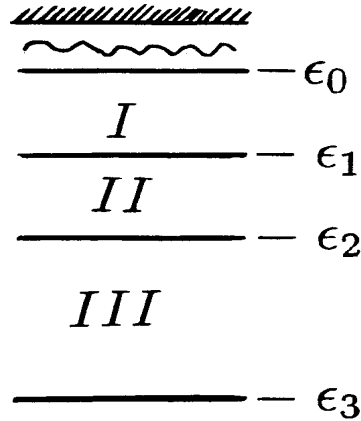


Рис.2.2 - Зони рідбергівських станів (неоно-подібні іони: [Ne,i], nl;
 ϵ_0 - межа термалізованої зони, прилеглої до континууму; ϵ_3 - потенціал
іонізації для стану $nl=3s$; $\epsilon_2=(\epsilon_0 + \epsilon_3)/2$, $\epsilon_1=(\epsilon_0 + \epsilon_2)/2$;

Далі наше завдання зводиться до визначення уявної частини енергетичного зсуву за рахунок зіткнень (2.2) $\text{Im}\Delta E$, яка вперше з'являється у другому порядку атомної ТЗ (четвертий порядок КЕД ТЗ) у вигляді інтеграла по енергії розсіяного електрона ϵ_{sc} :

$$\int d\epsilon_{sc} G(\epsilon_{iv}, \epsilon_{ie}, \epsilon_{in}, \epsilon_{sc}) / (\epsilon_{sc} - \epsilon_{iv} - \epsilon_{ie} - \epsilon_{in} - i0) \quad (2.78)$$

з уявною частиною у вигляді:

$$\text{Im}\Delta = \pi G(\epsilon_{iv}, \epsilon_{ie}, \epsilon_{in}, \epsilon_{sc}) \quad (2.79)$$

Тут G - певна зведена в квадрат комбінація двохелектронних матричних елементів типу (2.28):

$$V(1,2;4,3) = \sqrt{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)(2j_4 + 1)} (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + j_4 + m_1 + m_2} \times \\
\times \sum_{\lambda, \mu} (-1)^\mu \begin{bmatrix} j_1 \dots j_3 \dots \lambda \\ m_1 \dots m_3 \dots \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 \dots j_4 \dots \lambda \\ m_2 \dots m_4 \dots \mu \end{bmatrix} (Q_\lambda^{Qu} + Q_\lambda^{Br}) \quad (2.80)$$

За визначенням, величина (2.81) являє переріз зіткнення електрона з іоном. Природно, при цьому передбачається, що власна функція

налітаючого електрона нормується умовою одиничного потоку, а власна функція розсіяного електрона нормується δ функцією енергії.

$$\sigma = -2 \operatorname{Im} \Delta E \quad (2.81)$$

Далі, як завжди в формалізмі КЕД ТЗ, для майже вироджених станів потрібна діагоналізація комплексної секулярної матриці M (2.20) між станами (2.75), (2.76) тобто:

$$\langle I | M | I' \rangle.$$

Повна реалізація процедури діагоналізації комплексної матриці M пов'язана з відомими обчислювальними труднощами, проте, як відомо, практично без втрати точності обчислення шукана процедура може бути істотно спрощена (див., напр., [10, 12, 21, 27, 80, 84-86]).

Дійсно, припустимою є тільки та діагоналізація, що відповідає дійсній секулярній матриці, в результаті виходить справжня матриця коефіцієнтів власних векторів B_{iv,ie,J_i}^{IK} (див., напр., [10, 21, 27, 231-237]).

Одночасно реалізується перехід від уявлення чистої j - j схеми зв'язку моментів до подання проміжної схеми зв'язку, де відповідно квантові числа I, I' нумерують стани.

Діагональні елементи трансформованої матриці $\langle IK | M | I'K' \rangle$ визначаються тоді стандартним чином:

$$\langle IK | M | IK \rangle = \sum_{iv',ie'} B_{iv',ie'}^{IK'} \langle iv',ie',J_i | M | iv,ie,J_i \rangle B_{iv,ie,J_i}^{IK}, \quad (2.82)$$

причому в силу (2.80) фактично визначають відповідні перерізи зіткнень електрона з іоном, зокрема, перерізів зіткнень, які супроводжуються переходом багатозарядного іона з порушеного двохквaziчастинкового стану в основний стан (так званий процес зіткнень де-збудження)

$$|IK, \epsilon_{in} j_{in} \rangle \rightarrow |\Phi_0, \epsilon_{sc} j_{sc} \rangle.$$

На (рис. 2.5) наведено стандартні Фейнманівські діаграми, які описують шуканий процес зіткнень де-збудження двохквaziчастинкового стану багатозарядного іона (далі Ne- або Ar-подібного іона).

Природно, різні версії зіткнень діаграм на (рис. 2.5) фактично відповідають прямому Кулонівському (D) або обмінному (E) взаємодіям

налітаючого електрона з «бра» і «кет» станами мішені, а у відповідних амплітудах електрон-іонного зіткнення всі 4 складових присутні.

За визначенням, сила електрон-іонного зіткнення $\Omega(I \rightarrow F)$ пов'язана зі перерізом зіткнень σ (2.80) виразом вигляду:

$$\sigma(I \rightarrow F) = \Omega(I \rightarrow F) \cdot \pi / \{(2J_i + 1)\epsilon_{in}[(\alpha Z)^2 \epsilon_{in} + 2]\} \quad (2.83)$$

Переріз електрон-іонного зіткнення визначається квадратом відповідної амплітуди як:

$$\sigma(IK \rightarrow 0) = 2\pi \sum_{J_{in}, J_{sc}} (2J_{sc} + 1) \left\{ \sum_{J_{ie}, J_{iv}} \langle 0 | J_{in}, J_{sc} | J_{ie}, J_{iv}, J_i \rangle B_{ie,iv}^{IK} \right\}^2 \quad (2.84)$$

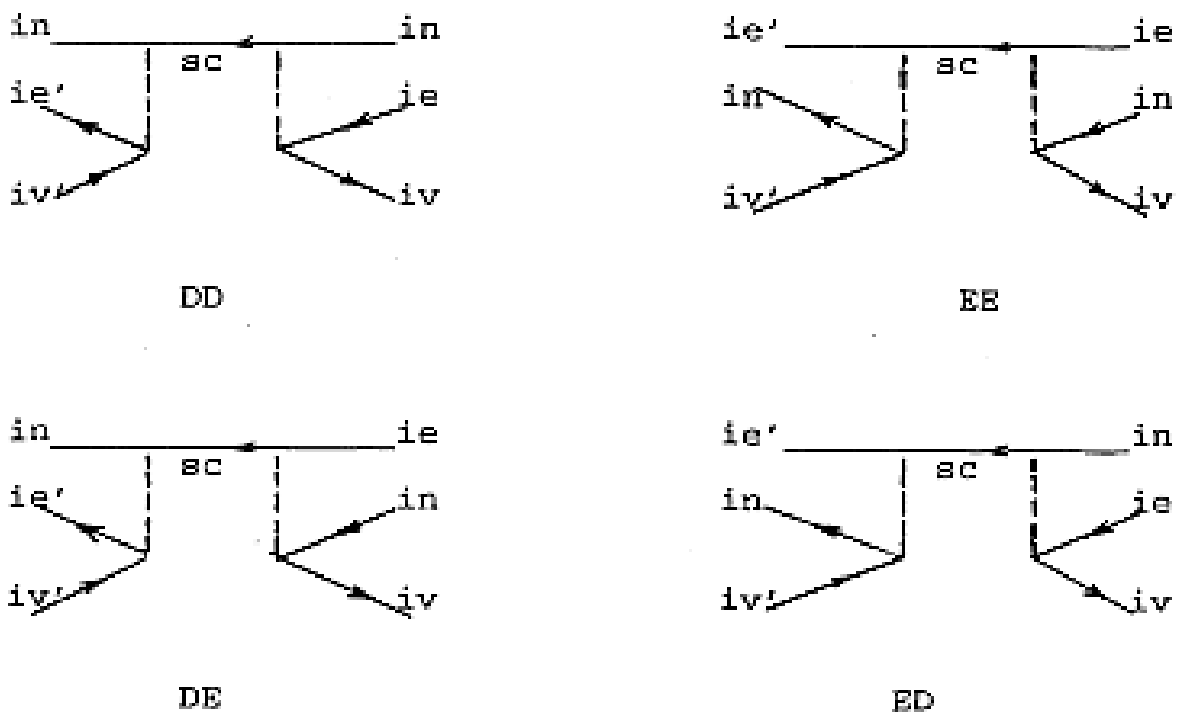


Рис. 2.5 – Трьох-квазічастинкові діаграми, які описують електрон-іонні зіткнення, що супроводжуються переходом іона з порушеного двоквазічастинкового стану в основний стан $|IK, \epsilon_{in} j_{in}\rangle \rightarrow |\Phi_0, \epsilon_{sc} j_{sc}\rangle$. версії діаграм: DD – “пряма-пряма”, EE – “обмінна-обмінна”, DE – “пряма-обмінна”, ED – “обмінна-пряма”.

Тут $B_{ie,iv}^{IK}$ – дійсна матриця коефіцієнтів власних векторів, яка виходить після діагоналізації енергетичної матриці M .

Амплітудна комбінація в (2.84) має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \langle 0 | j_{in}, j_{sc} | j_{ie}, j_{iv}, j_i \rangle = & \sqrt{(2j_{ie} + 1)(2j_{iv} + 1)} (-1)^{j_{ie} + 1/2} \times \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda + j_i} \times \\ & \times \{ \delta_{\lambda, j_i} / (2j_i + 1) Q_{\lambda}(sc, ie; iv, in) + \left[\begin{matrix} j_{in} \dots j_{sc} \dots j_i \\ j_{ie} \dots j_{iv} \dots \lambda \end{matrix} \right] Q_{\lambda}(ie; in; iv, sc) \} \end{aligned} \quad (2.85)$$

Піднесена до квадрата сума (2.85) відповідає 4-ій складовій (відповідно до 4-ої діаграми рис. 2.5), величині Q_{λ}^{QuI} та Q_{λ}^{Br} і визначається за допомогою виразів, наведених в підрозділі 2.2, а далі визначаються з використанням оптимізованих базисів релятивістських орбіталей, які є власними функціями відповідного плазмового гамільтоніану (2.10).

Вирази, аналогічні наведеним вище, можна записати і для випадку порушення багатозарядного іона за рахунок зіткнення з електроном з основного стану (наприклад основна конфігурація $1s^2 2s^2 2p^6$ для Ne-подібного іона) в деякий збуджений стан.

У цьому випадку, природно, треба розглядати $a_{in}^+ \Phi_0$ в якості початкового стану, а в якості кінцевого стану:

$$| F \rangle = a_{sc}^+ \sum_{m_{fe}, m_{fv}} a_{fe}^+ a_{fv} \Phi_0 \tilde{C}_{m_{fe}, m_{fv}}^{J_f, M_f} \quad (2.86)$$

Відповідно, переріз електрон-іонного зіткнення визначається як:

$$\begin{aligned} \sigma(0 \rightarrow IF) = & 2\pi(2J_f + 1) \sum_{j_{in}, j_{sc}} (2j_{sc} + 1) \cdot \\ & \cdot \left\{ \sum_{j_{fe}, j_{fv}} B_{fe, fv}^{FK} \langle j_{fe}, j_{fv} J_f | j_{in}, j_{sc} | 0 \rangle \right\}^2 \end{aligned} \quad (2.87)$$

з амплітудною комбінацією, аналогічною (2.85):

$$\begin{aligned} \langle j_{fe}, j_{fv}, J_f | j_{in}, j_{sc} | 0 \rangle = & \sqrt{(2j_{fe} + 1)(2j_{fv} + 1)} (-1)^{j_{fe} + 1/2} \times \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda + J_f} \times \\ & \times \{ \delta_{\lambda, J_f} (1/(2J_f + 1)) \cdot Q_{\lambda}(sc, ie; iv, in) + \left[\begin{array}{c} j_{in} \dots j_{sc} \dots J_f \\ j_{fe} \cdot j_{fv} \dots \lambda \end{array} \right] Q_{\lambda}(fe, sc; fv, in) \} \end{aligned} \quad (2.88)$$

За аналогією з наведеними виразами (2.83) - (2.88) можна записати вирази для перерізів зіткнень електрона з іоном, що супроводжуються переходом з одного збудженого стану іона в інший порушений і т.д.

