

УДК539.184:539.186

№ держреєстрації 0120U002098

Инв. № . . . . .

Міністерство освіти і науки України

Одеський державний екологічний університет

65016, м. Одеса - 16, вул. Львівська, 15, тел. (0482) 32 67 39

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор ОДЕКУ  
д.геогр.н., проф.  
/Ю.С.Тучковенко/  
2023.12.25



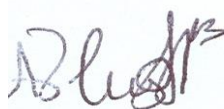
## ЗВІТ

### ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

“ РОЗРАХУНОК ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ ТА БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ НА ОСНОВІ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ БАГАТОЧАСТИНКОВОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ ”

(заключний звіт)

Керівник НДР  
зав. кафедри вищої та  
прикладної математики,  
д-р фіз.-мат. наук, проф.


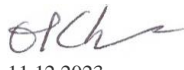

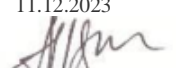
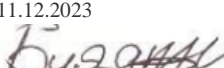





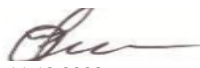
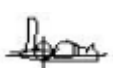
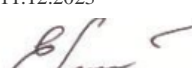
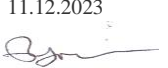

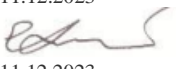

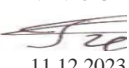
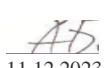


/ О.В.Глушков /

2023

Рукопис закінчено «11» 12. 2023р.

## СПИСОК АВТОРІВ

Керівник, зав. каф. математики та квантової механіки, д-р фіз.-мат. наук, професор	 11.12.2023	О.В. Глушков (pp.1-4)
Професор кафедри математики та квантової механіки, д-р фіз.-мат. наук, професор	 11.12.2023	О.Ю. Хецеліус (pp. 1-4)
Професор кафедри математики та квантової механіки, д-р фіз.-мат. наук, професор	 11.12.2023	А.А. Свинаренко (pp.1-4)
Професор кафедри математики та квантової механіки, д-р фіз.-мат. наук, доцент	 11.12.2023	Г.В. Ігнатенко (p.2)
Доцент кафедри математики та квантової механіки, д-р фіз.-мат. наук, доцент	 11.12.2023	В.В. Буяджи (p.3)
Доцент кафедри математики та квантової механіки, канд. фіз.-мат. наук, доцент	 11.12.2023	Ю.В. Дубровська (p.4)
Доцент кафедри математики та квантової механіки, канд. фіз.-мат. наук, доцент	 11.12.2023	Г.С. Квасикова (p.1)
Доцент кафедри інформаційних технологій канд. фіз.-мат. наук, доцент	 11.12.2023	Т.Б. Ткач (p.3)
Професор національного ун-ту Одеська морська академія, д-р фіз.-мат. наук, професор	 11.12.2023	Г.О. Кузнецова (p.4)
Професор національного ун-ту Одеська морська академія, д-р фіз.-мат. наук, професор	 11.12.2023	В.Б. Терновський (pp.2-4)
Стар. викладач кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	О.О. Антошкіна (p.2)
Стар. викладач кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	В.В. Афанасьєва (p.3)
Аспірант кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	Є.В. Терновський (p.3)
Аспірант кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	А.В. Цудік (p.4)
Аспірант кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	О.Л. Михайлов (p.2)
Аспірант кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	Е.О. Єфімова (p.2)
Аспірант кафедри математики та квантової механіки	 11.12.2023	М.В. Сміщенко (p.3)
Студент Одеського державного екологічного університету	 11.12.2023	А.М. Гусар (p.1)
Студент Одеського державного екологічного університету	 11.12.2023	К.В. Антошкін (p.1)

## ЗМІСТ

	Стр.
РЕФЕРАТ.....	5
ВСТУП.....	6
РОЗДІЛ 1. СУЧАСНИЙ СТАН ОПТИКИ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ РІДБЕРГІВ- СЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У ЗОВНІШНЬОМУ ЕЛЕКТРО- МАГНІТНОМУ ПОЛІ. ОГЛЯД ТЕОРЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕНЬ ЕЛЕМЕНТІВ КВАНТОВОГО ХАОСУ В АТОМНИХ СИСТЕМАХ.....	8
1.1. Вступні зауваження. Якісна оптика та спектроскопія рідбергівських атомів.....	8
1.2. Огляд ключових методів теоретичних обчислень в квантовій оптиці та спектроскопії рідбергівських атомів.....	10
РОЗДІЛ 2. НОВІ РЕЛЯТИВІСТСЬКІ ПІДХОДИ В СПЕКТРОСКОПІЇ ВАЖ- КИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ.....	14
2.1. Вступні зауваження.....	14
2.2. Новий релятивістський підхід в спектроскопії важких рідбергівських систем.....	16
2.2.1. Фундаментальні основи нового релятивістського методу в спектроскопії важких рідбергівських атомів: Нульове наближення релятивістської ТЗ.....	16
2.2.2. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: узагальнена Glushkov-Ivanov версія.....	22
2.2.3. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: Урахування обмінно-кореляційних ефектів та мінімізація калібрувальних-неінваріантних внесків.....	25
2.3. Висновки до розділу 2.....	29
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ: НОВІ ДАНІ.....	30
3.1. Вступні зауваження.....	30

3.2. Тестовий розрахунок ймовірностей та сил осциляторів у важких Li-подібних багатозарядних іонах: Експериментальні та тестові теоретичні дані.....	31
3.3. Результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик релятивістських рідбергівських атомних систем: Rb, Cs, Fr.....	35
3.3.1. Енергії рівнів, ймовірності та радіаційні матричні елементи для переходів у спектрах важких багатоелектронних атомів: Rb, Cs, Fr.....	35
3.3.2. Енергії рівнів, радіаційні матричні елементи переходів та часи життя для важких атомів Rb, Cs, Fr у високозбуджених рідбергівських станах.....	41
3.4. Висновки до розділу 3.....	49
<b>РОЗДІЛ 4. РОЗРАХУНОК ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ.....</b>	<b>51</b>
4.1. Елементи нової версії операторної ТЗ для багатоелектронних атомних систем в електромагнітному полі, теорії квазіенергетичних станів та методу комплексних координат.....	51
4.2. Спектроскопія та іонізаційна динаміка релятивістських рідбергівських атомів рубідію і францію в мікрохвильовому полі: Квантовий розрахунок.....	56
4.3. Висновки до розділу 4.....	63
<b>ВИСНОВКИ.....</b>	<b>64</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....</b>	<b>66</b>
<b>СПИСОК НАУКОВИХ ПУБЛІКАЦІЙ.....</b>	<b>86</b>

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 107 с., 323 джерела.

Об'єкт дослідження – оптика і спектроскопія рідбергівських атомів та багатозарядних іонів.

Мета роботи – розвиток нового, прецизійного, калібрувально-інваріантного методу *ab initio* теорії багаточастинкової теорії збурень (ТЗ) в теорії радіаційних переходів в спектрах рідбергівських атомів (РА) і багатозарядних іонів у вільному стані з використанням релятивістського енергетичного S-матричного формалізму і розрахунок параметрів радіаційних переходів для широкого кола РА. Робота в цьому напрямку проводиться вперше.

Основні методи дослідження включають методи квантової механіки, КЕД і квантової теорії поля для опису характеристик радіаційних переходів у спектрах РА та багатозарядних іонів з урахуванням релятивістських ефектів, апарат багаточастинкової ТЗ, обчислювальні методи для розв'язання систем диференціальних рівнянь, розрахунку амплітуд радіаційних переходів і т.і. Ключові ідеї базуються на побудові нової релятивістської теорії розрахунку енергетичних, спектральних та радіаційних характеристик атомів та іонів в межах релятивістського енергетичного підходу і побудові нової ітераційної процедури генерації базисів релятивістських біспінових.

Вперше в спектроскопії РА і багатозарядних іонів планується розвинути нову релятивістську теорію радіаційних переходів з використанням узагальненого релятивістського *ab initio* методу, що базується на релятивістському енергетичному підході і новій ітераційній процедурі побудови базисів релятивістських біспінових; планується отримати низку нових даних щодо енергій, сил осциляторів переходів в спектрах атомів лужних елементів, лантанідів та інших РА в рідбергівських станах та відповідних багатозарядних іонів.

ЕНЕРГЕТИЧНІ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИ, РІДБЕРГІВСЬКІ АТОМИ ТА БАГАТОЗАРЯДНІ ІОНИ, РЕЛЯТИВІСТСЬКА БАГАТОЧАСТИНКОВА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ

## ВСТУП

З перших років створення квантової механіки, а в подальшому, і квантової електродинаміки (КЕД) теорія радіаційних процесів (переходів, іонізації, розпаду і т.і.) перебувала в центрі уваги теоретичної атомної оптики і спектроскопії, лазерної фізики. В останні два десятиріччя шуканий інтерес зріс ще більшою мірою, коли стала очевидною фундаментально важлива роль багатоелектронних рідбергівських атомів (РА; тобто атомів в високозбуджений станах) і багатозарядних іонів, процеси випромінювання і поглинання фотонів за їх участю в широкому класі фізичних додатків. Мова йде, перш за все, про задачі астроспектроскопії, астрофізики (процеси випромінювання в туманностях і уламках Наднової; згідно ідеї Гінзбурга та інш., радіаційні переходи між компонентами тонкої, надтонкої структури H-, Li-, Be-подібних іонів N, Fe забезпечують діагностику шуканого випромінювання), фізики Сонця і полярних сяїв (випромінювання іонів Ne, Ca, Fe, ін.), діагностики лабораторної, астрофізичної, термоядерної плазми, над актуальні задачі лазерної фізики і квантової електроніки, у т.ч. створення лазерів (разерів, газерів) короткохвильового діапазону. Слід згадати і такі нові класи задач як вивчення бозе-конденсату у парах лужних атомів, «радіаційної» робочої речовини в атомних машинах Карно, теорія атомного годинника, нарешті, фізика нового рідбергівського стану речовини. Загальновідомими є принципові недоліки більшості із існуючих теоретичних методів таких як повільна збіжність рядів ТЗ, невиконання принципу калібрувальної інваріантності (поява калібрувально-неінваріантних внесків (КНВ) в радіаційні ширини), використання неоптимізованих базисів орбіталей, недостатньо повний і коректний облік обмінно-кореляційних (ОК) ефектів. Використання більш простих фізичних моделей типу кулонівського наближення, квантового дефекту, не забезпечує спектроскопічної точності обчислень, і крім того, як правило, вимагає обов'язкової наявності експериментальних даних. Таким чином, є гостра необхідність розвитку нових, прецизійних, зрозуміло, неемпіричних і релятивістських, калібрувально-інваріантних теорій радіаційних перехо-

дів в спектрах РА, багатозарядних іонах, але бажано з використанням їх унікальних фізичних особливостей [1-238].

*Мета даної роботи* - розвиток нового, прецизійного, калібрувально-інваріантного методу *ab initio* теорії багаточастинкової ТЗ в теорії радіаційних переходів в спектрах РА і багатозарядних іонів у вільному стані з використанням релятивістського енергетичного S-матричного формалізму і розрахунок параметрів радіаційних переходів для широкого кола РА

Вперше в спектроскопії РА і багатозарядних іонів планується розвинути нову релятивістську теорію радіаційних переходів з використанням узагальненого релятивістського *ab initio* методу модельного потенціалу, що базується на релятивістському енергетичному підході, фундаментальному принципі мінімізації калібрувально неінваріантних внесків в радіаційні ширини атомних рівнів; планується отримати низку нових даних щодо енергій, сил осциляторів переходів в спектрах атомів лужних елементів, лантанідів та інших РА в рідбергівських станах та відповідних багатозарядних іонів

Розвинуті в результаті виконання НДР вперше в спектроскопії РА і багатозарядних іонів у рідбергівських станах нові підходи і отримані на їх основі нові спектральні дані для атомів, у тому числі, РА лужних елементів, лантанідів, інших РА тощо можуть бути безпосередньо використані в широкому колі додатків, що включають сучасні задачі математичної фізики, прикладної математики, квантової оптики та спектроскопії, астро-спектроскопії і астрофізики, фізики лазерів квантової електроніки. Дані по радіаційним параметрам РА і іонів принципово важливі при вивченні властивостей бозе-конденсату в парах лужних атомів, «радіаційної» робочої речовини в атомних машинах Карно, параметрів нового рідбергівського стану речовини, нарешті, випромінювання РА в ультрахолодній плазмі, індукованого тепловим випромінюванням, розвитку нових квантово-інформаційних систем та технологій.

## РОЗДІЛ 1

# СУЧАСНИЙ СТАН ОПТИКИ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У ЗОВНІШНЬОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ. ОГЛЯД ТЕОРЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕНЬ ЕЛЕМЕНТІВ КВАНТОВОГО ХАОСУ В АТОМНИХ СИСТЕМАХ

### 1.1. Вступні зауваження. Якісна оптика та спектроскопія рідбергівських атомів

Дослідження енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів за сучасного стану трансформувалося в одну із галузей квантової оптики та спектроскопії, яка активно розвивається. Серед ключових класів задач особливо слід виділити клас завдань, пов'язаних з випромінюванням (поглинанням) фотонів внаслідок радіаційних переходів в спектрах рідбергівських атомів, обчисленням характеристик іонізації рідбергівських атомів у зовнішніх електричному та магнітному полях. Прикладне значення таких досліджень пов'язано з потребами широкого кола додатків, які включають безпосередньо квантову оптику, квантову електроніку, лазерну фізику, фізику та хімію плазми, зокрема, діагностику лабораторної, астрофізичної та лазерної плазми, фізику термоядерного синтезу тощо. Слід також особливо виділити значення оптики та спектроскопії рідбергівських атомів для численних додатків в астрофізиці, фізиці Сонця, астроспектроскопії тощо (див. [1-182]). Добре відомо, що рідбергівські атоми знайдені в астрофізичних умовах з  $n \sim 300$ ; в радіоастрономії відомо, що у міжзоряних хмарах знайдені лінії поглинання між рідбергівськими станами з  $n \sim 300-700$  [1-10]. В останні роки суттєво виріс інтерес до вивчення спектрів важких і надважких рідбергівських атомів, які очевидно є істотно релятивістськими системами і додатково мають досить складні та одночасно цікаві оптичні та спектроскопічні властивості [1-10, 34-49, 103-108]. Таблиця 1.1 містить які-



сні значення основних характеристик атомів, які знаходяться у високо збуджених рідбергівських станах.

Таблиця 1.1

Фізична величина	Фізична залежність	Характерні чисельні значення
Енергія зв'язку рідбергівського електрону	$Z^2 R_\infty / n^2$ $R_\infty = 13.6058 \text{ eV}$	$1.36 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$
Характерний розмір рідбергівської орбіти	$n^2 a_0 / Z$ $a_0 = \hbar^2 / m e^2 = 0,5291773 \text{ \AA}$	$0.53 \cdot 10^{-4} \text{ см}$
Геометричний переріз	$\pi^4 a_0^2 / Z^2$	$0.88 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2$
Частота переходів між сусідніми рівнями	$2Z^2 R_\infty / \hbar n^3$	$4.13 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$
Напруженість електричного поля яке діє на рідбергівський електрон	$Z^3 E_0 / n^4$	$51.4 \text{ В/см}$
Напруженість електричного поля, яке відповідає порогу іонізації із рідбергівського стану	$Z^3 E_0 / 16n^4$ $E_0 = 5.142 \cdot 10^9 \text{ Всм}^{-1}$	$3.2 \text{ В/см}$

Наведені якісні характеристики ілюструють унікальні властивості рідбергівських атомів, завдяки яким в останній час спостерігається безпрецедентний прогрес як у експериментальних, так й теоретичних дослідженнях. Варто нагадати про розвиток нових методів лазерної спектроскопії, резонансної мультіфотонної спектроскопії, фізики та техніки магнітно-оптичних пасток і т.і. Зрозуміло, що енергетична слабкість рідбергівських електронів атому у зовнішніх полях відкриває широкі можливості управління властивостями таких систем за допомогою електричних та магнітних полів.

## 1.2. Огляд ключових методів теоретичних обчислень в квантовій оптиці та спектроскопії рідбергівських атомів

Хоча в сучасній атомній оптиці та спектроскопії (див. [1-317]) на сьогодні розроблено широкий клас різноманітних методів обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик (напр., стандартні версії одно- та багатоконфігураційного методу ХФ, РХФ, ДФ, навіть метод мега-ДФ, R-матричний підхід, відповідні багаточисленні версії методів ТЗ як з ДФ, РХФ, ХФ нульовим наближенням, методи МР та псевдопотенціалу, теорія функціоналу густини, наближення типу НКД, нарешті, багаточисельні квазікласичні та класичні моделі тощо, які до речі реалізовані у відомих РС атомних комплексах типу “Grasp”, “FAC”, “Dirac”, “Bertha”, “Superstructure” та інші), на жаль, при конкретному застосуванні до обчислення характеристик рідбергівських атомів часто перелічені методи, як це не дивно, не здатні забезпечити спектроскопічну точність опису властивостей рідбергівських атомів.

По-перше, традиційно істотне значення, особливо для релятивістських рідбергівських атомів, має одночасне, прецизійне, коректне урахування релятивістських, ОК (одночасткових і багаточасткових) ефектів, а також ефектів, обумовлених впливом зовнішніх електромагнітних полів для рідбергівських атомів у полях. Добре відомо, що результати розрахунку радіаційних властивостей важких атомів на основі сучасних теоретичних методів часто відрізняються один від одного та від експерименту в кілька разів. Фундаментальні причини такого стану речей було докладно виявлено у багатьох роботах і викладено, напр., в монографіях [1-3]. Різниця в значеннях радіаційних ширин, ймовірностей переходів, іонізації тощо для важких атомів у випадку використання різних виразів для фотонного пропагатора може досягати 400%. Це автоматично вказує на порушення фундаментального принципу калібрувальної інваріантності при розрахунку радіаційних характеристик, до того ж, коли мова йде навіть про спрощені моделі типу воднеподібних та моделі квантового дефекту. Ці підходи лише за рахунок фітінгових процедур з емпіричними даними дозволили описа-

ти ряд легких рідбергівських атомів типу атомів першого періоду таблиці Менделєєва.

По-друге, важливим моментом будь-якого підходу у спектроскопії рідбергівських атомів є правильний вибір самоузгодженого потенціалу середнього поля. Точніше, мова йде про обов'язкове урахування ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомних системах, який принципово не враховується досі ні в одній моделі чи методі, що використовуються у спектроскопії важких рідбергівських атомів. Звичайно, спектр системи незалежних діраківських електронів, що рухаються у полі кулонівського ядерного потенціалу із зарядом ядра  $Z=1$ , визначається як кулонівський. Наприклад, рідбергівські рівні кулонівського спектру можуть бути описані релятивістським рівнянням Діраку для атому водню. Але у певний час (див., напр., [12-14]) стало зрозумілим особливо після проведення прецизійних експериментальних досліджень ряду важких багатоелектронних атомів типу лантанідів, що у спектрах таких атомів присутні такі лінії, які відносяться до різних спектральних серій і відповідають різним значенням головного квантового числа. На мові відомого НКД це свідчить про те, що різниця в квантових дефектах станів з ідентичною електронною конфігурацією може перевищувати одиницю. А інтервали тонкої структури рівнів перевищують на декілька порядків по величині зомерфельдівські значення для  $Z=1$ . Дуже важливо, що ці очевидні некулонівські риси спектрів важких атомів (з багатоелектронним важким остовом) не зникають при  $n \rightarrow \infty$ . Цей ефект був докладно виявлений зокрема Івановим і співр. (див., напр., [12,13, 209, 210]).

Вказані дефектні риси кулонівської моделі є особливо суттєвими при обчисленні, наприклад, радіаційних та автоіонізаційних ширин. Зокрема, Аумар et al [208] при дослідженні перерізів фотоіонізації рубідію та цезію, а такою туплію знайшов, що у випадку високо розташованих рідбергівських станів компенсація інтегралів завдяки осциляціям електронних орбіталей суттєво впливає кількісно на величини матричних елементів (амплітуд). Процес компенсації

визначається взаємним розташуванням вузлів орбіталей. З іншого боку, розташування шуканих вузлів є надто відчутним до моделі, що описує самоузгоджений потенціал середнього поля, тобто потенціал взаємодії “квазічастинка-остов” у випадку атомної системи, що складається з остову замкнених електронних оболонок та декількох зовнішніх квазічастинок. До речі, цей факт пояснює й феномен існування у спектрах важких багато електронних систем багаточисельних вузьких резонансних станів, що виявляються методами лазерної спектроскопії. Таким чином, у випадку релятивістських рідбергівських систем стає принципово важливим урахування суттєво некулонівських особливостей, які проявляють себе як в амплітудах радіаційних переходів (редукованих матричних елементах переходів) і, до речі, не зникають при зростанні головного квантового числа. Більш того, у випадку рідбергівських атомів кулонівська модель часто принципово не спроможна коректно кількісно описати правильні асимптотичні залежності радіаційних амплітуд від квантових чисел активного рідбергівського електрону. Різка зростання ролі релятивістських ефектів для важких рідбергівських атомів виникає також по причині неединичного ядерного заряду, який відчуває рідбергівський електрон, що і є проявом некулонівських властивостей.

Це пояснює, чому відомі моделі та методи типу різних версій квантового дефекту НКД, ДФ та РХФ моделі, а також навіть ТЗ з одно конфігураційним ДФ або РХФ нульовим наближенням дають дуже низьку точність опису рідбергівських спектрів та радіаційних характеристик важких рідбергівських атомів, особливо атомних систем, що складаються з остову замкнених електронних оболонок та декількох зовнішніх квазічастинок. Ця ж проблема стає дуже важливою і для одноквазічастинкових рідбергівських атомних систем, типу важких рідбергівських атомів лужних елементів (цезій, францій). З іншого боку, використання для опису їх енергетичних характеристик емпіричних моделей (тобто моделей, в яких використовується з початку експериментальна інформація для фітінгу параметрів моделі) може приводити й до прийнятних результатів, оскільки обчислення енергій рівнів визначається в першу чергу завданням адекват-

ного гамільтоніану атомної системи. Щодо широкого класу характеристик, які залежать від якості базисів релятивістських орбіталей, то навіть використання емпіричної інформації з метою фітінгу параметрів простих моделей не приводить до високої точності із-за ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомних системах. Це ж стосується й кількісно коректного опису ефекту Штарка у рідбергівських атомах, тобто поведінки атомів у постійному (DC) електричному, або змінному (AC) електромагнітному полях. До речі, на сьогодні існують лише одиничні подібні моделі й практично всі вони базуються на кулонівському наближенні і, як правило, у випадку сильних полів не спроможні дати адекватний опис ефекту (див. огляд головних робіт з ефекту Штарку нижче). Ще один клас дуже важливих задач – це проблематика квантового хаосу у рідбергівських атомах у зовнішніх полях.