Найважливіше питання, пов'язане з нормуванням перерізу, можна вирішити, дотримуючись робіт [226-228].

Для визначення коректно нормованих перерізів треба виконати всі розрахунки з доволі нормованими функціями f_{in} , g_{in} налітаючого електрона і f_{sc} , g_{sc} розсіяного електрона.

Далі всі парціальні перерізи множаться на нормувальні множники N_{in}^2 , N_{sc}^2 і визначаються як:

$$N_{in}^2 = Z\alpha\pi(2j_{in} + 1) \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{X_1 X_2} Y(f_{in}, g_{in})}, \quad (2.89a)$$

$$N_{sc}^2 = Z\alpha/\pi \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{X_1 X_2}}{Y(f_{sc}, g_{sc})}, \quad (2.89b)$$

де $Y(f, g) = r^{2|k|} (X_1 f^2 + X_2 g^2)$ і функції X_1 та X_2 визначені в (2.75).

До числа найважливіших елементарних процесів, які дають внесок в динаміку і кінетику заселення різних збуджених станів в плазмі БІ, відносяться також і діелектронні захоплення і автоіонізаційні розпади рідбергівських станів. Діелектронні захоплення, насправді, можуть знизити енергетичний поріг збудження, наприклад неон-подібного іона, і таким чином, привести до збільшення швидкості зіткнень збудження при заданому розподілі по енергії електронів в плазмі. Внесок цього ефекту

буде залежати від співвідношення між різними каналами іонізації іона в плазмі, що включає з одного боку, за рахунок зіткнень іонізацію, оже-розпад в порушенні стану іона і фотоіонізацію, а з іншого – оже-розпад в основний стан іона.

Як відомо, облік всіх цих процесів вкрай важливий при вивченні динаміки заселеності рівнів в спектрах Бі в плазмі - кандидатів на лазерну генерацію в м'якому ВУФ і рентгенівської області спектра (див. детальніше, [8, 40]).

Згідно з [25, 201, 211], переріз діелектронного захоплення можна визначити аналітичним продовженням сили електрон-іонного зіткнення (2.83) $\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon_{in})$ до області енергії ε_{in} нижчої від порога зіткнень, де енергія розсіяного (захопленого) електрона стає негативною:

$$\varepsilon_{sc} = \varepsilon_{in} - \varepsilon_{ij} \quad (2.90)$$

Слід також врахувати, що:

$$\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon_{in}) \sim (\varepsilon_{fm} - \varepsilon_{sc})^2, \varepsilon_{sc} \rightarrow \varepsilon_{fm}, \quad (2.91)$$

де ε_{fm} - енергія рівня Фермі електронів в основному стані неон-подібного залишку (кістяка).

Однією з прийнятних апроксимацій може бути такий вираз [211]:

$$\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon_{in}) = [(X_0 + X_1\varepsilon + X_2\varepsilon^2)(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{fm})]^2 \varepsilon / \varepsilon_{in}, \quad (2.92)$$

де

$$\varepsilon = -\varepsilon_{fm} \varepsilon_{in} [\varepsilon_{in}^2 - \varepsilon_{fm}^2]^{-1/2}$$

Всі три константи X забезпечують коректні значення $\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon_{in})$ для трьох різних значень енергії ε_{in} .

Слід пам'ятати, що при такому визначенні (2.84), не вдається відтворити резонансну структуру, пов'язану з автоіонізаційними станами неон-подібного іона.

З іншого боку, шукана структура і проявляє себе при визначенні швидкості діелектронного захоплення внаслідок інтегрування по ε_{in} . Остаточно швидкість діелектронного захоплення можна визначити за формулою:

$$C(i-j) = \frac{\pi a_0^2}{(2J_i + 1)} \int_{\varepsilon_{jm} + \varepsilon_{ji}}^{\infty} d\varepsilon_{in} \frac{Ry}{\varepsilon_{in}} \Omega(i-j; \varepsilon_{in}) F(\varepsilon_{in}; T_e) \quad (2.93)$$

$$F(\varepsilon, T) = 2\varepsilon \sqrt{2/(m_e \pi T^3)} \exp(-\varepsilon/T)$$

a_0 – борівський радіус, Ry – енергія Рідберга, (в кулонівських од. $Ry = 0.5Z^2$);

Функція F імітує розподіл плазмових електронів по енергії. Разом зі швидкісним множником це є один з модельних елементів теорії. Слід зауважити, що в принципі наша теорія допускає і використання немаквеллівського розподілу по енергії. Справа в тому, що в реальній плазмі розподіл частинок за швидкостями може в тій чи іншій мірі відрізнятись від чисто маквеллівського [108, 183].

Зокрема, наявність зовнішнього ЕМП може спричинити до спотворення функції розподілу електронів в області високих енергій (ефект потоку так званих улітаючих нетеплових електронів), що призводить до випадку збільшення числа частинок в хвості маквеллівського розподілу. За відсутності значних зовнішніх впливів можлива інша ситуація, коли за рахунок зіткнень, які супроводжуються порушенням або іонізацією, число швидких електронів виявляється менше від маквеллівського. Хоча відмінності від чисто маквеллівського розподілу зустрічаються доволі часто, випадок чисто маквеллівської функції представляє основний інтерес у великому числі додатків.

Далі неважко в рамках нашої теорії [200, 211] визначити швидкість автоіонізаційного розпаду $C_A(j-i;k)$, який супроводжується видаленням електрона з рідбергівської зони (див. рис. 2.4).

Відповідно до принципу детальної рівноваги $C_A(j-i;k)$ виражається через величину $\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon)$:

$$C_A(j-i; k) = \frac{1}{2J_j + 1} \frac{1}{N_{j;k}} \left(\frac{1}{Z - N_c} \right)^3 \frac{2m_e a_0^2}{\hbar^3 R y^{1/2} \pi} \cdot \int_{\varepsilon_{ji} - \varepsilon_k}^{\varepsilon_{ij} - \varepsilon_k - 1} d\varepsilon \Omega(i-j; \varepsilon) (\varepsilon_{ji} - \varepsilon)^{5/2} \frac{dN_j(\varepsilon_{ji} - \varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (2.94)$$

де $N_{j;k}$ – число електронів у рідбергівській зоні станом остова j ;
 $dN_j(\varepsilon)/d\varepsilon$ - розподіл по енергії рідбергівських електронів, зазвичай апроксимується аналітичним виразом вигляду:

$$N_i(\varepsilon) = [d_{i,1}\eta + d_{i,2}\eta^3 + d_{i,3}\eta^5]^2, \eta = (\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2}$$

з параметрами, які фактично визначають коректні значення заселеності рідбергівських станів і чисельно визначаються на основі ітераційної процедури (див. детальніше [27, 211]).

Нарешті відзначимо, що швидкість зіткнень процесу $\langle v\sigma \rangle$ характеризує число актів процесу в одиницю часу на один атом (іон) і один електрон і визначається виразом (у $\text{см}^3/\text{с}$):

$$\langle v\sigma \rangle = \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} d\varepsilon v \sigma F(\varepsilon) \quad (2.95)$$

де σ - переріз зіткнень процесу;

$\Delta\varepsilon$ – порогова енергія процесу;

Для процесів збудження (іонізації) електронами (2.87) набуде вигляду:

$$\langle v\sigma \rangle = K \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} d\varepsilon (\sigma / \pi a_0^2) \varepsilon R y^{1/2} T^{-3/2} \exp(-\varepsilon/T) \quad (2.96)$$

де

$$K = 2\sqrt{\pi} \hbar a_0 / m = 2,18 \cdot 10^{-18} (\text{см}^3 / \text{с})$$

У релятивістській теорії природно описувати розподіл електронів континууму релятивістською функцією розподілу Максвелла-Больцмана (див., напр., [18, 106, 211]):

$$F(E) = [E(E^2 - 1)^{1/2} / \theta \exp(1/\theta) K_2(1/\theta)] \exp[-(E-1)/\theta], \quad (2.97)$$

де E - повна електронна енергія в одиницях m_0c^2 , включаючи масу спокою;

$\theta = k_b T / m_0c^2$ - характеристична безрозмірна температура;

З урахуванням (2.97) відповідно релятивістський швидкісний коефіцієнт також представляється у вигляді $\langle v\sigma^{(i)} \rangle$. Детальний опис розподілу Максвелла-Больцмана і виразів для швидкісних коефіцієнтів дається, напр., у [18]. Зазвичай в наших розрахунках надалі ми використовуємо функцію розподілу (2.89).

Підкреслимо, що всі викладені вище блоки теорії реалізовані чисельно у вигляді відповідних блоків в РС комплексі програм розрахунку атомних і молекулярних характеристик "Superatom-ISAN", зокрема, обчислювальна процедура для розрахунку зіткнень характеристик реалізована у вигляді підкомплексу програм "Plasma-Kinetics" в комплексі "Superatom-ISAN" (див. [192-195]).

На закінчення розділу узагальнимо вище викладений КЕД ЕП і відповідно теорію обчислення перерізів електрон-іонних зіткнень на випадок урахування впливу на систему (іони в плазмі) зовнішніх електромагнітних (поля лазерного випромінювання) полів. У цьому сенсі доречно згадати побудовану в серії робіт [9, 10, 80, 51, 52] (див. також [13, 202]) на основі КЕД ТЗ і S-матричного формалізму Гелл-Мана і Лоу послідовну КЕД теорію деформації радіаційних спектральних ліній в спектрах релятивістських атомних систем в полі лазерного випромінювання.