## РОЗДІЛ 2

# НОВІ РЕЛЯТИВІСТСЬКІ ПІДХОДИ В СПЕКТРОСКОПІІ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ

### 2.1. Вступні зауваження

В цьому розділі ми викладемо принципово новий релятивістський квантово-динамічний підхід до опису енергетичних та спектроскопічних властивостей (енергії рівнів, сили осциляторів, редуковані матричні елементи радіаційних  $E1$  переходів, часи життя) важких рідбергівських атомів як у вільному стані, так й в зовнішньому електромагнітному (мікрохвильовому) полі, зокрема, вперше реалізується релятивістський метод опису DC та AC ефектів Штарку для релятивістських атомних систем для будь-яких напруженостей поля. Новий підхід в спектроскопії рідбергівських атомів базується на *ab initio* релятивістському методі MP (RMP) в межах енергетичного підходу EF (S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу) з оптимізацією базисів релятивістських орбіталей, безумовним дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та коректним, прецизійним урахуванням ОК ефектів на основі послідовних багаточастинкових функціоналів електронної густини.

Важливо зазначити, що переважна більшість сучасних методів обчислення ймовірностей радіаційних переходів та сил осциляторів базується на стандартному квантово-механічному амплітудному підході (з відомим золотим правилом Фермі) [56]. Альтернативний підхід, що сходить до фундаментальних робіт Гелл-Мана та Лоу з S-матричного формалізму [168], Лабзовського та ін. [169] для атому водню та воднеподібних систем й, нарешті, міцного релятивістського калібрувально-інваріантного формалізму Іванова-Іванової-Глушкова [3, 4, 7, 9-13, 131, 132] для складних багато електронних атомів, має суттєві переваги над стандартним амплітудним формалізмом. Достатньо згадати, що відома для стандартного квантово-механічного амплітудного формалізму проблема узгодження фаз відсутня в енергетичному формалізмі. З іншого боку,

вперше у калібрувально-інваріантному формулюванні енергетичного формалізму [3, 11] органічно вирішується питання не тільки питання узгодження фаз, але й проблема послідовного та коректного виконання принципу калібрувальної інваріантності й, звичайно ж, урахування складних багаточастинкових ОК ефектів.

Розроблений і реалізований нами вперше в спектроскопії важких рідбергівських атомів новий релятивістський підхід до обчислення енергетичних та спектроскопічних параметрів АС, ДС штарківських резонансів та подальшого аналізу та моделювання хаотичної динаміки рідбергівських атомів у мікрохвильових полях базується на формалізмі квазістаціонарних квазіенергетичних станів (ККЕС) Зельдовича [96], релятивістській операторній ОТЗ і релятивістському *ab initio* методі модельного потенціалу.

Нами вперше в спектроскопії рідбергівських атомів і відповідно релятивістській атомній хаотичній динаміці розвинуто та адаптовано універсальний єдинообразний хаос-кібернетичний (статистично-динамічний) комплекс для докладного кількісного вивчення нового квантово-оптичного феномену – релятивістського квантового хаосу в динаміці конкретних рідбергівських атомів у мікрохвильовому полі з подальшим обчисленням головних характеристик систем, зокрема, ймовірності хаотичної іонізації, як функції частоти поля, параметрів квантових флуктуацій, хаотизації, стабілізації, фрактальних властивостей, тобто фактично особливостей виконання теореми КАМ. Таким чином, в квантовій оптиці та спектроскопії важких (що автоматично означає, звісно, релятивістських) рідбергівських атомних систем у зовнішніх полях закономірно апробується апарат дослідження феномену релятивістського квантового хаосу для вказаних систем (термін вперше запропонований нами), який на відміну від нерелятивістського аналогу за теперішнього часу фактично є не тільки недослідженим, але й фактично навіть відсутня постановка подібного класу досліджень.

## 2.2. Новий релятивістський підхід в спектроскопії важких рідбергівських систем

### 2.2.1. Фундаментальні основи нового релятивістського методу в спектроскопії важких рідбергівських атомів: Нульове наближення релятивістської ТЗ

Як вказувалося вище, основою для побудови нового ефективного релятивістського методу опису радіаційних характеристик важких рідбергівських атомів нами вибрано енергетичний підхід EF обов'язково у калібрувальньо-інваріантному формулюванні [3, 4, 11], але на відміну від оригінальних версій ми будемо оптимізувати базис релятивістських орбіталей, виходячи не з воднеподібних функцій (як, напр., в [11]), а з розв'язків релятивістських рівнянь Дірака з *ab initio* МР та відповідними ОК функціоналами густини. Як прийнято в релятивістському енергетичному підході EF згідно з [3, 11], застосованому до багатоелектронного атому, зсув електронної енергії важкого рідбергівського атому представляється у стандартному комплексному виді:

$$\Delta E = \text{Re}\Delta E + i \text{Im}\Delta E, \quad (2.1a)$$

$$\text{Im} \Delta E = -\Gamma/2, \quad (2.1b)$$

де  $\Gamma$  – імовірність розпаду (переходу). Далі, базуючись на EF у формулюванні Glushkov-Ivanov [4, 11] і формалізмі *ab initio* КЕД ТЗ багато-квазічастинкових (QP) систем, в новому підході потрібно сформулювати процедуру генерації калібрувальньо-інваріантних базисів релятивістських орбіталей “0” порядку і прецизійного урахування ОК ефектів як ефектів 2 і вище порядків ТЗ. При цьому формально нагадаємо, що послідовний метод розрахунку  $\Delta E$  базується на адіабатичній формулі Гелл-Мана і Лоу з КЕД матрицею розсіяння і веде до рядів ТЗ для зсуву енергії із звичайною фейнманівською діаграмотизацією. Докладно процедура побудови відповідного формалізму КЕД ТЗ викладена, напр., в [3, 4,



7, 9, 11-13], й ми нижче обмежимося лише коротким цитування відповідних фундаментальних аспектів.

Далі вважається, що всі стани (напр., з одним або декількома зовнішніми квазічастинками QR над остовом відповідного рідбергівського іону) розглядаються як група вироджених станів і секулярна матриця має звичайний вид:

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + M^{(3)} + \dots + M^{(k)}, \quad (2.2)$$

де  $k$  – число частинок;  $M^{(0)}, M^{(1)}, M^{(2)}$  – внески вакуумних 1-, 2- QR діаграм.

Повний гамільтоніан рідбергівського атому зазвичай записується у вигляді [3, 9] (в атомних одиницях):

$$H = \sum_i \{ \alpha c p - \beta m c^2 + U(r_i | Z) \} + \sum_{i>j} V(r_{ij}), \quad (2.3)$$

де  $\alpha, \beta$  – матриці Дірака,  $c$  – швидкість світла,  $U(r/Z)$  – кулонівський потенціал електрон-ядерної взаємодії (тобто:  $-Z/r$ ).

Зазначимо тут же, що в нашому методі на відміну від абсолютно всіх існуючих на сьогодні різноманітних методів спектроскопії рідбергівських атомів замість чисто кулонівського потенціалу передбачається й можливість використання несингулярного електрон-ядерного потенціалу з безпосереднім урахуванням розподілу густини в ядрі (це очевидно може бути принципово важливим для суперважких рідбергівських систем).

Міжелектронний потенціал в (2.3) (стандартне нерелятивістське визначення  $V(r_{ij}) = 1/r_{ij}$ ) в послідовній релятивістській теорії записується у вигляді (див. [3, 9]):

$$V_{e-e}^{rel}(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}, \quad (2.4)$$

де  $\alpha_i, \alpha_j$  – матриці Дірака;  $\omega_{ij}$  – частота атомного переходу.

Звичайно, потенціал (2.4) на відміну від нерелятивістського означення

враховує безпосередньо ефект запізнення та магнітну (зазвичай звану як брейтівська) взаємодію [3].

Далі ми будемо будувати так звану оптимізовану версію релятивістської ТЗ (нову в теорії релятивістських рідбергівських атомів), яка на відміну від стандартних ТЗ типу ТЗ з ДФ або РХФ в нульовому наближенні враховує всі основні релятивістські ефекти як одночастинкові, так й двочастинкові (фактично з точністю до  $\alpha^2$ , де  $\alpha$  – стала тонкої структури) плюс вагому частину дуже важливих ОК ефектів.

Гамільтоніан “0” наближення представимо у вигляді такого оператора:

$$H_0 = \sum_i \{ \alpha c p_i - \beta m c^2 + [-Z / r_i + U_{MF}(r_i | b) + V_{XC}(r_i)] \} \quad (2.5a)$$

де  $V_{XC}(r_i)$  – одночастинковий обмінно-кореляційний потенціал (див. далі),  $U_{MF}(r_i | b)$  – самоузгоджений потенціал середнього поля (Mean Field;  $b$  – параметр потенціалу, у подальшому визначаємий у межах аб івітію процедури), тобто потенціал взаємодії “квазічастинка-остов” у випадку атомної системи, що складається з остову замкнених електронних оболонок та декількох зовнішніх квазічастинок.

Потенціал електрон-ядерної взаємодії обирається у звичайній стандартній формі, тобто  $V_N(r) = -Z/r$ , хоча у випадку дослідження суперважких атомних систем й не досить високо розташованих станів важливим стає класичний ефект Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, який у нашій теорії обчислюється по методиці [3]. Тобто, електрон-ядерний потенціал має вигляд:

$$V_N(r|R) = -((1/r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_N(r'|R) + \int_r^\infty dr' r' \rho_N(r'|R)), \quad (2.56)$$

де  $R$  – радіус ядра суперважкого атому, а ядерна густина може бути визначена, напр., в моделі Фермі, зокрема:

$$\rho(r) = \rho_0 / \{1 + \exp[(r - c) / a]\}, \quad (2.5\text{в})$$

де параметр  $a=0.523\text{Фм}$ , а параметр  $c$  вибирається таким чином, що середньо-квадратичний радіус:

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = (0.836 \cdot A^{1/3} + 0.57) \text{Фм}. \quad (2.5\text{г})$$

Обчислення потенціалу (2.5) в межах КЕД ТЗ для суперважких атомних систем (реалізовано у відомому РС комплексі “Superatom”) зводиться до розв'язання системи диференціальних рівнянь з відповідними межовими умовами.

Тоді оператор збурення розвиваємої релятивістської ТЗ з нульовим наближенням (2.5а) має бути записаний у вигляді:

$$V_{\text{int}} = - \sum_i^{N_{\text{tot}}} [U_{MF}(r_i | b) + V_{XC}(r_i)] + \sum_{i>j}^{N_{\text{tot}}} V_{e-e}^{\text{rel}}(r_i r_j) \quad (2.6)$$

з відповідним компенсуючим членом  $U_{MF}(r_i | b + V_{XC}(r_i))$  у квадратних скобках.

Зазначимо, що повне і докладне обґрунтування такої ідеології побудови формалізму ТЗ було дано ще у відомих роботах Толмачова-Іванова, а також відомих роботах Kelly (див. докладніше [3]).

Важливим моментом нового підходу з урахуванням поставлених задач у спектроскопії рідбергівських атомів є правильний вибір самоузгодженого потенціалу середнього поля  $U_{MF}(r_i | b)$ . Точніше, мова йде про обов'язкове урахування ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомних системах, який принципово не враховується поки що ні в одній моделі чи методі, що використовуються у спектроскопії важких рідбергівських атомів. Враховуючи наведений в розділі 1 аналіз ролі ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомних системах в якості самоузгодженого потенціалу середнього поля, ми й для нашого підходу вибрали МР Ivanov-Ivanova [13], який широко використовувався в багатьох спектроскопічних дослідженнях спектрів складних атомів ([12, 13, 209, 210], але на відміну від оригінальної версії у подальшому цей одно-параметричний МР ми викорис-

таємо виключно в межах ab initio процедури, таким чином зберігаючи виключно неемпіричний характер нашого методу:

$$U_{MF}(r_i | b) = 2[1 - \exp(-br)(1+r)]/Zr + 8[1 - \exp(-br)(1+0,6r+0,16r^2+0,036r^3)]/Zr. \quad (2.7)$$

В якості потенціалу квазіоднчастинкового ОК потенціалу у подальшому ми візьмемо узагальнений потенціал Kohn-Sham-Gunnarsson-Lundqvist, вперше докладно застосований Glushkov et al (див., напр., [3, 10, 75, 78, 84]). Але на відміну від останніх версій ми запишемо цей потенціал у своїй оригінальній формі без додаткових параметрів, а саме:

$$V_{XC}[\rho(r), r] = V_X^{KS}(r) \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} - 0.0333 \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (2.8a)$$

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

$c$  – швидкість світла,

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

$$V_X^{KS}(r) = -(e^2 / \pi)[3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}. \quad (2.8b)$$

Таким чином, в нульовому наближенні релятивістської ТЗ потенціал  $U_{MF}(r_i | b) + V_{XC}(r_i)$  в нашому методі є сума потенціалів (2.7) та (2.8), до того ж єдиний параметр потенціалу, параметр  $b$ , буде визначений далі на основі ідеології відомої КЕД процедури Glushkov-Ivanov [12]. При цьому, суттєво відрізняючись від оригінальної версії, а також багаточисельних інших методик (див., напр., [38, 124, 125, 131, 132, 214-219]), що базуються на процедурі [12], алго-

ритм мінімізації калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційні ширини з початку включає повний потенціал (2.7) та (2.8) (див. далі).

В нульовому наближенні релятивістської ТЗ з ab initio МР стандартною є задача розв'язання релятивістського рівняння Дірака для визначення одно-QR енергій та релятивістських хвильових функцій, які записуються у вигляді відомого біспінору:

$$\Psi_{jlm}(r) = \begin{pmatrix} \Phi_{jlm}(r) \\ \chi_{jlm}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm}(r) \\ G(r)\Omega_{jlm}(r) \end{pmatrix}, \quad (2.9a)$$

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

$$l = j \pm 1/2, \quad l' = 2j - 1.$$

Радіальні компоненти (велика та мала) функції Дірака  $F(r)$  і  $G(r)$  задовольняють системі відомих диференціальних рівнянь, які відповідно до нашого підходу приймуть такий вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial r} + (1 + \chi) \frac{F}{r} - (\varepsilon + m - [U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)])G &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial r} + (1 - \chi) \frac{G}{r} + (\varepsilon - m - [U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)])F &= 0 \end{aligned}, \quad (2.9b)$$

де  $F$  і  $G$  – велика та мала компоненти,  $\chi$  - квантове число Дірака (стала тонкої структури  $\alpha = 1$ ).

Очевидно, вид радіальних функцій Дірака, тобто розв'язків (2.9б) визначається виключно потенціалом  $[U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)]$ , що дуже важливо, так як останній має мати правильні асимптотики та враховувати ефект суттєво некулонівського групування рівнів, який є принципово важливим в спектроскопії важких рідбергівських атомних систем.

Відомі чисельні труднощі при інтегруванні (2.9) в області  $r \rightarrow 0$  виключаються відомим прийомом. А саме (див. [3, 271]) при великих  $\chi$  функції  $F$  і  $G$  швидко змінюються в нулі, тому звичайно відокремлюється головна степенева

залежність при малих  $r$ :  $f = Fr^{1-|\chi|}$ ,  $g = Gr^{1-|\chi|}$ , і прикінцева система діраківських рівнянь приймає в нашому підході такий вигляд:

$$\begin{aligned} f' &= -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha Z[U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)]g - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g \\ g' &= (\chi - |\chi|)g/r - \alpha Z[U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)]f + \alpha ZE_{n\chi}f \quad , \end{aligned} \quad (2.10a)$$

де  $E_{n\chi}$  – одноелектронна енергія.

Звичайні граничні умови визначаються першими членами розкладу функцій у ряд Тейлору, тобто [3, 271]:

$$\begin{aligned} g &= (V(0) - E_{n\chi})r\alpha Z/(2\chi + 1); \quad \text{при } \chi < 0 \\ f &= 1 \\ f &= (V(0) - E_{n\chi} - 2/\alpha^2 Z^2)\alpha Z; \quad \text{при } \chi > 0 \\ g &= 1. \end{aligned} \quad (2.10б)$$

Стандартна умова  $f, g \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$  визначає квантовані енергії  $E$ .

### 2.2.2. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: узагальнена Glushkov-Ivanov версія

Для обчислення головних спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів ми стартуємо з релятивістського калібрувально-інваріантного енергетичного формалізму Іванова-Іванової-Глушкова [3, 4, 7, 9-13, 131, 132] для складних багато електронних атомів. За визначенням (див. [3, 11]) ймовірність радіаційного переходу (розпаду)  $\Gamma$  пов'язана з уявною частиною зсуву енергії електронної системи через (2.2). Можна показати, що у другому порядку КЕД ТЗ уявна частина електронної енергії рідбергівського атому пов'язана з

матричним оператором радіаційного переходу (нижче на відміну від [3, 11] всі визначення даються в означеннях нашої релятивістської схеми):

$$V_{ijkl} = \int \int d^3 r_1 d^3 r_2 \varphi_i^{EFMP*}(\mathbf{r}_1) \varphi_j^{EFMP*}(\mathbf{r}_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \cdot (1 - \alpha_1 \alpha_2) \varphi_k^{EFMP}(\mathbf{r}_2) \varphi_l^{EFMP}(\mathbf{r}_1), \quad (2.11a)$$

де  $\varphi_j^{EFMP}$  – релятивістські біспінори, базис яких генерується у нульовому наближенні нашої ТЗ (дивись вище). Варто нагадати, що у виразі (2.11a) окремі члени відповідають різним парціальним каналам. Відзначимо, що вираз (2.11a) є багатомірним інтегралом. Техніка роботи з такими об'єктами на сьогодні добре розроблена. Зокрема, згідно з [3-5, 180, 181], уявна частина оператора міжелектронної взаємодії і відповідно матричного елемента оператора радіаційних переходів (редукованого матричного елемента) з урахуванням кутової симетрії задачі розкладається у ряд по функціям Бесселя першого роду,

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\cos \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}), \quad (2.11б)$$

де  $(\lambda) = 2\lambda + 1$ , і далі підстановка (2.11б) дає наступний відомий вираз для матричного елемента оператора переходу:

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]^{1/2} \sum_{\lambda\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \text{Im} Q_{\lambda}(1234), \quad (2.11в)$$

де величина  $Q_{\lambda}$  визначається звичайною сумою:

$$Q_{\lambda} = Q_{\lambda}^{\text{Quil}} + Q_{\lambda}^{\text{Br}}, \quad (2.12)$$

з кулонівською ( $Q_{\lambda}^{\text{Quil}} - \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}}$ ) та брейтівською ( $Q_{\lambda}^{\text{Br}} - \frac{\sin|\omega|r_{12}\alpha_1\alpha_2}{r_{12}}$ ) частинами.

Величина  $Q_{\lambda}^{\text{Quil}}$  в (2.12) визначається через радіальні інтеграли  $R_{\lambda}$  і кутові коефіцієнти  $S_{\lambda}$  [3], які мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \text{Im}Q_\lambda^{\text{Cul}} &= \frac{1}{Z} \text{Im}\{R_l^{\text{EFMP}}(1243)S_\lambda(1243) + R_l^{\text{EFMP}}(\tilde{1}24\tilde{3})S_\lambda(\tilde{1}24\tilde{3}) + \\ &+ R_l^{\text{EFMP}}(1\tilde{2}\tilde{4}3)S_\lambda(1\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l^{\text{EFMP}}(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})S_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})\} \end{aligned} \quad (2.13a)$$

$$R_\lambda^{\text{EFMP}}(1\tilde{2}\tilde{4}3) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1^{\text{EFMP}}(r_1) f_3^{\text{EFMP}}(r_1) g_2^{\text{EFMP}}(r_2) g_4^{\text{EFMP}}(r_2) Z_\lambda^{(1)}(r_<) Z_\lambda^{(1)}(r_>) \quad (2.13б)$$

$$S_\lambda(1243) = \{\lambda l_1 l_3\} \{\lambda l_2 l_4\} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.13в)$$

де  $\{\lambda l_1 l_3\}$  означає, що  $\lambda + l_1 + l_3$  – парне число, означення 1(2, 3, 4) відповідає великій компоненті  $f$  діраковської функції,  $\tilde{1}(\tilde{2}, \tilde{3}, \tilde{4})$  – малій компоненті  $g$ , функція  $Z$  визначається через бesselівські функції (див. [3, 11]):

$$Z_\lambda^{(1)} = \left[ \frac{2}{|\omega_{13}| \alpha Z} \right]^{\lambda+1/2} \frac{J_{\lambda+1/2}(\alpha |\omega_{13}| r)}{r^\lambda \Gamma(\lambda + 3/2)}. \quad (2.13г)$$

Аналогічним чином визначається і брейтівська частина  $Q_\lambda^{\text{Br}} = Q_{\lambda, \lambda-1}^{\text{Br}} + Q_{\lambda, \lambda}^{\text{Br}} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{\text{Br}}$  в матричних елементах оператора переходу, а саме:

$$\begin{aligned} \text{Im}Q_\lambda^{\text{Br}} &= \frac{1}{Z} \text{Im}\{R_l^{\text{EFMP}}(12\tilde{4}\tilde{3})S_\lambda^l(12\tilde{4}\tilde{3}) + R_l^{\text{EFMP}}(\tilde{1}\tilde{2}43)S_\lambda^l(1243) + \\ &+ R_l^{\text{EFMP}}(\tilde{1}2\tilde{4}3)S_\lambda^l(\tilde{1}2\tilde{4}3) + R_l^{\text{EFMP}}(1\tilde{2}4\tilde{3})S_\lambda^l(1\tilde{2}4\tilde{3})\} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Докладні вирази для всіх величин в (2.14) наведені, напр., в [3]. Далі повна ймовірність  $\Gamma$   $\lambda$ -польного переходу стандартно розбивається на електричну

$P_\lambda^E$  та магнітну  $P_\lambda^M$  частини [3]:

$$\begin{aligned} P_\lambda^E(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1)Q_\lambda^E(\gamma\delta; \gamma\delta) & Q_\lambda^E &= Q_\lambda^{\text{Cul}} + Q_{\lambda, \lambda-1}^{\text{Br}} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{\text{Br}} \\ P_\lambda^M(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1)Q_\lambda^M(\gamma\delta; \gamma\delta) & Q_\lambda^M &= Q_{\lambda, \lambda}^{\text{Br}}. \end{aligned} \quad (2.15)$$



Обчислення імовірностей переходів по вище приведеним формулам виконується з декотрими модифікаціями на основі відповідних блоків РС атомно-ядерного комплексу “Superatom-ISAN” [3-13, 209-214, 237-240].