Автоіонізаційні ширини можуть бути отримані по аналогічній методиці (докладний вивід дивись в [250]), зокрема, визначення для відповідної ширини:

$$\Gamma(n_1^0 j_1^0, n_2^0 j_2^0; J) = \frac{2\pi\epsilon}{K_0} \sum_{\beta_1 \beta_2} \sum_{\beta_1' \beta_2'} C^J(\beta_1 \beta_2) C^J(\beta_1' \beta_2') \sum_{\beta \beta_K} V_{\beta_1 \beta_2; \beta \beta_K} V_{\beta_K \beta; \beta_1' \beta_2'} \quad (2.98)$$

де матричні елементи мають вигляд в рамках нашої теорії:

$$V_{\beta_1\beta_2;\beta_4\beta_3} = \iint dr_1 dr_2 \Psi^{DKS}_{\beta_1}(r_1) \Psi^{DKS}_{\beta_2}(r_2) \frac{\cos|\omega|r_{12}(1-\alpha_1\alpha_2)}{r_{12}} \Psi^{DKS}_{\beta_4}(r_2) \Psi^{DKS}_{\beta_3}(r_1), \quad (2.37)$$

QUOTE

$$C^J(\beta_1\beta_2) = C^J(n_1 j_1 n_1^0 j_1^0; n_2 j_2 n_2^0 j_2^0) A(j_1 m_1; j_2 m_2; JM) \quad (2.37a)$$

де

$$A(j_1 m_1, j_2 m_2 JM) = (-1)^{j_1 - j_2 + M} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \sqrt{2J+1} \quad (2.37б)$$

$$C^J(n_1 j_1 n_1^0 j_1^0; n_2 j_2 n_2^0 j_2^0) = N(n_1^0 j_1^0, n_2^0 j_2^0) [\delta(n_1^0 j_1^0 n_1 j_1) \delta(n_2^0 j_2^0 n_2 j_2) +$$

QUOTE +(-

$$+ (-1)^{j_1 + j_2 + J + 1} \delta(n_1^0 j_1^0 n_2 j_2) \delta(n_2^0 j_2^0 n_1 j_1)] \quad (2.37в)$$

$$N(n_1^0 j_1^0; n_2^0 j_2^0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} & n_1^0 j_1^0 = n_2^0 j_2^0 \\ 1 & n_1^0 j_1^0 \neq n_2^0 j_2^0 \end{cases} \quad (2.37г)$$

З чисельної точки зору обчислення всіх інтегралів при визначенні радіаційної (автоіонізаційної) ширини проводиться ефективно при використанні методу диференціальних рівнянь і зводиться до систем диференціальних рівнянь типу (2.19) (реалізовано у відповідному блоці комплексу “Superatom-ISAN”) [3, 250]).

Точність їх обчислення визначається якістю використовуваних базисів релятивістських орбіталей, і ступенем урахування обмінно-кореляційних ефектів. Для побудови оптимізованого одноквазічастинкового представлення КЕД ТЗ, далі викладемо нашу схему реалізації принципу мінімізації калібрувальньо-неінваріантного внеску (обумовленого внесками поляризаційних діаграм типу прямої Ad і обмінної Aex (дивись рис.2.3) в радіаційну ширину атомного рівня.

2.6. Висновки до розділу

Основні, вперше отримані результати і висновки цього розділу зводяться до наступного:

1. Розвинутий новий релятивістський підхід до обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (у тому числі, перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного розпаду, а також радіаційного розпаду, сил осциляторів тощо) для атомів та багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів атомів і іонів (мішеней) і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень), який базується на енергетичному підході, S -матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу.

2. Розвинутий новий формалізм релятивістської калібрувальньо-інваріантної багаточасткової теорії збурень з модельним дебаєвським наближенням і вперше узагальнена послідовна калібрувальньо-інваріантна *ab initio* методика генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей в класі розглянутих релятивістських електрон-іонних зіткненнях у дебаєвській плазмі.

3. Вперше адаптовані нові в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризованість остову і ефекти

взаємного екранування або антиекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ, які базуються на використанні ефективних коректних обмінно-корреляційних функціоналів густини;

4. Вперше в рамках методу КЕД ТЗ з модельним дебаєвським наближенням узагальнена послідовна калібрувальна-інваріантна КЕД *ab initio* методика генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей в класі розглянутих завдань релятивістських електрон-іонних зіткнень.

5. Вперше в рамках релятивістської ТЗ з нульовим модельним дебаєвським наближенням розроблена ефективна методика для урахування станів континууму, що базується на релятивістській версії методу штурмовських розкладань.

6. Вперше в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень в дебаєвському наближенні отримані формули для перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, а також швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного розпаду в рамках релятивістського енергетичного підходу і калібрувальна-інваріантної КЕД ТЗ з *ab initio* ефективним потенціалом нульового наближення і ефективним урахуванням міжелектронних кореляційних ефектів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Glushkov AV (2008) Relativistic Quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems. Astroprint, Odessa.
2. Grant IP (2007) Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules, Theory and Computation. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, vol 40. Springer, Berlin, pp 587-626.
3. Dyall K. G. Introduction to relativistic quantum theory/ Dyall K. G., Faegri K.Jr.-Oxford, 2007.-590P.
4. Glushkov A.V. (2006) Relativistic and Correlation Effects in Spectra of Atomic Systems. Astroprint, Odessa.
5. Khetselius OYu (2011) Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems. Astroprint, Odessa
6. Khetselius O.Yu. (2008) Hyperfine structure of atomic spectra. Astroprint, Odessa.
7. Khetselius OYu (2009) Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. Int Journ Quant Chem 109:3330-3335.
8. Glushkov A.V., New approach to theoretical definition of ionization potentials for molecules on the basis of Green's function method//Journ.of Phys.Chem.-1992.-Vol.66.-P.2671-2677.
9. Glushkov A.V., Advanced relativistic energy approach to radiative decay processes in multielectron atoms and multicharged ions/ Glushkov A.V.// Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Progress in Theoretical Phys.and Chem.,Eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2012-Vol.26.-P.231-248.
10. Becke, A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. Phys. Rev. A 1988, 38, 3098–3100.
11. Migdal AB (1982) Theory of Finite Fermi Systems and Applications to Finite Nuclei. 2nd ed. Nauka, Moscow; (1967) Interscience, London.
12. Rho M (2001) Effective field theories, Landau-Migdal Fermi liquid theory, and effective chiral Lagrangians for nuclear matter. Phys. Atom. Nuclei. 64:637–651; [https:// doi.org/10.1134/1.1368222](https://doi.org/10.1134/1.1368222)
13. Furnstahl R J (2004) Next generation relativistic models. In: G A Lalazissis, P Ring P, Vretenar D (eds) Extended Density Functionals in Nuclear StructurePhysics, vol 641. Springer, Berlin, pp 1-30

14. Glushkov AV (2006) Relativistic and Correlation Effects in Spectra of Atomic Systems. Astroprint, Odessa
15. Khetselius O Yu (2019) Optimized relativistic many-body perturbation theory calculation of wavelengths and oscillator strengths for Li-like multicharged ions. *Adv Quant Chem*, vol 78. Elsevier, pp 223-251
<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.001>
16. Haberland H., Excited states in Chem.Phys/ H. Haberland, Y.T. Lee, P.E. Siska/V.2. Ed.J.W. Mc Gowan, *Adv.Chem.Phys.*-2011.-P.457-478.
17. Le Roy R.J., Determining equilibrium structures and potential energy functions for diatomic molecules./ Le Roy R.J.// In: *Equilibrium structures of molecules*, Eds. Demaison J., Csaszar A.G., eds. (London, Taylor & Francis).-2011.-Ch.6
18. Khetselius OYu (2008) Relativistic Calculating the Spectral Lines Hyperfine Structure Parameters for Heavy Ions. *AIP Conf Proc* 1058:363-365.
19. Khetselius OYu (2009) Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes. *Phys Scripta* 135:014023.
20. Glushkov AV (2012) Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions. In: Nishikawa K, Maruani J, Brandas E, Delgado-Barrio G, Piecuch P (eds) *Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 26. Springer, Dordrecht, pp 231-252.
21. Glushkov AV (2019) Multiphoton spectroscopy of atoms and nuclei in a laser field: relativistic energy approach and radiation atomic lines moments method *Adv Quant Chem*. vol 78. Elsevier, pp 253-285.
<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.004>
22. Kvasikova A.S., New generalized Simons-Parr-Finlan approach to construction of the diatomic potential curves and computing molecular constants/ Kvasikova A.S.//Abs. of the International Conference “Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy”.-Odessa (Ukraine).-2015.- P.60
23. Luh W.-T., Direct excitation studies of the diffuse bands of alkali metal dimmers/ Luh W.-T., Bahns J.T.//*J.Chem.Phys.*-1988.-Vol.88, N4.-P.2235-2244.

24. Aymar M., Calculation of accurate permanent dipole moments of the lowest $\Sigma+1,3\Sigma+1,3$ states of heteronuclear alkali dimers using extended basis sets/Aymar M., Dulieu O.//*J. Chem. Phys.*-2005.-Vol.122.-P.204302
25. Frauss M., Effective core potentials and accurate energy curves for Cs_2 and other alkali diatomics/Frauss M., Stevens W.J.//*J. Chem. Phys.*-1990-Vol.93.-P.4236-4242.
26. Smirnov A.D., Calculation of radiative parameters for electron transition $B1\Pi-X1\Sigma+$ in molecule of KRb/ Smirnov A.D. //Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.- 2015.-N6.-P.52-62.
27. Smirnov A.D., Calculation of spectroscopic constants for the electronic states $(2)1\Sigma+g$, $(1)1\Pi_u(B)$, $(1)1\Pi_g$, $(2)1\Pi_u(C)$ of the rubidium dimer/ Smirnov A.D.//Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.- 2010.-N4.-P.60-72.
28. Смирнов А.Д., Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул KRb и RbCs / Смирнов А.Д.// Журн. структ. химии. 2003. Т. 44. № 5. С. 46–50.
29. Смирнов А.Д., Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул CsK, CsLi и RbLi / Смирнов А.Д.// Журн. структ. химии. 2007. Т. 48. № 1. С. 15–20.
30. Jeung G., Theoretical study of the lowest states of CsH and Cs_2 / Jeung G., Spiegelmann F., Daudey J.P., Malrieu J.P., //*J. Phys. B: At. Mol. Phys.*-1983.-Vol.16.-P.2659-2668.
31. Ravaine B., Marked influence of the nature of the chemical bond on CP-violating signature in molecular ions HBr⁺ and HI⁺/ Ravaine B., Porsev S.G., Derevianko A.//*Phys. Rev. Lett.*-2005.-Vol.94.-P.013001
32. Велихов Е.П., Импульсные CO₂-лазеры и их применение для разделения изотопов/Велихов Е.П., Баранов В.Ю., Летохов В.С., Рябов Е.А., Старостин А.Н. - М.: Наука, 1983.-380С.;
33. Letokhov V.S., On possibility of isotopes separation by methods of resonant photoionization of atoms and photodissociation of molecules by laser radiation/Letokhov V.S.//Preprint of Physical Institute of USSR Academy of Sciences (FIAN, Moscow).-1969.-N1-69.-P.1-72;

34. Letokhov V.S., Laser separation of heavy lanthanides and actinides isotopes: Autoionization resonances and decay in electric field/Letokhov V.S., Ivanov, L.N., Glushkov, A.V. // Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences (Troitsk).-1992.-AS-N5.-P.1-18.
35. Глушков А.В., Оптимальные лазерные методы разделения изотопов и ядерных изомеров (физика процессов) /Глушков А.В.-Одесса: Астро-принт.-2013.-350С.
36. Гольданский В.И., О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер/Гольданский В.И., Летохов В.С.// ЖЭТФ.-1974.-Т.67.-С.513-516.
37. Baldwin G.G., Approaches to development of gamma ray lasers/Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I.// Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742;
38. Летохов В.С., Применение лазеров в ядерно-физических исследованиях / Летохов В.С.// Применение лазеров в атомной, ядерной и молекулярной физике. Ред. Прохоров А.М., Летохов В.С.-М.: Наука,1979.-С.413-426;
39. Advances in Quantum Chemistry: Current Trends, Eds. J. Sabin, E. Brandas, Wiley.-2011.-228P.; Handbook of Nuclear Chemistry, Eds.. A.Vértés, S.Nagy, Z.Klencsár, R.G.Lovas, F.Rösch.- Springer.-2010.
40. Летохов В.С., Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/Летохов В.С.-М.:Наука,1983.-408С.; Laser Specktroskopie.-Berlin: Verlag.- 1977.-320P.
41. Glushkov A.V, Nuclear quantum optics / Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S.// Preprint of Inst. of Spectroscopy, USSR Acad. Sci. (ISAN).-1991-AS4-P.1-16;
42. Letokhov V.S., On possibility of isotopes separation by methods of resonant photoionization of atoms and photodissociation of molecules by laser radiation/Letokhov V.S.//Preprint of Physical Institute of USSR Academy of Sciences (FIAN, Moscow).-1969.-N1-69.-P.1-72;
43. Letokhov V.S., Laser separation of heavy lanthanides and actinides isotopes: Autoionization resonances and decay in electric field/Letokhov V.S., Ivanov, L.N., Glushkov, A.V.// Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences (Troitsk).-1991.-AS-N5.-P.1-18.

44. Glushkov AV (2012) Spectroscopy of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Energy and spectral parameters J Phys: Conf Ser 397:012011.
45. Glushkov AV (2014) Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton resonances. J Phys: Conf Ser 548:012020.
46. Khetselius Oyu (2012) Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. J Phys: Conf Ser 397:012012.
47. Khetselius OYu (2012) Relativistic Energy Approach to Cooperative Electron- γ -Nuclear Processes: NEET Effect. In: Nishikawa K., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G., Piecuch P (eds) Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 26. Springer, Dordrecht, pp 217-229.
48. Glushkov A.V., New optimal schemes of the laser photo ionization technologies for cleaning the semiconductor materials and preparing the films of pure composition at atomic level/Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu.//Ukrainian Journ.Phys.-2008.-Vol.53, N10.-P.1017-1020
49. Glushkov A.V., Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors/ Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Lovett L., Svinarenko A.A.//Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109,N14.-P.
50. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Chernyakova Y.G.; Svinarenko, A.A. Cooperative laser-electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multi-charged ion in laser field. *Int. Journ. Quant. Chem.* 2004, 99, 889-893
51. Khetselius OYu (2010) Relativistic Hyperfine Structure Spectral Lines and Atomic Parity Non-conservation Effect in Heavy Atomic Systems within QED Theory. AIP Conf. Proceedings, 1290(1):29-33.
52. Glushkov AV (1992) Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions. Journ of Applied Spectroscopy 56(1):5-9.
53. Glushkov AV (1990) Relativistic polarization potential of a many-electron atom. Soviet Phys Journ 33(1):1-4.
54. Glushkov AV (1988) True effective molecular valency hamiltonian in a logical semiempirical theory. Journal of Structural Chem 29(4):495-501.

55. Glushkov AV (1990) Correction for exchange and correlation effects in multielectron system theory. *Journ of Struct Chem* 31(4):529-532.
56. Glushkov AV (1994). New form of effective potential to calculate polarization effects of the π -electronic states of organic molecules. *Journ. Struct. Chem.*, 34(5):659–665; doi:10.1007/bf00753565
57. Amusia M Y (1990) *Atomic Photoeffect*, Springer, New York.
58. Glushkov, A.V. Relativistic multiconfiguration time-dependent self-consistent-field theory for molecules. *Sov. Phys. Journal*. 1991, 34(10), 871-876.
59. Glushkov, A.V. Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions. *In Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*; Nishikawa, K., Maruani, J., Brändas, E., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., Eds.; Springer: Dordrecht, 2012; Vol. 26, pp 231–252.
60. Lichtenberg, A. J. ; Lieberman, M. A. *Regular and Stochastic Motion*; Springer-Verlag: City, 1983.
61. Arnold, V.I. *Geometrical Methods in the Theory of Ordinary Differential Equations. Number 250 in A Series of Comprehensive Studies in Mathematics*; Springer-Verlag: New York, 1988.
62. Devaney, E.L. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Addison-Wesley: Redwood City, 1989
63. Wiggins, S. *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*; Springer: Berlin, 1990.
64. Blümel, R.; Reinhardt, W.P. *Chaos in Atomic Physics*; Cambridge Univ. Press: Cambridge, 1997.
65. Haake, F.; *Quantum Signatures of Chaos. Springer Series in Synergetics*. Springer-Verlag: Berlin, 2001.
66. Anishchenko, V.S. *Nonlinear dynamics of chaotic and stochastic systems*. Springer: Berlin, 2002.
67. Chirikov, B.V. A universal instability of many-dimensional oscillator systems. *Phys. Rep.* 1979, 52(5), 263-379.
68. Glushkov, A.V. Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton resonances. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2014, 548, 012020.

69. Cohen, D. Chaos and energy spreading for time-dependent hamiltonians, and the various regimes in the theory of quantum dissipation. *Annal. Phys.* 2000, 283, 175–231.
70. Nonnenmacher, S. Anatomy of quantum chaotic eigenstates. *Seminaire Poincare.* 2010, XIV, 177-220.
71. Glushkov, A.V. Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field. *In Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*; Hotokka, M., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Eds.; Springer: Cham, 2013; Vol. 27, pp 161–177.
72. Glushkov A.V. (2012) Methods of a chaos theory. Odessa; Astroprint
73. Takens, F. Detecting strange attractors in turbulence *In Dynamical Systems and Turbulence, Lecture Notes in Mathematics*; Springer: Berlin, 1981; Vol 898, pp 366–381.
74. R. Mañé, On the dimensions of the compact invariant sets of certain non-linear maps *In Dynamical Systems and Turbulence, Lecture Notes in Mathematics*; Springer: Berlin, 1981; Vol 898, pp 230–242.
75. Gallager, R. *Information theory and reliable communication.* Wiley: N.-Y., 1986.
76. Kenneth, F. *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*; John Wiley & Sons: Chichester, 2003.
77. Zaslavsky, G. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. *Phys. Rep.* 2002, 371, 461-580; Loskutov, A. Fascination of chaos. *Phys. Uspekhi.* 2010, 53(12), 1257-1280.
78. Zaslavsky, G. M. *Hamiltonian Chaos and Fractional Dynamics*; Oxford Univ. Press: Oxford, 2005.
79. Glushkov, A.V. *Methods of a Chaos Theory.* OSENU: Odessa, 2012.
80. Glushkov A.V., Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P.//In: Coherence and Ultrashort Pulsed Emission, Ed. Duarte F. J. (Intech, Vienna).-2011.-P.159-186.
81. Prepelitsa G.P., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: New approaches, Uniformity and Charm of chaos/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Sensors Electronics and Microsystems Technologies.-2014.-Vol.11,N4.-P.43-57.

82. Glushkov A.V., Non-linear prediction method in short-range forecast of atmospheric pollutants: low-dimensional chaos/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Yu.Ya., Prepelitsa G.P., Solyanikova E.P., Serga E.N.// *Dynamical Systems - Theory and Applications*.-2011.-Vol.2.-P.39-44. LIF111 (6p).
83. Glushkov A.V., Physics of the laser-photoionization atomic processes in the isotopes and gases separator devices: new optimal schemes/ Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P., Ambrosov S.V., Bakunina E.V., Loboda A.V.//*Sensors Electronics and Microsystems Techn.*-2011.-Vol.2(8),N1.-P.27-35.
84. Glushkov A.V. Sensing the stochastic laser pulse structure and chaotic, photon-correlation effects in the non-linear multi-photon atomic dynamics in laser and DC electric field/ Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A.// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2004.- №2.-P.8-14.
85. Khetselius, O.Yu. Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method *In Dynamical Systems Applications*; Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J., Eds.; Wyd. Politech. Łódź.: Łódź, 2013; Vol T2, pp 145-152.
86. Khetselius, O.Yu. Relativistic calculating the hyperfine structure parameters for heavy-elements and laser detecting the isotopes and nuclear reaction products. *Phys. Scripta*. 2009, T135, 014023.
87. Khetselius, O.Yu. Atomic parity non-conservation effect in heavy atoms and observing P and PT violation using NMR shift in a laser beam: To precise theory. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2009, 194, 022009.
88. Glushkov, A.V. Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions. *Journ. of Applied Spectroscopy*. 1992, 56(1), 5-9.
89. Khetselius, O.Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. Journ.Quant.Chem.* 2009, 109, 3330-3335.
90. Glushkov, A.V. *Atom in an electromagnetic field*. KNT: Kiev, 2005.
91. Schreiber, T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods. *Phys.Rep.* 1999, 308, 1-64.
92. Mammino L (2019) Complexes of Hyperquinones A and B with a Cu²⁺ Ion: A DFT Study. *Adv. Quant. Chem.* 78: 83–108.

93. Le Roy RJ (2011) Determining equilibrium structures and potential energy functions for diatomic molecules. In: Demaison J, Csaszar AG (eds) *Equilibrium structures of molecules*, London, Taylor & Francis, Ch.6.
94. Coxon JA (1989) Application of an improved fitting procedure for diatomic internuclear potentials and Born–Oppenheimer breakdown functions: the B1 Σ -X1 Σ system of H³⁵Cl , H³⁷Cl. *J.Mol.Spectr.* 133:96-115
- Mammino L (2020) Complexes of Furonequinone B with a Cu²⁺ Ion. A DFT Study In: Mammino L, Ceresoli D, Maruani J, Brändas E (eds) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology: Selected Proceedings of QSCP-XXIII* (Kruger Park, South Africa, September 2018). Series: *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol 32. Springer, Cham, pp 159-182
95. Ignatenko A.V. Probabilities of the radiative transitions between stark sublevels in spectrum of atom in an DC electric field: new approach *Photoelectronics*.-2007.-N16.-P.71-74.
96. Ignatenko A.V., Quantization of quasistationary states of Schrödinger equation for two-centre systems in DC electric field. *Proc. of International Conference “Geometry in Odessa – 2012”*.-Odessa (Ukraine).-2012.-P.91
97. Ignatenko A.V., Numerical modelling the chaotic ionization of the Rydberg atoms in an electromagnetic field. *Proc. of 5th Chaotic Modeling and Simulation International Conference (CHAOS 2012)*.-Athens (Greece). 2012. P.56-57.
98. Ignatenko A.V., Microwave ionization of lithium Rydberg atoms: Link of quasidiscrete states with continuum. *Photoelectronics*. 2011. Vol.20. P.95-98.
99. Ignatenko A.V. Photoelectron Spectroscopy of Diatomic Molecules: Optimized Green’s Functions and Density Functional Approach. Abs. of the 24 International Workshop “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology QSCP –XXIV” (Odessa, Ukraine). 2019. P.85.
100. Turner D., *Molecular Photoelectron Spectroscopy*/Turner D., Baker C., Baker A., Brunrile C.-New York: Wiley.- 1997.-540P.