### 2.2.3. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: Урахування обмінно-кореляційних ефектів та мінімізація калібрувальних-неінваріантних внесків

Фундаментально важливими моментами розробляємого нами на основі енергетичного підходу (Glushkov-Ivanov версія [3, 4, 11]) і релятивістського методу ab initio МР з урахуванням ефекту суттєво некулонівського групування рівнів нового підходу до опису важких рідбергівських атомних систем є, поперше, прецизійне урахування багаточастинкових ОК ефектів другого та вищих порядків ТЗ (зокрема, добре якісно відомі ефекти поляризації зовнішніх квазічастинок з багатоелектронним атомним остовом  $\Delta E_{pol}$ , екранування зовнішніх квазічастинок одна одною  $\Delta E_{scr}$ , їх інтерференція, тиск континууму, що особливо важливо для рідбергівських станів тощо). Справа у тому, що переважна частина одноквазічастинкових ОК ефектів враховується за допомогою потенціалів (2.7)-(2.8), але ці потенціали принципово не спроможні враховувати багаточастинкові (насамперед, двочастинкові) ефекти. Для вирішення цієї проблеми в нашій теорії ми використовуємо відомий релятивістський 2-QP поляризаційний оператор  $V_{pol}(r_1, r_2)$ , [3]:

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

$$\left\langle (\rho_c^{(0)})^{1/3} \right\rangle = \int dr (\rho_c^{(0)}(r))^{1/3} \theta(r), \quad \theta(r) = \left\{ 1 + \left[ 3\pi^2 \cdot \rho_c^{(0)}(r) \right]^{2/3} / c^2 \right\}^{1/2}, \quad (2.16)$$

де X – чисельний коефіцієнт. Поправка на ефект екранування врахована шля-

хом (використана процедура [3]) введення до гамільтоніану (2.6) *ab initio* екранувального ефективного потенціалу, який має вигляд:

$$W_{scr}(r) = \int dr' |\varphi_j^{EFMP}(r')|^2 / r_>, \quad (2.17)$$

де  $r_>$  – найбільше з  $r$  і  $r'$ .

Додавання екранувального потенціалу в гамільтоніан (2.6) дозволяє врахувати внески так званих діаграм сходового типу всіх порядків ТЗ (дивись докладніше питання діаграматизації рядів ТЗ в [3]). На закінчення цього аспекту теорії також відзначимо, що для спрощення всієї обчислювальної процедури методу тут ми використали оригінальний прийом, пов'язаний з використанням воднеподібного наближення в (2.17). По-друге, зрозуміло, що потенціал (2.17) в операторі збурення послідовної релятивістської ТЗ віднімається від потенціалу (2.4). По-третє, у прецизійних розрахунках амплітуд радіаційних переходів (тобто сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів, зворотної до них величини - часу життя стану) оператор (2.16), який враховує багаточастинкові ОК ефекти додається до оператора (2.11) в загальний матричний елемент радіаційного переходу.

Технічні аспекти обчислення матричних елементів прямого поляризаційного оператора (2.16) і аналогічного обмінного добре відомі й фактично зводяться до обчислення інтегралів виду [3]:

$$R_\lambda^d = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 r_1^2 r_2^2 r_3^2 \rho_1(r_1) \tilde{u}_\lambda(r_1 r_3) \rho_c^{1/3}(r_3) \tilde{u}_\lambda(r_3 r_2) \rho_2(r_2). \quad (2.18a)$$

В межах методу диференціальних рівнянь Глушкова-Іванова-Іванової [11, 12] обчислення (2.18a) з урахуванням  $R^d = \lim_{r \rightarrow \infty} Y(r)$  зводиться до розв'язання системи диференціальних рівнянь з нульовими граничними умовами:

$$\begin{aligned}
Y'_1 &= (\rho_1 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_1)/r; \\
Y'_2 &= (\rho_2 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_2)/r; \\
Y'_3 &= (\rho_c^{1/3} r^2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(1)} - (2\lambda + 1)Y_3)/r; \\
Y'_4 &= (\rho_2 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_4)/r; \\
Y'_5 &= (\rho_1 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_1 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_5)/r; \\
Y'(r) &= (\rho_1 r^2 Y_4 + \rho_2 r^2 Y_5 + \rho_c^{1/3} r^2 Y_2 Z_\lambda^{(2)})Z_\lambda^{(2)}.
\end{aligned} \tag{2.186}$$

Нарешті, ще одно із найголовніших питань нової релятивістської теорії для важких рідбергівських атомів – це оптимізація нульового наближення з метою максимального виконання принципу калібрувальної інваріантності в теорії обчислення радіаційних переходів та розпадів, тобто мова йде про побудову оптимізованого базису 1QR хвильових функцій (підр.2.2.1).

Для цієї мети ми розвиваємо схему, яка узагальнює відому КЕД процедуру мінімізації внесків кореляційних діаграм четвертого та вище порядків КЕД ТЗ, що пов'язані з обміном подовжніми фотонами в уявну частину  $\Delta E$  (Glushkov-Ivanov, Phys.Lett.A, 1992).

Цей внесок визначається матричними елементами поляризаційного оператора  $V_{pol}(r_1, r_2)$ :

$$\text{Im } E_{inv}(\alpha - s | A_d) = \sum \text{Im } E(\alpha - s | A) \sim G\{ \langle V_{pol}(r_1, r_2) \rangle \}, \tag{2.19}$$

де  $V_{pol}(r_1, r_2)$  визначається формулою (2.16). Методичні та чисельні аспекти процедури мінімізації функціоналу (2.19) докладно викладені в [3, 11, 12], тому далі ми обмежимося лише коротким визначенням оригінальних моментів нашого методу. При мінімізації функціоналу (2.19) визначається поправка першого порядку до функцій-розв'язків релятивістських рівнянь Дірака (2.15) з повним 1QR потенціалом, який, на відміну від оригінальної версії та багаточисельних узагальнень (див., напр., [38, 124, 125, 131, 132, 214-219]), в нашому випадку містить  $[U_{MF}(r_i | b) + V_{XC}(r_i)]$ .

Шукана поправка є фактично біспинором виду:

$$\Psi_{\mu m}^{EFMP} = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \mu_i m_i} \langle n_i \mu_i m_i | U | n \mu m \rangle / (\varepsilon_{n_i \mu_i m_i} - \varepsilon) \quad (2.20a)$$

(тут  $(n \mu m)$  – квантові числа 1-QP станів,  $\varepsilon$  – енергетичний параметр) компоненти якого задовольняють новій системі рівнянь:

$$G' / \alpha Z + (1 - \mu)G / \alpha Z r + A_+ F = \delta V_{MF} f_{n_i \mu_i}, \quad (2.20б)$$

$$- F' / \alpha Z + (1 + \mu_i)F / \alpha Z r + A_- G = \delta V_{MF} g_{n_i \mu_i}, \quad (2.20в)$$

де  $\delta V_{MF}$  визначається згідно зі схемою:  $\delta V_{MF} \rightarrow \delta V_{MF} \sim [\delta U_{MF}(r_i | b) + \delta V_{XC}(r_i)]$ , а функції  $A_{\pm}$  визначаються виразом:  $A_{\pm} = V_{MF}(r) \pm 1/(\alpha Z)^2 - \varepsilon$ . В результаті реалізації описаної схеми дозволяє дотримуватися принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні радіаційних матричних елементів на основі нашого ab initio методу релятивістського МР та релятивістського енергетичного підходу (EF-RMP), що, безумовно, переважним чином принципово відокремлює наш новий метод в спектроскопії важких релятивістських атомів від всіх існуючих версій й, насамперед, найбільш популярних, що базуються на методі ДФ або НКД, або квазікласичних моделях. Нарешті відзначимо, що для рішення повної системи диференціальних рівнянь, що включає систему діраківських рівнянь (2.10), які розв'язувалися на основі методу Рунге-Кутта, рівняння для модифікованих функцій Беселя, системи рівнянь для обчислення поляризаційних матричних елементів тощо, з декотрими додатковими модифікаціями використано РС атомно-ядерний комплекс “Superatom-ISAN” [3-13, 209-214, 237-240].

### 2.3. Висновки до розділу 2

Викладено принципово новий в спектроскопії релятивістських важких атомних систем квантово-динамічний підхід до опису енергетичних та спектроскопічних властивостей (енергії рівнів, сили осциляторів, редуковані матричні елементи радіаційних E1 переходів, часи життя) важких рідбергівських атомів у вільному стані. Новий підхід в спектроскопії рідбергівських атомів базується на *ab initio* релятивістському методі MP (RMP) в межах енергетичного підходу EF (S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу) з оптимізацією базисів релятивістських орбіталей, безумовним дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та коректним прецизійним урахуванням ОК ефектів на основі послідовних багаточастинкових функціоналів електронної густини, а також урахуванням ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомах, який досі в достатній мірі принципово не враховано ні в одній моделі або методі, що використовуються у спектроскопії важких рідбергівських атомів.

### РОЗДІЛ 3

## РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ: НОВІ ДАНІ

### 3.1. Вступні зауваження

У цьому підрозділі ми приведемо нові результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик (енергетичні спектри, імовірності та сили осциляторів радіаційних переходів, часи життя, імовірності іонізації тощо) важких рідбергівських атомів у вільному стані на основі нової версії енергетичного підходу з використанням релятивістського методу неемпіричного модельного потенціалу, нової вперше розробленої релятивістської оптимальної версії багаточатинкової ТЗ з нульовим наближенням неемпіричного модельного потенціалу та ефективним прецизійним урахуванням ОК ефектів, в т.ч. ефекту некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму.

На основі нового спектроскопічного підходу проведено масові тестові розрахунки енергій рівнів, радіаційних ширин (амплітуд переходів) для переходів  $n'l_{1/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах важких Li-подібних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$  (зокрема, іонів  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Kr}^{33+}$ ,  $\text{Rb}^{34+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ ,  $\text{Mo}^{39+}$ ,  $\text{Cs}^{52+}$ ,  $\text{Tm}^{66+}$ ,  $\text{Fr}^{67+}$ ,  $\text{Fr}^{84+}$ ), низько розташованих переходів  $n'l_j - n'l'j'$  ( $n=5-10$ ,  $l=0-4$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах атомів Rb, Cs, Fr.

Показано, що новий підхід у порівнянні з експериментом переважає по точності як спрощені методи типу НКД, квазікласичні моделі, так і методи типу РХФ та ДФ та ін. за рахунок оптимізації рідбергівських орбіталей, прецизійного урахування ОК ефектів, в т.ч. ефекту некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму.

### 3.2. Тестовий розрахунок ймовірностей та сил осциляторів у важких Li-подібних багатозарядних іонах:

Експериментальні та тестові теоретичні дані

Нижче в якості тесту наведені розраховані нами енергії рівнів та сили осциляторів для низки переходів  $n'l_{1/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$  (зокрема, іонів  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Kr}^{33+}$ ,  $\text{Rb}^{34+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ ,  $\text{Mo}^{39+}$ ,  $\text{Cs}^{52+}$ ,  $\text{Tm}^{66+}$ ,  $\text{Fr}^{67+}$ ,  $\text{Fr}^{84+}$ ).