101. Huber, K.P.; Herzberg, G. *Molecular spectra and molecular structure. IV. Constants of Diatomic Molecules*; Van Nostrand Reinhold Co.: New York, 1979.
102. Bartlett RJ and Musiał MN (2007) Coupled-cluster theory in quantum chemistry. *Rev. Mod. Phys.* 79:291-328.
103. Dahlen NE and van Leeuwen R (2005) Self-consistent solution of the Dyson equation for atoms and molecules within a conserving approximation. *J. Chem. Phys.* 122:164102; <https://doi.org/10.1063/1.1884965>
104. Morrison RC and Liu G (1992) Extended Koopmans' Theorem: Approximate Ionization Energies from MCSCF Wave Functions. *J. Comput. Chem.* 13:1004-1010.
105. Hohenberg, P.; Kohn, W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 1964, 136, B864– B871.
106. Kohn, W.; Sham, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 1965, 140, A1133–A1138.
107. Pyykkö P and Desclaux J (1976) Dirac–Fock one-centre calculations. The molecules BH, AlH, GaH, InH and TlH. *Chem. Phys. Lett.* 42:545–549.
108. Laughlin C, Victor GA (1989) Model-Potential Methods. *Adv Atom Mol Phys* 25:163.
109. Feller D, Davidson ER (1989) An approximation to frozen natural orbitals through the use of the Hartree-Fock exchange potential. *J Chem Phys* 74:3977.
110. Dietz K, Heß BA (1989) Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics. *Phys Scripta* 39:682-688.
111. Sapirstein J, Cheng KT (2005) Calculation of radiative corrections to E1 matrix elements in the neutral alkali metals. *Phys Rev A* 71:022503
112. Glushkov AV and Ivanov LN (1992) Shift and deformation of radiation atomic lines in the laser emission field. Multiphoton processes. Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences. ISAN, Moscow-Troitsk, AS N3
113. Ivanova EP, Glushkov AV (1986) Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences. *J Quant Spectr Rad Transfer* 36:127-145

114. Glushkov AV, Ivanov LN (1992) Radiation decay of atomic states: atomic residue polarization and gauge noninvariant contributions. *Phys Lett A* 170:33-36.
115. Glushkov AV, Ivanov LN (1993) DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach. *J Phys B: At Mol Opt Phys* 26:L379-386
116. Kotochigova S., Tiesinga E., Ab initio relativistic calculation of the RbCs molecule (the relativistic configuration-interaction valence-bond method) // *J. Chem. Phys.*-2005.-Vol.123.-P.174304.
117. Ivanov LN and Letokhov VS (1975) Spectrum of electron-nuclear gamma transitions of a nucleus in an atom. *JETP* 68:1748-1760.
118. Letokhov VS, Minogin V (1976) Spectrum of gamma transitions of a nucleus in a diatomic molecule. *JETP* 70:794-804.
119. Letokhov VS, Minogin V (1975) Spectrum of gamma transitions of a nucleus in symmetric polyatomic molecule. *JETP* 69:1569-1581.
120. Kaplan IG, Rodimova OV (1978) Intermolecular interactions. *UFN* 126:403-448.
121. Martin C.; Gutzwiller, G. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*; Springer-Verlag: New York, 1990.
122. Mitchell, G.E.; Bowman, J.D.; Weidenmuller, H.A.L. Parity violation in the compound nucleus. *Rev. Mod. Phys.* 1999 , 71, 445-465.
123. Friedrich, H.; Wintgen, D. The hydrogen atom in a uniform magnetic field - an example of chaos. *Phys. Rep.* 1989, 183, 37-84
124. Aurich, R.; Steiner, F. Statistical properties of highly excited quantum eigenstates of a strongly chaotic system. *Physica D.* 1993, 64, 185
125. Benvenuto, F.; Casati, G.; Shepelyansky, D.L. Rydberg Stabilization of atoms in strong fields: “magic” mountain in chaotic sea. *Z.Phys.B.* 1994, 94, 481-486.
126. Berman, G.P.; Kolovsky, A.R. Quantum chaos in interactions of multilevel quantum systems with a coherent radiation field. *Sov. Phys. Uspekhi.* 1992, 35(4), 303-348.
127. Berman, G.P. ; Kolovskii, A. Quantum chaos in a diatomic molecule interacting with a resonant field. *JETP.* 1989, 95, 1552-1561
128. Chelkowsi, S.; Bandrauk A.D. Harmonic and nonharmonic frequency generation by molecular vibrations strongly driven by laser radiation. *Phys. Rev. A.* 1991, 44, 788-796.
129. López, G. V.; Mercado, A. P. Classical Chaos on Double Nonlinear Resonances in Diatomic Molecules. *J. Mod. Phys.* 2015, 6, 496-509.

130. Lombardi, M.; Matzkin, A. Dynamical entanglement and chaos: The case of Rydberg molecules. *Phys. Rev. A.* 2006, *73*, 062335.
131. Dietrich P.; Corkum, P.B. Ionization and dissociation of diatomic molecules in intense infrared laser fields. *J. Chem. Phys.* 1991, *97*, 3187-3196.
132. Gottwald, G.A. ; Melbourne, I. Testing for chaos in deterministic systems with noise. *Physica D.* 2005, *212*, 100-110.
133. Grassberger, P. ; Procaccia, I. Measuring the strangeness of strange attractors. *Physica D.* 1983, *9*, 189-208.
134. Fraser, A.; Swinney, H. Independent coordinates for strange attractors from mutual information. *Phys Rev A.* 1986, *33*, 1134-1140.
135. Sano, M.; Y. Sawada, Y. Measurement of the Lyapunov spectrum from chaotic time series. *Phys Rev.Lett.* 1995, *55*, 1082-1085.
136. Coxon JA, Hajigeorgiou PG (2015) Improved direct potential fit analyses for the ground electronic states of the hydrogen halides: HF/DF/TF, HCl/DCl/TCl, HBr/DBr/TBr and HI/DI/II. *J. Quant. Spectr. Rad.Transfer.* 151:133-154.
137. Coxon JA, Hajigeorgiou PG (2000) The radial Hamiltonians for the $X^1\Sigma$ and $B^1\Sigma$ states of HCl. *J. Mol. Spectr.* 203:49–64.
138. Coxon JA, Hajigeorgiou P.G (1989) The ultraviolet spectrum of DF: rotational analysis of the $B^1\Sigma-X^1\Sigma$ emission band system. *J.Mol.Spectr.* 133:45–60.
139. Le Roy RJ, Henderson RDE (2007) A new potential function form incorporating extended long-range behaviour: application to ground-state Ca_2 . *Mol Phys.* 105:663–677.
140. Coxon JA, Hajigeorgiou PG (2006) The $B^1\Sigma$ and $X^1\Sigma$ electronic states of hydrogen fluoride: a direct potential fit analysis. *J.Phys.Chem.A.* 110:6261–6270.
141. Herman RM, Ogilvie JF (1998) An effective Hamiltonian to treat adiabatic and nonadiabatic effects in the rotational and vibrational spectra of diatomic molecules. *Adv. Chem. Phys.* 103:187–215.
142. Aymar M, Dulieu O (2005) Calculation of accurate permanent dipole moments of the lowest $\Sigma+1,3\Sigma+1,3$ states of heteronuclear alkali dimers using extended basis sets. *J. Chem. Phys.* 122:P204302.
143. Ignatenko A.V., Kulakli T. A New approach to calculating the characteristics of radiation transitions in spectra of heavy diatomic systems Abs. of the 24 International Workshop “Quantum Systems in

- Chemistry, Physics and Biology QSCP –XXIV” (Odessa, Ukraine). 2019. P. 108
144. Glushkov A., Ignatenko A.V. New Spectroscopy of Cooperative Laser Electron- γ -nuclear processes in diatomic and multiatomic cryogenic molecules. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS). Dublin (Ireland). 2018. P. 130 (We.P.25).
 145. Ignatenko A.V., Kvasikova A.S., New quantum-mechanical approach to spectral characteristics for diatomic molecules. Abs. of the 24 International Workshop “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology QSCP –XXIV” (Odessa, Ukraine). 2019. P.103
 146. Ignatenko A.V., Lavrenko A.P., Spectroscopic factors of diatomic molecules: Optimized Green’s functions and density functional method. Photoelectronics. 2019. Vol.28. P.83-89.
 147. Malinovskaya SV, Glushkov AV (1992) Calculation of the spectra of potassium-like multicharged ions. Russian Phys Journal 35(11):999-1004.
 148. Szilard L and Chalmers TA (1934) Chemical Separation of the Radioactive Element from its Bombarded Isotope in the Fermi Effect. Nature 134:462
 149. Köppel H, Domcke W and Cederbaum LS (1984) Green’s function method in quantum chemistry. Adv. Chem. Phys. 57:59-132.
 150. Bartlett R J, Bellum J C and Brändas E J (2009) The treatment of correlation effects in second - order properties. Int. J.Quant.Chem. S7:449 – 462
 151. Rittby M, Elander N and Brändas E (1984) Exterior complex scaling - a calculation of shape resonances in the $A^1\Pi$ state of CH^+ using a realistic numeric potential. Chem. Phys. 87(1):55-62.
 152. Glushkov AV, Ivanov LN., Ivanova EP (1986) Radiation decay of atomic states. Generalized energy approach. In: Autoionization Phenomena in Atoms. Moscow State Univ.
 153. Stan A, Dahlen NE and van Leeuwen R (2009) Levels of self-consistency in the GWGW approximation. J.Chem.Phys. 130: 114105.
 154. Johnson W, Sapistein J, Blundell S (1988) Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines. PhysRevA37:307-315.
 155. Rafac R, Tanner C, Livingston A et al (1994) Precision lifetime measurements of $6p^2P_{1/2,3/2}$ states in atomic cesium. Phys. Rev. A. 50:R1976-1979.

156. Safronova UI, Johnson W and Derevianko A (1999) Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms. *Phys. Rev. A.* 60:4476-4486.
157. Glushkov AV, Ivanov LN, Letokhov VS (1991) Nuclear quantum optics. Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences. ISAN, Moscow-Troitsk, AS-4
158. Glushkov AV, Malinovskaya SV, Filatov VV (1989) S-Matrix formalism calculation of atomic transition probabilities with inclusion of polarization effects. *Sov Phys Journal* 32(12):1010-1014
159. Kvasikova A.S., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Ponomarenko E.L.//New quantum approach to determination of the molecular spectral constants and probabilities for cooperative vibration-rotation-nuclear transitions in spectra of diatomics and the hadronic molecules/ *Photoelectronics.*-2016.-Vol.25.-P.101-107.
160. Derevianko A., Babb J., Dalgarno A., High-precision calculations of van der Waals coefficients for heteronuclear alkali-metal dimers/ Derevianko A., Babb J., Dalgarno A. // *Phys.Rev.A.*-2001.-Vol.63.-P.052704; Fedorov A., Accurate potential energy, dipole moment curves, and lifetimes of vibrational states of heteronuclear alkali dimers/ Fedorov A., Derevianko A., Varganov S.// *Communication.*-2016.-38P
161. Kotochigova S., Julienne P.S., Tiesinga E., Ab initio calculation of the KRb dipole moments // *Phys. Rev. A.*-2003.-Vol.68.-P.022501.
162. Letokhov VS, Minogin VG and Pavlik BD (1976) Cooling and trapping of atoms and molecules by resonant laser-field. *Optics Comm.* 19:72-76
163. Malinovskaya SV, Glushkov AV, Khetselius OY (2008) New Laser-Electron Nuclear Effects in the Nuclear γ Transition Spectra in Atomic and Molecular Systems. In: Wilson S, Grout P, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P (eds) *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol 18. Springer, Dordrecht, pp 525-541.
164. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Malinovskaya, S.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems – new trend in quantum optics. *Europ. Phys. Journ. ST* 2008, 160, 195-204.

165. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA (2012) Relativistic theory of cooperative muon- γ -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. In: Hoggan P, Brändas E, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P (eds) *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Series: Progress in Theoretical Chem. and Phys., vol 22. Springer, Dordrecht, pp 51-68.
166. Glushkov AV, Khetselius OYu, Lovett L (2009) Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Bond Effect on the β -Decay Parameters. In: Piecuch P, Maruani J, Delgado-Barrio G, Wilson S (eds) *Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures*. Series: Progress in Theor. Chem. and Phys., vol 20. Springer, Dordrecht, pp 125-152.
167. Simons G, Parr RG, Finlan JM (1973) New alternative to the Dunham potential for diatomic molecules. *J.Chem.Phys.* 59:3229-3242.
168. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA (2013) Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanide atoms. *Phys Scr T153:014029*.
169. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Svinarenko, A.A. Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanide atoms. *Phys. Scripta*. 2013, *T153*, 014029.
170. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Svinarenko, A.A. Relativistic theory of cooperative muon- γ -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. In *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*; Hoggan, P., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P. Eds.; Springer: Dordrecht, 2012; Vol. 22, pp 51–68.
171. Berman, G.P.; Bulgakov, E.N.; Holm, D.D. Nonlinear resonance and dynamical chaos in a diatomic molecule driven by a resonant IR field. *Phys. Rev. A* 1995, *52*, 3074-3080.
172. Zhang, C.; Katsouleas, T.; Joshi, C. Harmonic frequency generation and chaos in laser driven molecular vibrations. In *Proc. of Shortwavelength Physics with Intense Laser Pulses*, San-Diego, CA, March 29-31, 1993; Bederson, B., Walther, H., Eds.; Acad. Press: San Diego, 1993, pp 21-28.
173. Arango, C.A.; Kennerly, W.W.; Ezra, G.S. Classical and quantum mechanics of diatomic molecules in tilted fields. *J. Chem. Phys.* 2005, *122*, 184303.

174. Kennel, M.; Brown, R.; Abarbanel, H. Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction. *Phys. Rev. A.* 1992, 45, 3403-3412.
175. Khetselius, O.Yu.; Brusentseva, S.; Tkach, T.B. Studying interaction dynamics of chaotic systems within non-linear prediction method: Application to neurophysiology *In Dynamical Systems Applications*; Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J., Eds.; Wyd. Politech. Łódź.: Łódź, 2013; Vol T2, pp 251-259.
176. Glushkov, A.V.; Bunyakova, Yu.Ya.; Zaichko, P.A. Geometry of Chaos: Consistent combined approach to treating chaotic dynamics atmospheric pollutants and its forecasting. *Proc. Intern. Geometry Center.* 2013, 6(3),6-14.
177. Bauschlicher, C.W.; Langhoff, S.R.; Komornicki, A. The calculation of the dipole moments of NiH, TiO, and FeO. *Theoret. Chim. Acta.* 1990, 77, 263-279.
178. Bodo E, Zhang P, Dalgarno A (2008) Ultra-cold ion–atom collisions: near resonant charge exchange. *New Journal of Physics.* 10:P033024.
179. Houfek K, Cizek M, Horachek J (2002) Calculation of rate constants for dissociative attachment of low-energy electrons to hydrogen halides HCl, HBr, HI and deuterated analogs. *Phys. Rev.A.* 66:P062702.
180. Ghanmi C, Farjallah M, Berriche H (2012) Theoretical study of low-lying electronic states of LiRb⁺ molecular ion: Structure, spectroscopy, transition dipole moments. *Int. Journ. Quant. Chem.* 112:2403–2410.
181. Korchevsky D.A., Ignatenko A.V., Shpinareva I.M. Sensing stochasticity of atomic systems by analysis of recurrence spectra in an crossed DC magnetic and AC electric fields. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2005.-N1.-P.21-26.*
182. Ambrosov S., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V. Wannier-Mott exciton and H, Rb atom in DC electric field: Stark effect/ *Photoelectronics.-2008.-N17.-P.84-87.*
183. Ignatenko A.V., Prepelitsa G.P., Kozlovskaya V.P. Multi-particle theory of photo-effect in Xe. Multi-photon absorption in molecules of O₃/ // *Photoelectronics.-2005.- N14.-P.32-34.*
184. *Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Kuznetsova A.V., et al, Nonlinear Dynamics of Atomic and Molecular Systems in an Electromagnetic Field: Deterministic Chaos and Strange Attractors; In: Awrejcewicz J. (Ed.) *Perspectives in Dynamical Systems II: Mathematical and Numerical*

- Approaches Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Cham: Springer. 2021. Vol.363. Ch.11. P.11-120; [Scopus Issue];
185. Nikola L.V., Ignatenko A.V., Shakhman A.N., Relativistic theory of the auger (autoionization) decay of excited states in spectrum of multicharged ion. Photoelectronics.-2010. Vol. 19. P.61-64.
 186. Глушков О.В., Ігнатенко Г.В., Квасикова Г.С., Молекулярна оптика та спектроскопія Р.6 Одеса: ОДЕКУ, 2020.
 187. Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Buyadzhi A. Spectroscopy of cooperative laser electron- γ -nuclear processes in diatomic and multiatomic molecules: New spectral effects and data for cryogenic molecules. Abs. of the 31st Int. Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. (MO-057) P.655.
 188. Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Glushkov A.V. Molecular Polarizabilities and Scattering of a Light on Metastable Levels of Diatomic Molecules. Abs. of 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII). Kruger Park (South Africa). 2018. P.62.
 189. Glushkov A.V., Kuznetsova A.A., Ignatenko A.V. Cooperative laser electron-gamma-nuclear phenomena in dynamics and spectroscopy of molecules: Advanced Computational Code. Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics. Paris (France). 2017. P.209.
 190. Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Chernyakova Yu. G., Advanced computational code to “shake-up” and NEET effects in laser electron-gamma-nuclear spectroscopy of atoms and ions Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics.-Paris (France). 2017. P.211-212
 191. Bunyakova Yu.Ya., Prepelitsa G.P., Ignatenko A.V. New environmental sensors on basis of non-linear effects: IR laser effect on energy exchange in atmospheric gases. Proc. of 4th International Scientific & Tech. Conf. “Sensor Electronics & Microsystem Technologies. Odessa (Ukraine). 2010. P.172.
 192. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA, Buyadzhi VV (2015) Methods of computational mathematics and mathematical physics. P.1. TES, Odessa

193. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Sukharev, D.E.; Khetselius, O.Yu.; Lovett, L. Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi - model nuclear potential. *Int. Journ.Quant.Chem.* 2009, *109*, 1717-1727.
194. Glushkov AV, Svinarenko AA, Khetselius OY, Buyadzhi VV, Florko TA, Shakhman AN (2015) Relativistic quantum chemistry: An advanced approach to the construction of the Green function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential. In: Nascimento M., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G. (eds) *Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol 29. Springer, Cham, pp197-217.
195. Oleynichenko AV, Zaitsevskii A, Skripnikov LV and Eliav E (2020) Relativistic Fock Space Coupled Cluster Method for Many-Electron Systems: Non-Perturbative Account for Connected Triple Excitations. *Symmetry*. 12: 1101; doi:10.3390/sym12071101
196. Glushkov, A.V.; Malinovskii, A.V.; Efimov, V.A.; Kivganov, A.F.; Khokhlov, V.N.; Vitavetskaya, L.A.; Borovskaya, G.A. Calculation of alkaline metal dimers in terms of model perturbation theory. *J. Struct. Chem.* 1988, *39*(2), 179-185.
197. Glushkov, A.V.; Efimov, V.A.; Gopchenko, E.D.; Dan'kov, S.V.; Polishchuk, V.N.; Goloshchak, O.P. Calculation of spectroscopic characteristics of alkali-metal dimers on the basis of a model perturbation theory. *Optika i Spekr.* 1998, *84*(5), 747.
198. Glushkov AV, Malinovskaya SV, Sukharev DE, Khetselius OYu, Lovett L (2009) Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi-model nuclear potential. *IntJourn Quant Chem* *109*:1717-1727.
199. Svinarenko AA, Glushkov AV, Khetselius OYu, Ternovsky VB, Dubrovskaya YuV, Kuznetsova AA, Buyadzhi VV (2017) Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonance. In: Jose EA (ed) *Rare Earth Element*. InTech, Orjuela, pp 83-104. <https://doi.org/10.5772/intechopen.69314>.
200. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA, Buyadzhi VV, Ternovsky VB, Kuznetsova AA, Bashkarev PG (2017) Relativistic Perturbation Theory Formalism to Computing Spectra and Radiation Characteristics: Application to Heavy Elements. In: Dimo I. Uzunov (ed) *Recent Studies*

- in Perturbation Theory, InTech, pp 131-150 (DOI: 10.5772/intechopen.69102 .
201. Bekov GI, Vidolova-Angelova E, Ivanov LN, Letokhov VS, Mishin V (1981) Laser spectroscopy of narrow doubly excited autoionizing states of ytterbium atoms. *JETP* 80(3):866.
 202. Glushkov AV, Malinovskaya SV, Shpinareva IM, Prepelitsa GP (2006) Consistent quantum approach to new laser-electron-nuclear effects in diatomic molecules. *J Phys: Conf Ser* 35:420-424.
 203. Ivanova EP, Ivanov LN, Glushkov AV, Kramida A (1985) High Order Corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the Model Zeroth Approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions. *Phys Scripta* 32:513-522.
 204. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Malinovskaya, S.V. Spectroscopy of cooperative laser–electron nuclear effects in multiatomic molecules. *Molec. Phys.* 2008, *106*, 1257-1260.
 205. Malinovskaya, S.V.; Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Svinarenko, A.A.; Mischenko, E.V.; Florcko, T.A. Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas. *Int. J. Quant. Chem.* 2009, *109*(4), 3325-3329.
 206. Glushkov AV, Khetselius OYu, Loboda AV, Svinarenko AA (2008) QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization In: Wilson S, Grout P, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P (eds) *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 18. Springer, Dordrecht, pp 543-560.
 207. Dubrovskaya YuV, Khetselius OYu, Vitavetskaya LA, Ternovsky VB, Serga IN (2019) Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems with Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects. *Adv Quantum Chem.* Elsevier. 78:193-222. <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.003>
 208. Buyadzhi VV, Zaichko P A, Gurskaya M Y, Kuznetsova AA, Ponomarenko EL, Ternovsky VB (2017) Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field. *J Phys: Conf Ser* 810:012047.
 209. Svinarenko AA, Khetselius OYu, Buyadzhi VV, Florcko TA, Zaichko PA, Ponomarenko EL (2014) Spectroscopy of Rydberg atoms in a Black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization. *J Phys:*

210. Khetselius O Yu, Glushkov A V, Gurskaya M Yu, Kuznetsova A A, Dubrovskaya Yu V, Serga I N and Vitavetskaya L A (2017) Computational modelling parity nonconservation and electroweak interaction effects in heavy atomic systems within the nuclear-relativistic many-body perturbation theory. *J. Phys.: Conf. Ser.* 905:012029
211. Khetselius O Yu, Lopatkin Yu M, Dubrovskaya Yu V, Svinarenko A A (2010) Sensing hyperfine-structure, electroweak interaction and parity non-conservation effect in heavy atoms and nuclei: New nuclear-QED approach. *Sensor Electr. And Microsyst. Techn.* 7(2):11-19.
212. Glushkov AV, Ambrosov SV, Lobod A.V, Gurnitskaya EP, Prepelitsa GP (2005) Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross sections and strengths: Ne-like ions. *Int J Quantum Chem* 104:562-569.
213. Glushkov AV, Butenko Yu V, Serbov NG, Ambrosov SV, Orlova VE, Orlov SV, Balan AK, Dormostuchenko GM (1996) Calculation of the oscillator strengths in Fr-like multiply charged ions. *Journ of Applied Spectrosc* 63(1):28-30.
214. Glushkov AV, Kondratenko PA, Lepikh Ya I, Fedchuk AP, Svinarenko A A, Lovett L (2009) Electrodynamical and quantum-chemical approaches to modelling the electrochemical ancatalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors. *Int Journ Quant Chem* 109(14):3473-3481.
215. Malinovskaya SV, Glushkov AV, Dubrovskaya Yu V, Vitavetskaya LA (2006) Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei during negative muon capture. In: Julien J-P, Maruani J, Mayou D, Wilson S, Delgado-Barion G (eds) *Recent Advances in Theor. Phys. and Chem. Systems. Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol 15. Springer, Dordrecht, pp 301-307
216. Mansarliysky V.F., Ternovsky E.V., Ignatenko A.V., Ponomarenko E.L., Optimized relativistic Dirac-Fock approach to calculating the hyperfine line shift and broadening for heavy atoms in the buffer gas. *Photoelectronics*. 2017. Vol.26. P.46-55
- [1]
217. Glushkov AV, Efimov VA, Gopchenko ED, Dan'kov SV, Polishchyuk VN, Goloshchak OP (1998) Calculation of spectroscopic characteristics 4 of alkali-metal dimers on the basis of a model perturbation theory. *Optics*