В таблиці 3.1 представлені теоретичні та експериментальні значення енергій рівнів –  $E_n$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) для Li- подібного іону  $\text{Ca}^{17+}$ : теорія – ДФ-НКД [36], QDA и DKS [37, 38], наші дані – EF-RMP та експеримент – [15]. Порівняння наведених даних указує на те, що значення енергій рівнів, отриманих на основі різних методів, узгоджуються один з одним, однак у порівнянні з експериментом більш точні результати забезпечує метод EF-RMP, потім QDA і DKS й, нарешті, метод ДФ з використанням НКД.

Таблиця 3.1 – Теоретичні та експериментальні значення рівнів енергії –  $E_n$ , (ат.од.) іону  $\text{Ca}^{17+}$ : теорія – ДФ-НКД [36], QDA, DKS [37, 38], експ. – [15], EF-RMP – наші дані

Рівень	ДФ-НКД [36]	QDA [38]	DKS [38]	EF-RMP, наші дані	Ехр. [15]
$2s_{1/2}$	42.56	42.540	42.524	42.523	42.523
$3s_{1/2}$	18.59	18.521	18.482	18.480	18.479
$2p_{1/2}$	41.23	41.216	41.201	41.201	41.200
$2p_{3/2}$	41.03	41.022	41.012	41.011	41.011
$3p_{1/2}$	18.23	18.216	18.201	18.200	18.201
$3p_{3/2}$	18.17	18.156	18.141	18.141	18.141
$6p_{1/2}$	3.530	3.525	3.518	3.514	3.513
$7p_{1/2}$	3.325	3.323	3.318	3.316	3.316
$7p_{3/2}$	3.321	3.318	3.315	3.258	3.256

В таблицях 3.2, 3.3 представлені отримані нами теоретичні значення сил осциляторів для переходів  $2s_{1/2} - np_j$  ( $n=3-12, j=1/2$ ) в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів, у тому числі окремо  $Ca^{17+}$ ,  $Zr^{37+}$ , а також аналогічні дані, отримані на основі емпіричної версії НКД і ДФ дані Zilitis [36], дані обчислень методом RMP [22] (для  $Zr^{37+}$  дані відсутні), експериментальні дані [14,17,18] Martin-Weiss. По-перше, відзначимо результати для іону  $Zr^{37+}$ , для якого експериментальні дані відсутні. По-друге, аналіз показує, що у випадку досліджених Li-подібних іонів (важливо, що їх остов є малоелектронним) наші результати, а також дані, отримані на основі наближень типу НКД та DKS досить добре узгоджуються з експериментальними, при чому із збільшенням головного квантового числа точність результатів методу ДФ знижується. В таблицях 3.4 та 3.5 наведені розраховані нами тестові сили осциляторів переходів  $2s_{1/2} - 2p_{1/2,3/2}$  в спектрах низки Li-подібних іонів, зокрема,  $Ca^{17+}$ ,  $Kr^{33+}$ ,  $Rb^{34+}$ ,  $Zr^{37+}$ ,  $Mo^{39+}$ ,  $Cs^{52+}$ ,  $Tm^{66+}$ ,  $Yb^{67+}$ ,  $Fr^{84+}$ .

Таблиця 3.2 – Значення сил осциляторів для переходів  $2s_{1/2} - np_{1/2}$  в спектрі  $Ca^{17+}$

Переход	ПКД [36]	ДФ [36]	RMBP [21]	QDA [38]	DKS [38]	EF-RMP	Exp. [17,18]
$2s_{1/2}-3p_{1/2}$	–	–	0.126	0.120	0.122	0.121	0.123
$2s_{1/2}-3p_{3/2}$	–	–	0.246	0.237	0.243	0.241	0.241
$2s_{1/2}-4p_{1/2}$	–	–	–	0.028	0.029	0.027	–
$2s_{1/2}-8p_{1/2}$	2.54 <sup>a</sup>	2.53 <sup>a</sup>	–	2.52 <sup>a</sup>	2.55 <sup>a</sup>	2.53 <sup>a</sup>	–
$2s_{1/2}-10p_{1/2}$	1.24 <sup>a</sup>	1.24 <sup>a</sup>	–	1.24 <sup>a</sup>	1.25 <sup>a</sup>	1.23 <sup>a</sup>	–
$2s_{1/2}-12p_{1/2}$	0.70 <sup>a</sup>	0.698 <sup>a</sup>	–	0.70 <sup>a</sup>	0.71 <sup>a</sup>	0.70 <sup>a</sup>	–
$2s_{1/2}-13p_{1/2}$	0.546 <sup>a</sup>	0.54 <sup>a</sup>	–	0.55 <sup>a</sup>	0.55 <sup>a</sup>	0.54 <sup>a</sup>	–
$2s_{1/2}-16p_{1/2}$	-	-	-	-	-	0.17 <sup>a</sup>	-

Прим.: <sup>a</sup>( $10^{-3}gf$ );  $2s_{1/2}-3p_{1/2} gf=0.121$  (КЭД-ТВ) [9].



Таблиця 3.3 – Значення сил осциляторів ( $10^2 gf$ )  
для переходів  $2s_{1/2} - np_{1/2}$  в  $Zr^{37+}$

Переход	ПКД	ДФ	QDA	DKS	EF-RMP
$2s_{1/2}-3p_{1/2}$	13.7	13.3	13.59	13.68	13.62
$-10p_{1/2}$	0.126	0.124	0.124	0.125	0.124
$-16p_{1/2}$	0.0291	0.0285	0.0284	0.0287	0.0284
$-20p_{1/2}$	0.0147	0.0143	0.0144	0.0144	0.0143
$-24p_{1/2}$	-	-	-	-	0.0016
$-25p_{1/2}$	-	-	-	-	0.0013

Для порівняння наведені альтернативні ДФ дані Zilitis [36], дані ab initio R-матричних обчислень [21], дані QDA, DKS Tkach [38], а також експериментальні дані Martin-Weiss [14,17,18].

Таблиця 3.4 – Сили осциляторів переходу  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  в спектрах ряду Li-подібних іонів: експеримент – Exp. [14,17,18]; теорія – ДФ [36], R-матричний метод [21]; QDA, MP [38], EF-RMP – наші дані

Мет.	ДФ	R-матр.	QDA	DKS	EF-RMP	Exp.
Іон	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$
$Ca^{17+}$	0.0234	0.0259 0.024	0.0256	0.0262	0.0261	0.026
$Kr^{33+}$	-	-	0.0127	0.0132	0.0131	0.013
$Rb^{34+}$	-	-	-	-	0.0132	-
$Zr^{37+}$	0.0114	-	0.0113	0.0118	0.0118	-
$Mo^{39+}$	-	-	0.0102	0.0107	0.0109	0.011
$Cs^{52+}$	-	-	-	-	0.0085	-
$Tm^{66+}$	-	-	0.0068	0.0071	0.0071	-
$Yb^{67+}$	0.0067	-	0.0066	0.0069	0.0069	-
$Fr^{84+}$	-	-	-	-	0.0037	-

Таблиця 3.5 – Сили осциляторів переходу  $2s_{1/2} - 2p_{3/2}$  в спектрах ряду Li-подібних іонів: експеримент – Exp. [14,17,18]; теорія – ДФ [36], R-матричний метод [21]; QDA, MP [38], EA-EMP– наші дані

Мет.	ДФ	R-матр.	QDA	EF-RMP	Exp.
Іон	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$
Ca <sup>17+</sup>	0.0542	0.0575	0.0556	0.0578	0.0577
Kr <sup>33+</sup>	–	–	0.0491	0.0514	0.013
Rb <sup>34+</sup>	–	–		0.0513	–
Zr <sup>37+</sup>	0.0543	–	0.0519	0.0540	–
Mo <sup>39+</sup>	–		0.0537	0.0558	0.056
Cs <sup>52+</sup>	–	–	–	0.0761	–
Tm <sup>66+</sup>	–	–	0.1104	0.1140	–
Yb <sup>67+</sup>	0.1170	–	0.1132	0.1167	–
Fr <sup>84+</sup>	–	–	–	0.1386	–

Важливий момент – це порівняння результатів обчислення  $gf$  на основі нашої теорії при використанні калібровок Кулону та Бабушкіна (тобто різниця між значеннями сили осциляторів, обчисленими при виборі для оператора переходу форми “довжини” і “швидкості” в межах стандартного амплітудного формалізму); напр., для переходу  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  в Ca<sup>17+</sup> відповідні значення: 0.0578 та 0.0577, тобто калібрувально-неінваріантний внесок складає ~0,17% , в той час у для ДФ теорії відповідна величина складає до 20-30%.

Очевидна причина – використання в нашій теорії фактично потимізованих базисів релятивістських орбіталей та коректне урахування обмінно-кореляційних ефектів. Також відзначимо, що для іону Kr<sup>33+</sup> у відомих довідкових виданнях [14,17,18] наведені, на наш погляд, помилкові дані по  $gf$ . Важливо звернути увагу на відмінне узгодження результатів нашої неемпіричної теорії з експериментом, але, звичайно, це апріорі не може гарантувати аналогічне узгодження для важких рідбергівських атомів із складним багатоелектронним остовом. Як підкреслювалося вище, такі особливо

у випадку малоелектронних атомів ефективні методи як НКД та МР можуть давати у випадку важких багатоелектронних атомів результати невисокої точності, особливо по  $gf$ .

### 3.3. Результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик релятивістських рідбергівських атомних систем: Rb, Cs, Fr

#### 3.3.1. Енергії рівнів, ймовірності та радіаційні матричні елементи для переходів у спектрах важких багатоелектронних атомів: Rb, Cs, Fr

В таблиці 3.6 ми наводимо результати обчислення (тест теорії) в межах нашої теорії (EF-RMP) теоретичних значень (в  $\text{cm}^{-1}$ ) одно-електронних  $ns_{1/2}$ ,  $np_{1/2}$  енергій (іонізації) Rb, Cs. Для порівняння у цій ж таблиці надані експериментальні (exp., [14, 15, 26, 27]) і альтернативні теоретичні дані: теорія – coupled cluster метод (CC); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням ; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації), QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок і метод DKS [16,26-29,38].

Аналіз наведених у таблиці 3.6 даних дозволяє заключити, що у середньому найбільш точні дані одержані у на основі методів CC, DKS та EF-RMP (наш підхід), причому мова йде про спектроскопічну точність результатів. Для ряду станів досить точні дані дає й дуже популярний за теперішнього часу (див. [29]), метод Safronova et al ТЗДФ<sup>SD</sup>.

Досить добре узгодження результатів нашої теорії та експериментальних даних ми пов'язуємо з коректним досить повним урахуванням ОК поправок (фактично збудовано оптимізоване нульове ab initio МР наближення). Точність інших методів є більш нижчою саме через використання неоптимізованих базисів орбіталей (фактично не виконаний принцип калібрувальної інваріантності) та не повне урахування складних ОК ефектів.

Таблиця 3.6 – Теоретичні та експериментальні значення (в  $\text{cm}^{-1}$ ) одно-електронних  $ns_{1/2}$ ,  $np_{1/2}$  енергій (іонізації) Rb, Cs: exp. - [14, 15, 26, 27]), теорія – coupled cluster метод (CC); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації), QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок і метод DKS [16,26-29,38]; EF-RMP – наші дані

<b>Rb</b>	<b>5s<sub>1/2</sub></b>	<b>6s<sub>1/2</sub></b>	<b>7s<sub>1/2</sub></b>	<b>8s<sub>1/2</sub></b>
ТЗДФ <sup>SD</sup>	33649	13527	7365	4637
QDA	33672	13522	7346	4624
DKS	33684	13539	7372	4639
CC	33721	13564	-	-
EF-RMP	33684	13548	7368	4640
Exp.	33691	13557	7380	4644
<b>Rb</b>	<b>5p<sub>1/2</sub></b>	<b>6p<sub>1/2</sub></b>	<b>7p<sub>1/2</sub></b>	<b>8p<sub>1/2</sub></b>
ТЗДФ <sup>SD</sup>	21111	9969	5852	3854
QDA	21001	9961	5840	3842
DKS	21110	9970	5854	3854
CC	21117	9857	-	-
EF-RMP	21114	9975	5854	3855
Exp.	21112	9976	5856	3856
<b>Cs</b>	<b>6s<sub>1/2</sub></b>	<b>7s<sub>1/2</sub></b>	<b>8s<sub>1/2</sub></b>	<b>9s<sub>1/2</sub></b>
ТЗДФ <sup>SD</sup>	31262	12801	7060	4479
ТЗ-РХФ	31305	12765	-	-
QDA	31284	12798	7054	4471
DKS	31388	12832	7069	4480
CC	31443	12876	-	-
EF-RMP	31395	12868	7076	4488
Exp.	31407	12871	7089	4496
<b>Cs</b>	<b>6p<sub>1/2</sub></b>	<b>7p<sub>1/2</sub></b>	<b>8p<sub>1/2</sub></b>	<b>9p<sub>1/2</sub></b>
ТЗДФ <sup>SD</sup>	20204	9621	5687	3760
QDA	20196	9613	5674	3749
DKS	20212	9624	5688	3762
CC	20217	9549	-	-
EF-RMP	20218	9633	5689	3767
Exp.	20228	9641	5698	3769

З іншого боку, як відомо, в атомній спектроскопії більшість існуючих підходів дозволяє описувати стандартні енергетичні характеристики (енергії рівнів, іонізації; тут ключовим є питання використання максимально реалістичних гамільтоніанів системи, відповідних потенціалів) значно краще, ніж характеристики, точність яких залежить від коректності базисів релятивістських орбіталей.

Очевидно, мова йде про такі характеристики як ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні ширини, ширини резонансів, перерізи збудження та іонізації тощо. Питання правильного та повного урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ОК ефектів потребує явного використання відповідних багаточастинкових ОК функціоналів густини, або відповідного формалізму ТЗ.

В таблиці 3.7 наведені теоретичні (тестові розрахунки) та експериментальні значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів головних серій в спектрі атомів Rb, Cs, Fr: експеримент – Exp; теорія – QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-корреляційних (ОК) поправок by Tkach; метод DKS (version by Tkach); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням by Dzuba-Flambaum; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ “0” наближенням (враховані SD конфігурації) by Safronova et al; EF-RMP – наші дані; [9,14-17, 26-29, 38].

Аналогічно як й вище, докладний аналіз та порівняння отриманих нами теоретичних даних з відповідними експериментальними даними показує, що досить добре узгодження результатів нашої теорії та даних експериментальних вимірювань очевидно можна пов'язати з акуратним, коректним досить повним урахуванням обмінно-кореляційних ОК поправок (фактично збудовано оптимізоване нульове *ab initio* МР наближення). Точність інших методів є більш нижчою саме через використання неоптимізованих базисів орбіталей (фактично не виконаний принцип калібрувальної інваріантності) та не повне урахування складних ОК ефектів.

Таблиця 3.7 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів головних серій в спектрах важких лужних атомів Rb, Cs, Fr: експеримент – Ехр; теорія – QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок; метод DKS; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням ; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ “0” наближенням (враховані SD конфігурації), EF-RMP – наші дані [14-17, 26-29, 38]

Атом Перех. Метод	Rb 5p <sub>1/2</sub> -5s <sub>1/2</sub>	Rb 5p <sub>3/2</sub> -5s <sub>1/2</sub>	Cs 6p <sub>1/2</sub> -6s <sub>1/2</sub>	Cs 6p <sub>3/2</sub> -6s <sub>1/2</sub>	Fr 7p <sub>1/2</sub> -7s <sub>1/2</sub>	Fr 7p <sub>3/2</sub> -7s <sub>1/2</sub>
ТЗРХФ	3.209	5.810	3.296	6.257	-	-
ТЗДФ <sup>SD</sup>	3.221	5.956	3.478	6.298	3.256	5.851
QDA	3.032	5.720	3.282	5.936	-	-
DKS	3.2294	5.972	3.4852	6.317	-	-
EF-RMP	3.230 3.231	5.974 5.975	3.488 3.489	6.322 6.323	3.272 3.273	5.891 5.892
Ехр.	3.231(3)	5.977(4)	3.4890(6)	6.3238(7)	3.277(8)	5.898(15)

Прим. Rb (5p<sub>1/2</sub>-5s<sub>1/2</sub>: 3.226; 5p<sub>3/2</sub>-5s<sub>1/2</sub>: 5.971 (КЕД-ТЗ) [9]);  
Cs (6p<sub>1/2</sub>-6s<sub>1/2</sub>: 3.485; 6p<sub>3/2</sub>-6s<sub>1/2</sub>: 6.318 (КЕД-ТЗ) [9]).

В таблиці 3.8 ми наводимо експериментальні та теоретичні (тестовий розрахунок ) значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі атому Cs: експериментальні дані – Ехр; теоретичні дані: QDA – узагальнене НКД, DKS – версія методу ДКШ Tkach; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані цього методу з компіляційною поправкою (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), EF-RMP – наші дані [9,14-17, 26-29, 38].

Таблиця 3.8 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі Cs: експеримент – Ехр; теорія – QDA – узагальнене НКД, DKS – версія методу ДКШ Tkach [38]; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані цього методу з компіляційною поправкою (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), КЕД ТЗ Glushkov et al (див. прим.); EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-29, 38]

Перех.	ТЗ- ДФ <sup>SD</sup>	ТЗс- ДФ <sup>SD</sup>	ТЗ- ДФ	ТЗ- РХФ	QDA	DKS	EF-RMP	Ехр.
6p <sub>1/2</sub> -6s	3.482	3.535	3.510	-	3.282	3.486	3.489	3.4890(7)
6p <sub>3/2</sub> -6s	6.304	6.382	6.347	-	5.936	6.320	6.323	6.3238(7)
7p <sub>1/2</sub> -6s	0.297	0.279	0.280	0.2825	0.272	0.283	0.283	0.284(2)
7p <sub>3/2</sub> -6s	0.601	0.576	0.576	0.582	0.557	0.582	0.583	0.583(9)
8p <sub>1/2</sub> -6s	0.091	0.081	0.078	-	0.077	0.087	0.088	-
8p <sub>3/2</sub> -6s	0.232	0.218	0.214	-	0.212	0.225	0.228	-
6p <sub>1/2</sub> -7s	3.196	3.243	3.236	3.237	3.062	3.231	3.234	3.233(22)
6p <sub>3/2</sub> -7s	6.425	6.479	6.470	6.472	6.219	6.478	6.480	6.479(31)
7p <sub>1/2</sub> -7s	10.254	10.310	10.289	10.285	9.906	10.308	10.309	10.309(15)
7p <sub>3/2</sub> -7s	13.238	13.323	13.293	13.286	13.675	13.322	13.323	13.325(20)

В таблиці 3.9 ми наводимо експериментальні та теоретичні значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі атому Fг: експериментальні дані – Ехр; теоретичні дані: ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), empirical (E)RMP by Marinescu et al; EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-30]

Таблиця 3.9 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для ряду переходів в спектрі Fr: експеримент – Ехр; теорія –ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), empirical (E)RMP by Marinescu et al; EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-30]

Пер./Мет	ТЗ-ДФ <sup>SD</sup>	ТЗс-ДФ <sup>SD</sup>	(E)RMP	ТЗ-РХФ (розш.)	ТЗ-РХФ	ТЗ-ДФ	EF-RMP	Ехр.
7p <sub>1/2</sub> -7s	3.256	-	-	3.279	3.304	3.179	3.272 3.274	3.277
8p <sub>1/2</sub> -7s	0.327	0.306	0.304	0.291	0.301	-	0.339	
9p <sub>1/2</sub> -7s	0.110	0.098	0.096	-	-	-	0.092	
10p <sub>1/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.063	
7p <sub>3/2</sub> -7s	5.851	-	-	5.894	5.927	5.791	5.891	5.898
8p <sub>3/2</sub> -7s	0.934	0.909	0.908	0.924	-	-	0.918	-
9p <sub>3/2</sub> -7s	0.436	0.422	0.420	-	-	-	0.426	-
10p <sub>3/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.284	-
7p <sub>1/2</sub> -8s	3.184	3.237	3.230	3.165	3.219	3.196	3.228	-
8p <sub>1/2</sub> -8s	10.02	10.10	10.06	10.16	10.00		10.12	-
9p <sub>1/2</sub> -8s	0.985	-	0.977	-	-	-	0.972	-
10p <sub>1/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	0.395	-
7p <sub>3/2</sub> -8s	7.418	7.461	7.449	7.384	7.470	7.472	7.453	-
8p <sub>3/2</sub> -8s	13.23	13.37	13.32	13.45	13.26		13.35	-
9p <sub>3/2</sub> -8s	2.245	-	2.236	-	-	-	2.232	-
10p <sub>3/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	1.058	-
7p <sub>1/2</sub> -9s	1.016	-	1.010	-	-	-	1.062	-
8p <sub>1/2</sub> -9s	9.280	-	9.342	-	-	-	9.318	-
9p <sub>1/2</sub> -9s	17.39	-	17.40	-	-	-	17.42	-
10p <sub>1/2</sub> -9s	-	-		-	-	-	1.836	-
7p <sub>3/2</sub> -9s	1.393	-	1.380	-	-	-	1.41	-
8p <sub>3/2</sub> -9s	15.88	-	15.92	-	-	-	15.96	-
9p <sub>3/2</sub> -9s	22.59	-	22.73	-	-	-	22.68	-
10p <sub>3/2</sub> -9s	-	-	-	-	-	-	3.884	-



Слід зазначити, що в таблицях 3.7-3.9 наведені найбільш точні на сьогодні експериментальні дані по радіаційним матричним елементам. Точність методу ТЗДФ<sup>SD</sup> багаточастинкової ТЗ з ДФ “0” наближенням [29] складає в середньому до 1%. Використання наближення НКД для розглянутих переходів між низько розташованими станами вагомо уступає по точності іншим методам. Очевидно, для рідбергівських станів НКД може давати значно вищі за точністю результати, зокрема, для енергій рівнів. Наш формалізм забезпечує більш високу точність обчислення. Дуже важливо звернути увагу на те, що наші дані представлені у кожному випадку двома числами, що відповідає використанню двох калібровок фотонного пропатора, а саме калібровкам Кулону та Бабушкіна; різниця між ними дає так званий калібрувальний-неінваріантний внесок в радіаційні матричні елементи. Його величина в нашому підході складає соті долі проценту, що свідчить про високий рівень оптимізації базисів релятивістських орбіталей у формалізмі EF-RMP і ефективного врахування основних ОК ефектів. Тобто, проведені тестові розрахунки очевидно підтверджують й теоретичну послідовність і коректність розвинутого підходу, так й його достатньо високу прецизійність.