- and Spectr 84(5):670-678.
218. Glushkov AV, Khetselius OYu, Kruglyak YuA, Ternovsky VB (2014) *Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory*. P.3. OSENU(TEC), Odessa
 - a. 6 part
 219. Cvitanović, P.; Artuso, R.; Mainieri, R.; Tanner, G.; Vattay, G. *Chaos: Classical and Quantum*. Copenhagen: Niels Bohr Institute, 2007.
 220. Delandet, D.; Taylor, K.T.; Halley, M.H.; van der Veldts, T.; Vassens, W.; Hogervorst, W. Scaled energy spectra of non-hydrogenic Rydberg atoms in a magnetic field. *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1994, 27, 2771-2784.
 221. Zhai, Liang-Jun; Zheng, Yu-Jun; Ding, Shi-Liang. Dynamics of vibrational chaos and entanglement in triatomic molecules: Lie algebraic model. *Chin. Phys. B.* 2012, 21(7), 070503.
 222. Farantos, S.C.; Schinke, R.; Guo, H.; Joyeux, M. Energy localization in molecules, bifurcation phenomena, and their spectroscopic signatures: The Global View. *Chem. Rev.* 2009, 109, 4248–4271
 223. Icarrea, M.; Salas, J.P.; Gonzalez-Ferez, R.; Schmelcher, P. Classical study of the rovibrational dynamics of a polar diatomic molecule in static electric fields. *Phys. Lett. A* 2010, 374, 457–465.
 224. Maier, T.; Kadau, H.; Schmitt, M.; Wenzel, M.; Ferrier-Barbut, I.; Pfau, T.; Frisch, A.; Baier, S.; Aikawa, K.; Chomaz, L.; Mark, M.J.; Ferlaino, F.; Makrides, C.; Tiesinga, E.; Petrov, A.; Kotochigova, S.; Emergence of chaotic scattering in ultracold Er and Dy. *Phys. Rev. X.* 2015, 5, 041029.
 225. Guruparan S., Ravindran Durai Nayagam, B.; Selvaraj, S.; Ravichandran, V.; Chinnathambi, V. Bifurcation structures of the classical Morse oscillator under the excitation of different periodic forces. *J. Adv. Chem. Sci.* 2016, 2(1), 188–191
 226. Deng, Shan-Hong; Gao, Song; Li, Yong-Ping; Xu, Xue-You; Lin, Sheng-Lu. The fractal structure in the ionization dynamics of Rydberg lithium atoms in a static electric field. *Chin. Phys. B.* 2010, 19, No. 4, 040511.
 227. Chang, Feng; Feng, Yu-Ling; Yao, Zhi-Hai; Fan, Jian; Song, Yuan-Chao; Zhao, Yu-Zhu. Experimental investigation on chaos generation in erbium-doped fiber single-ring lasers, *Chin. Phys. B.* 2013, 21, 100504.
 228. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Svinarenko, A.A.; Serbov, N.G. The sea and ocean 3D acoustic waveguide: rays dynamics and chaos

- phenomena, *J. Acoust. Soc. Amer.* 2008, 123(5), 3625.
229. Bunyakova, Yu.Ya.; Glushkov, A.V.; Fedchuk, A.P.; Serbov, N.G.; Svinarenko, A.A.; Tsenenko, I.A. Sensing non-linear chaotic features in dynamics of system of coupled autogenerators: multifractal analysis, *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2007, Issue 1, 14-17.
230. Abarbanel, H.; Brown, R.; Sidorowich, J; Tsimring, L. The analysis of observed chaotic data in physical systems. *Rev. Mod. Phys.* 1993, 65, 1331- 1392.
231. Packard, N.; Crutchfield, J; Farmer, J.; Shaw, R. Geometry from a time series *Phys. Rev. Lett.* 1988, 45, 712-716.
232. Theiler, J.; Eubank, S.; Longtin, A.; Galdrikian, B.; Farmer, J. Testing for nonlinearity in time series: The method of surrogate data. *Physica D.* 1992, 58, 77-94.
233. Kuznetsov, A.P.; Kuznetsov, S.P.; Ryskin, N.N.; Isaeva, O.B. *Nonlinearity: from vibrations to chaos.* NIC-RCD: Moscow-Izhevsk, 2006.
234. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Brusentseva, S.V.; Zaichko, P.A.; Ternovsky, V.B. Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: Application to neurophysiology *In Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering;* Balicki, J., Ed.; WSEAS Press: Gdansk, 2014; Vol 21, pp 69-75.
235. Glushkov, A.V.; Prepelitsa, G.P.; Svinarenko, A.A. ; Zaichko, P.A. Studying interaction dynamics of the non-linear vibrational systems within non-linear prediction method (application to quantum autogenerators) *In Dynamical Systems Theory;* Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J., Eds.; Wyd. Politech. Łódz.: Łódz, 2013; Vol T1, pp 467-477.
236. Glushkov AV, Ternovsky V B, Buyadzhi VV, Prepelitsa GP (2014) Geometry of a Relativistic Quantum Chaos: New approach to dynamics of quantum systems in electromagnetic field and uniformity and charm of a chaos *Proc. Intern. Geom. Center* 7(4):60-71.
237. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Brusentseva, S.; Duborez, A. Modeling chaotic dynamics of complex systems with using chaos theory, geometric attractors, and quantum neural networks. *Proc. Intern. Geometry Center.* 2014, 7(3), 87-94.
238. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Shpinareva, I.M.; Kozlovskaya,

- V.P.; Gura, V.I. Quantum stochastic modelling energy transfer and effect of rotational and v-t relaxation on multi-photon excitation and dissociation for CF_3Br molecules. *Int. Journ. Quant. Chem.* 2005, 104(4), 512-516.
239. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Svinarenko, A.A.; Vitavetskaya, L.A. Detection of spectral hierarchy, quantum chaos, chaotic diffusion effects and dynamical stabilization in multiphoton atomic dynamics with intense laser radiation field. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2005, 2(2), 29-37.
240. Khetselius, O.Yu.; Florko, T.A.; Svinarenko, A.A.; Tkach, T.B. Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas. *Phys. Scripta.* 2013, T153, 014037
241. Glushkov, A.V.; Khetselius, O.Yu.; Svinarenko, A.A.; Prepelitsa, G.P. Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape. *In Coherence and Ultrashort Pulsed Laser Emission.* Duarte, F.J., Ed.; InTech: Rijeka, 2010, 159-186.
242. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Gurnitskaya, E.P.; Khetselius, O.Yu.; Dubrovskaya, Yu.V. Consistent quantum theory of recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2006, 35, 425-430.
243. Glushkov, A.V.; Efimov, V.A.; Gopchenko, E.D.; Dan'kov, S.V.; Polishchuk, V.N.; Goloshchak, O.P. Calculation of spectroscopic characteristics 4 of alkali-metal dimers on the basis of a model perturbation theory. *Optics and Spectr.* 1998, 84(5), 670-678.
244. Glushkov, A.V.; Antonenko, T.N.; Serbov, N.G.; Ambrosov, S.V.; Orlova, V.E.; Orlov, S.V.; Dormostuchenko, G.M.; Chernyshova, A.K. Transition energies and oscillator strengths in the spectrum of a CO molecule. *Journ. of Applied Spectrosc.* 1996, 63 (2), 279-282.
245. Glushkov, A.V.; Serbov, N.G.; Ambrosov, S.V.; Orlova, V.E.; Dormostuchenko, G.M.; Troitskaya, O.V. Effective account of 2 p-2 h excitations in molecular calculations by the equation-of-motion method. *Journ. of Structural Chem.* 1995, 36(4), 557-564.
246. Glushkov, A.V.; Malinovskaya, S.V.; Ambrosov, S.V.; Shpinareva, I.M.; Troitskaya, O.V. Resonances in quantum systems in strong external fields consistent quantum approach. *J. Techn. Phys.* 1997, 38(2), 215-218.
247. Glushkov, A.V.; Dan'kov, S.V.; Prepelitsa, G.P.; Polishchuk, V.N.;

- Efimov, A.E. Qed theory of nonlinear interaction of the complex atomic systems with laser field multi-photon resonances. *J. Techn. Phys.* 1997, 38(2), 219-222.
248. Pettersson, A.; Koivisto, R.; Lindgren, P.; Lundevall, S; Royen, P.; Sassenberg, U.; Shi, W. The Electric Dipole Moment of the $B^1\Pi$ State of ZrO. *J. Mol. Spectr.* 2000, 200, 65-71.
249. Fellows CE, Gutterres RF, Campos APC, Vergès J, Amiot (1999) C. The RbCs $X^1\Sigma^+$ Ground Electronic State: New Spectroscopic Study. *J. Mol.Spectr.* 97(1):19-27.
250. Singer K, Reetz-Lamour M, Amthor T, Marcassa L, Weidemuller M (2004) *Spectral broadening* of excitation induced by ultralong-range interactions in a *cold gas of Rydberg atoms*. *Phys. Rev. Lett.* 93:P163001.
251. Jamieson MJ, Dalgarno A, Aymar M, Tharamel J (2009) A study of exchange interactions in alkali molecular ion dimers with application to charge transfer in cold Cs. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* 42:P095203.
252. Li G, Gordon IE, Le Roy RJ, Hajigeorgiou PG, Coxon JA, Bernath PF et al (2013) Reference spectroscopic data for hydrogen halides. Part I: construction and validation of the ro-vibrational dipole moment functions. *J.Quant. Spectr.Rad.Transfer.* 121:78–90.
253. Li G, Gordon IE, Hajigeorgiou PG, Coxon JA, Rothman LS (2013) Reference spectroscopic data for hydrogen halides. Part II: The line lists. *J Quant Spectr. Radiat.Transfer.* 130:284–295.
254. Rothman LS, Gordon IE, Babikov Y, Barbe A, Benner DC, Bernath PF (2013) The HITRAN2012 molecular spectroscopic database. *J Quant. Spectr. Rad. Transfer.* 130:4–50.
255. Le Roy RJ, Haugen CC, Tao J, Li H (2011) Long-range damping functions improve the short-range behaviour of ‘MLR’ potential energy functions. *Mol.Phys.* 109:435–446.
256. Allard O, Samuelis C, Pashov A, Knöckel H, Tiemann E (2003) Experimental study of the Ca2 $1S1$ asymptote. *Eur. Phys. J. D.* 26:155-164.
257. Docenko O, Nikolayeva O, Tamanis M, Ferber R (2002) Experimental studies of the NaRb ground-state potential up to the v'' -76 level. *Phys.Rev.A* 66:P052508.
258. Busevica L, Klincare I, Nikolayeva O, Tama-nis M, Ferber R, Meshkov V (2011) Fourier transform spectroscopy and direct potential fit of a shelf-like state: application to $E(4)^1\Sigma$ KCs. *J.Chem.Phys.* 134:P104307.

259. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA, Buyadzhi VV (2015) Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions. TEC, Odessa.
260. Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine).-2008.-N4.-P.5-11.
261. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A. DC strong field Stark effect for non-hydrogenic atoms: consistent quantum mechanical approach/ Int. Journal of Quantum Chem.-2004.-Vol.99,N5.-P.936-940.
262. Rusov V.D., Glushkov A.V., Korchevsky D., Vaschenko V.N., Ignatenko A.V Stochastic dynamics of the atomic systems in the crossed electric and magnetic field: the rubidium atom recurrence spectra//Вісник Київського унів-ту. Сер.фіз.-мат.–2004.-№4.-524-529.
263. Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., Kozlovskaya V.P. Sensing stochasticity of atomic systems in crossed electric and magnetic fields by analysis of level statistics for continuous energy spectra/ /Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2005.-N2.-P.19-23.
264. Ignatenko A.V., Prepelitsa G.P., Perelygina T.B., Buyadzhi V.V. Optical bi-stability effect for multi-photon absorption in atomic ensembles in a strong laser field. Photoelectronics.-2009.- N18.-P.71-76.
265. Florko T.A., Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Advanced laser photoionization separation scheme and technology for heavy radioactive isotopes and nuclear isomers. Photoelectronics. 2016. Vol.25. P.119-125
266. Florko T.A., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Tkach T.B., Ternovsky V.B, Advanced relativistic model potential approach to calculation of the radiation transition and ionization characteristics for rydberg systems. Photoelectronics. 2014. Vol.23. P.91-95.
267. Kvasikova A.S., Ignatenko A.V., Florko T.A., Sukharev D.E., Chernyakova Yu.G., Photoeffect and spectroscopy of the hydrogen atom in the crossed dc electric and magnetic field.Photoelectronics. 2011. Vol.20. P.71-75
268. Mikhailenko V.I., Kuznetsova A.A., Prepelitsa G.P., Ignatenko A.V., Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external

- magnetic field. *Photoelectronics*. 2010. Vol. 19. P.89-92
269. Glushkov A.V., Kuznetsova A.A., Gurskaya M Yu, Ignatenko A V, Makarova A. O., Modified operator perturbation theory computational approach to atomic systems in an electric field: DC Stark resonances. . *Journal of Physics: C. Series (IOP, London)*. 2018. Vol.1136. P.012012. [Scopus Issue];
270. *Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Spectroscopy of Multielectron Atomic Systems in a DC Electric Field. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol.78. P.287-306;<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.005> [Scopus Issue];
271. Dubrovskaya Y., Bakunina E., Khetselius O., Ignatenko A., Buyadzhi V., Buchko I., Generalized equation of motion method to computing energy and spectroscopic parameters of diatomic molecules. In: A.V. Glushkov, O.Y. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi (Eds). *Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*. Odessa.:TES, 2019. P.116-119.
272. Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Khetselius O., Shpinareva I.M., Antonyuk Y., Studying chaotic elements in dynamics of the laser field rotational excitation in molecules. In: A.V. Glushkov, O.Y. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi (Eds). *Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*. Odessa.:TES, 2019. P.169-171.
273. Ignatenko A.V., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Kvasikova A., Tsabevskaya A., PoludennayaA., Photoelectron spectroscopy of diatomic molecules: optimized Green's functions and density functional approach. In: A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V.Buyadzhi (Eds) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*. Odessa: OSENU, 2018. P.89-100.
274. Ignatenko A.V., Mashkantsev A.A., Kirianov S.V., Pavlov E.V., Bondarenko, D. Chaotic dynamics of diatomic molecules in an electromagnetic field: numerical data In: A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V.Buyadzhi (Eds) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*. Odessa: OSENU, 2018. P.101-112.

275. Glushkov A.V., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Ignatenko A. V., Kuznetsova A. A., Mashkantsev A., A chaos-dynamical approach to analysis, processing and forecasting measurements data of the chaotic quantum and laser systems and sensors. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2018. Vol.15,N4. P.41-49.
276. *Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Tsudik A.V., Mykhailov A.L., A Quasiparticle Fermi-Liquid Density Functional Approach to Atomic and Diatomic Systems. Spectroscopic factors In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology*, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 151-170.
277. Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Mansarliysky V.F., Sakun T.N., Optimized quasiparticle density functional and Green's functions method to computing bond energies of diatomic molecules. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.86-93.
278. Ignatenko A.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bumyakova Yu.Ya., Svinarenko A.A., Sensing cooperative electron-gamma-nuclear effect in multiatomic molecules and its application *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2020. Vol.17. N1. P.39-47.
279. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V. New theoretical approach to dynamics of heat-mass-transfer, thermal turbulence and air ventilation in atmosphere of an industrial city. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2020. Vol.58. P.93-101.
280. Kirianov S.V., Mashkantsev A.A., Bilan I.I., Ignatenko A.V., Dynamical and topological invariants of nonlinear dynamics of the chaotic laser diodes with an additional optical injection. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.149-155.
281. *Ignatenko A.V., Buyadzhi A.A., Buyadzhi V.V., Kuznetsova A.A., Mashkantsev A.A., Ternovsky E.V., *Nonlinear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field*. *Advances in Quantum Chemistry* (Elsevier). 2019. Vol.78. Ch.7. P.149-170;
282. <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.006> [Scopus Issue];
283. Bunyakova Y., Glushkov A., Khetselius O., Svinarenko A., Ignatenko A., Bykowszczenko N. Modeling of nonlinear optical effects in the interaction of laser radiation with atmosphere and sensing for energy

- exchange in a mixture atmospheric gases. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2019. Vol.16. N3. P.42-50.
284. Pavlov E.V., Ignatenko A.V., Kirianov S.V., Mashkantsev A.A., **Dynamical and topological invariants of PbO dynamics in a resonant electromagnetic field**. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.121-126.
285. Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., Buyadzhi A.A. New generalized chaos-geometric and neural networks approach to nonlinear modeling of complex chaotic dynamical systems. In: *Applicable Solutions in Non-Linear Dynamical Systems*, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kaźmierczak, P. Olejnik. Lodz: Lodz Univ. 2019, pp. 267-276.
286. Ignatenko A.V., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Kvasikova A.S., **Photoelectron spectroscopy of diatomic molecules: optimized Green's functions and density functional approach**. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.44-51.
287. Ignatenko A. V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Y.Y., Svinarenko A.A., Photoelectron spectroscopy of diatomic molecules: Hybrid density functional and Green's functions approach to sensing molecular constants. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2018. Vol.15,N4. P.58-66.
288. Mashkantsev A.A., Ignatenko A.V., Kirianov S.V., Pavlov E.V., **Chaotic dynamics of diatomic molecules in an electromagnetic field**. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.103-112.
289. Sofronkov A.N., Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Romanova A.V., Ignatenko A.V., New geophysical complex-field approach to modelling dynamics of heat-mass-transfer and ventilation in atmosphere of the industrial region. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2018. Vol.55. P.104-111.
290. *Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., Chernyakova Yu.G., Ignatenko A.V., Serga I.N., Vitavetskaya L.A., In: Y. A. Wang, M. Thachuk, R. Krems, J. Maruani (Eds) *Relativistic quantum chemistry and spectroscopy of exotic atomic systems with accounting for strong interaction effects*. In: *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2018. Vol.31. P.71-91.
291. *Glushkov A.V., Gurskaya M., Ignatenko A.V., Smirnov A., Serga I., Svinarenko A.A., Ternovsky E., Computational code in atomic and nuclear quantum optics: Advanced computing multiphoton resonance

- parameters for atoms in a strong laser field *Journal of Physics: C Series* (IOP, London, UK). 2017. Vol.905. P.012004; [Scopus Issue];
292. Bunyakova Y.Y., Ternovsky V., Dubrovskaya Y.V., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Vitavetskaya L., Analysis of the beryllium-7 activity concentration dynamics in the atmospheric environment time series after the Fukushima Daiichi nuclear power plants emergency. *Sensor Electronics and Microsystems Technologies*. 2017. Vol.14, N4. P.73-82.
293. Mansarliysky V.F., Ternovsky E.V., Ignatenko A.V., Ponomarenko E.L., Optimized relativistic Dirac-Fock approach to calculating the hyperfine line shift and broadening for heavy atoms in the buffer gas. *Photoelectronics*. 2017. Vol.26. P.46-55
294. Bunyakova Yu., Glushkov A., Khetselius O., Ignatenko A.V., Bykowszczenko N., Buyadzhi V., New approach and microsystem technology of advanced analysis and forecasting the air pollutant concentration temporal dynamics in atmosphere of the industrial cities. *Sensor Electr and Microsyst Techn*. 2017. Vol.14, N3. P.65-78.
295. *Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Smirnov A.V., Prepelitsa G.P., Collisional shift of hyperfine line for thallium in an atmosphere of the buffer inert gases. *Journal of Physics: C Series* (IOP, London, UK). 2017. Vol.810. P.012034; [Scopus Issue];
296. Gurskaya M.Y., Ignatenko A.V., Kvasikova A.S., Buyadzhi A.A., Advanced data for hydrogen atom in crossed electric and magnetic fields. *Photoelectronics*.-2017. Vol.26. P.148-155.
297. *Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Kvasikova A.S., Ignatenko A.V., Kuznetsova A.A., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B., Non-Linear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field and Laser Systems. In: A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Eds) *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Advances in Concepts and Applications, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Eds. Cham: Springer. 2017. Vol.30. P.169-180.
298. Ignatenko A.V., Kuznetsova A.A., Kvasikova A.S., Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., Nonlinear chaotic dynamics of atomic and molecular systems in an electromagnetic field. *Photoelectronics*. 2016. Vol.25. P. 79-84
299. Korchevsky D., Malakhov A., Ignatenko A.V., Ponomarenko E., Shpinareva I.M., Stochastic dynamics of the laser field rotational

- excitation for molecules In: Eds. A. Glushkov, O. Khetselius, V. Buyadzhi (Eds) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics*, Ser.: *Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*, Kharkiv: FOP, 2017. P.327-329
300. Smirnov A.V., Buyadzhi V.V., Ignatenko A.V., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of beryllium. *Photoelectronics*. 2016. Vol.25. P.26-33.
 301. Ignatenko A.V., Ponomarenko E.L., Kvasikova A.S., Kulakli T.A., On determination of radiative transitions probabilities in relativistic theory of diatomic molecules: new scheme. *Photoelectronics*. 2015. Vol.24. P.116-121.
 302. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-sections. *Sensor Electr.and Microsyst.Techn.* 2015. Vol.12,N4.P.27-36.
 303. Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Sukharev D.E., Ignatenko A.V., Relativistic and nonrelativistic approaches in theory of permitted beta-transitions: an effect of atomic field on fermi and integral fermi functions valuesю *Photoelectronics* 2015. Vol.24.-P.58-64.
 304. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., *Frontiers in green radiochemistry: New optimized quantum approach to laser separation of isotopes and transmutation of radioactive waste*. In: Ed. L. Mammimo, *Green Chemistry and Computational Chemistry*, 1st Ed.; Elsevier, 2021. Ch.16.
 305. <https://www.elsevier.com/books/green-chemistry-and-computational-chemistry/mammimo/978-0-12-819879-7>

Навчальне електронне видання

ГЛУШКОВ Олександр Васильович

АТОМНА ОПТИКА ТА СПЕКТРОСКОПІЯ. Ч.5

Конспект лекцій

Видавець і виготовлювач

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, м. Одеса, 65016

тел./факс: (0482) 32-67-35

E-mail: info@odeku.edu.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 5242 від 08.11.2016