### 3.3.2. Енергії рівнів, радіаційні матричні елементи переходів та часи життя для важких атомів Rb, Cs, Fr у високозбуджених рідбергівських станах

Далі ми провели масові обчислення енергій рівнів, сил осциляторів (відповідно редукованих матричних елементів) радіаційних переходів  $5S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n=10-70$ ),  $5P_{1/2,3,2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n=10-70$ ) в спектрі атому Rb. Такі стани особливо цікаві для експериментальних досліджень методами лазерної спектроскопії, установок для холодних та ультрахолодних рідбергівських атомів тощо. На рисунку 3.1 ми наводимо обчислену нами залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) від головного квантового числа для рідбергівського атому Rb:  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ). Наявні експериментальні дані для частини станів на рисунку означені як кола (із [26]). Також для порів-

няння на рисунку наведені дані обчислень Piotrowicz et al [28] в межах квазікласичної моделі Dyachkov-Pankratov (DP model).

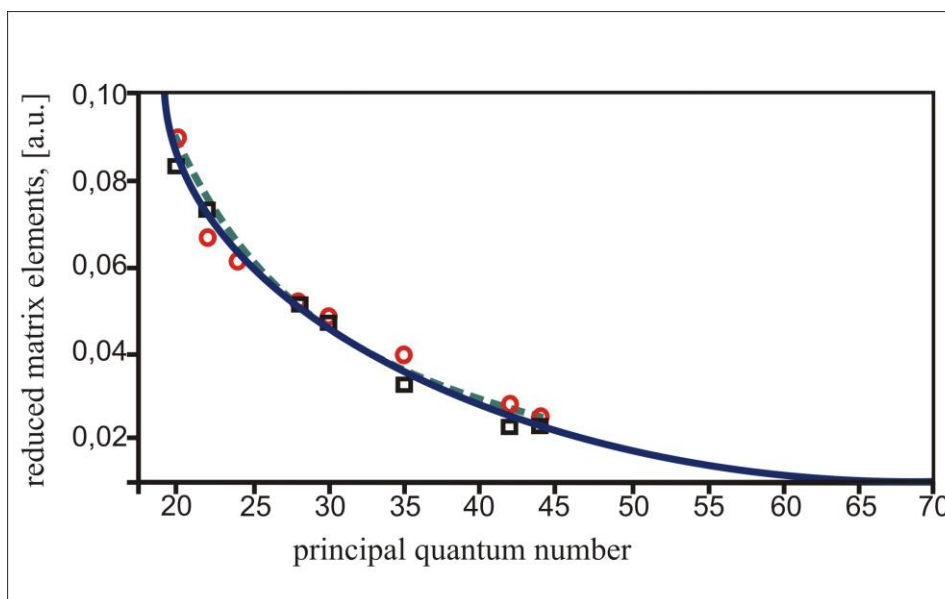


Рисунок 3.1 – Залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) переходів  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ) від головного квантового числа для рідбергівського атому Rb: Експеримент -  $\circ$ ,  $\square$  [26]; Теорія - безперервна лінія (наші дані), переривиста лінія - квазікласичні обчислення Piotrowicz et al [28]

Для переходів  $5S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n=10-70$ ) отримані дані аналогічні наведеним на рис. 3.1. Аналіз отриманих даних по редукованим матричним елементам радіаційних переходів для рідбергівського рубідію та порівняння відповідних даних з експериментом показує, що наша теорія, що базується на релятивістському енергетичному формалізмі комбінованому з неемпіричною калібрувально-інваріантною версією методу релятивістського МР з коректним та послідовним урахуванням ОК ефектів, забезпечує дуже добрий опис експериментальних даних для рідбергівських переходів, до речі, як й обчислення Piotrowicz et al.

В той же час відзначимо, що для рідбергівського атому рубідію також як й для рідбергівських більш легких атомів, напр., літію та натрію, різноманітні підходи типу НКД, ДФ, навіть квазікласичні моделі дають дуже добре корельовані один з одним результати, зокрема, по енергіям рівнів. Слід звернути увагу

на те, що експериментальні дані насправді є тільки для вибірових станів в інтервалі  $n \sim 6-40$ , в той час як для більш високо розташованих рідбергівських станів вони фактично відсутні.

Таким чином, для всіх незгаданих рідбергівських станів теоретичні дані по енергіям та амплітудам радіаційних переходів отримані нами фактично вперше, що має величезний як теоретичний так й практичний інтерес для багаточисельних додатків, згаданих у вступній частині. Важливою спектроскопічною характеристикою рідбергівських систем звичайно є час життя станів. Перелічені вище висновки далі можуть бути ілюстровані відповідними даними по часу життя ряду станів.

В таблиці 3.10 ми наводимо теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи декотрих збуджених станів атому рубідію, обчислені на основі різних методів (кулонівське наближення (КН) та МР [20], і ТЗДФ<sup>SD</sup> (багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням) плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском [31]; EF-RMP – наші дані), а також експериментальні дані. Привертає увагу, по-перше, дуже значна різниця в чисельних даних різних методів. Порівняння наших даних з даними досить надійних експериментів показує, що для отримання прийнятної точності розрахунку є дуже важливими оптимізація базисів релятивістських орбіталей у формалізмі EF-RMP і ефективне врахування основних ОК ефектів. В будь-якому випадку розвинена нами схема обчислення дає достатньо прецизійні результати, особливо у порівнянні як зі спрощеними КН або ННД моделями, так й значно більш складними та теоретично послідовними даними методів типу ТЗДФ.

На рисунку 3.2 ми наводимо обчислену нами залежність (безперервна лінія) від головного квантового числа значень редукованих матричних елементів радіаційних переходів  $6P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n=10-70$  (аналогічні дані отримані й для переходів  $6S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$ ,  $n=10-70$ ) для рідбергівського атому Cs. Наявні експериментальні дані для частини станів (означені як кола) [26].

Таблиця 3.10 – Теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи станів атому рубідію: Експеримент (Ехр.), теорія: кулонівське наближення (КН) та МР [20], і ТЗДФ<sup>SD</sup> (багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням) плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском [31]; EF-RMP – наші дані

Рівень	ТЗс- ДФ <sup>SD</sup>	КН та МР	ТЗДФ <sup>SD</sup>	EF-RMP	Ехр.
6s <sub>1/2</sub>	45.4	-	45.4	45.5	45.57(17)
7s <sub>1/2</sub>	88.3	-	88.3	88.1	88.07(40)
8s <sub>1/2</sub>	161.9	-	161.8	161.4	161(3)
9s <sub>1/2</sub>	271.7	266.36	-	262.1	253(14)
10s <sub>1/2</sub>	426	417.84	-	421.3	430(20)
6p <sub>1/2</sub>	122.5	-	123	123.1	125(4)
6p <sub>3/2</sub>	112.4	-	113	112.1	112(3)
7p <sub>1/2</sub>	277.8	-	280	273.3	272(15)
7p <sub>3/2</sub>	255.2	-	258	249.0	246(10)
8p <sub>1/2</sub>	501.0	-	508	497,4	
8p <sub>3/2</sub>	463.2	-	471	456.2	400(80)
9p <sub>1/2</sub>	-	-	-	796.4	
9p <sub>3/2</sub>	-	-	-	743.6	665(40)
10p <sub>1/2</sub>	-	-	-	963.2	
10p <sub>3/2</sub>	-	-	-	921,0	
7d <sub>3/2</sub>	339.5	331.08	-	336.2	345(9)
7d <sub>5/2</sub>	327.0	319.57	-	323.8	325(22)
8d <sub>3/2</sub>			-	488.3	515(30)
8d <sub>5/2</sub>			-	431.1	421(25)

На рисунку 3.2 також для ілюстрації наведені дані оціночних обчислень Piotrowicz et al [28] в межах квазікласичної моделі Dyachkov-Pankratov (DP model). Аналіз отриманих для рідбергівського цезію даних по радіаційним

амплітуда показує, як й у попередньому випадку, досить добре узгодження наших теоретичних даних з наявними, до речі частково уривчастими експериментальними даними, хоча в останні кілька років кількість проведених експериментів різко збільшується. Добру згоду теорії з експериментом можна знову пояснити теоретичною послідовністю нашого методу EF-RMP та достатньо повним та ефективним урахуванням важливих ОК ефектів. В той же час застосування квазікласичної моделі (обчислення Piotrowicz et al [28]), також як й методів типу стандартного ДФ, РХФ (дивись дані у вище наведених таблицях по Cs) для цезію, може давати достатньо вагому погрішність. Більш того так званий калібрувальний-неінваріантний внесок у декотрих версіях методів РХФ та ДФ, як добре відомо, може досягати 40% [4, 5].

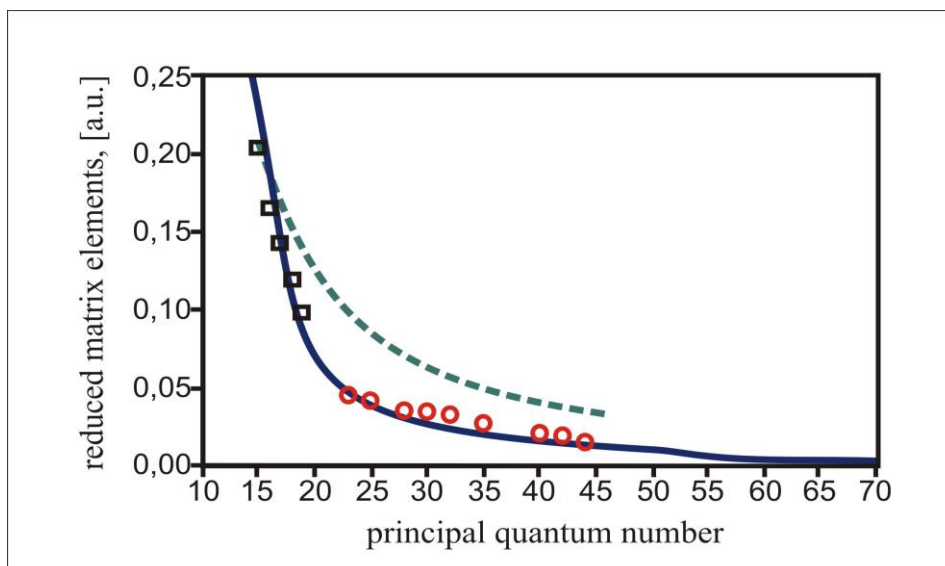


Рисунок 3.2 – Залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) переходів  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ) від головного квантового числа для рідбергівського атому Cs: експеримент –  $\circ$ ,  $\square$  [26]; теорія – безперервна лінія (наші дані), переривчаста лінія – квазікласичні обчислення Piotrowicz et al [28]

На рисунку 3.3 наведені дані по значення часу життя рідбергівських станів  $nS_{1/2}$  ( $n=30-60$ ) в спектрі атому Cs: теоретичні дані Zhi-Gang Feng et al ( $n < 40$ ) – емпіричне кулонівське наближення; ab initio EF-RMP- наші дані).

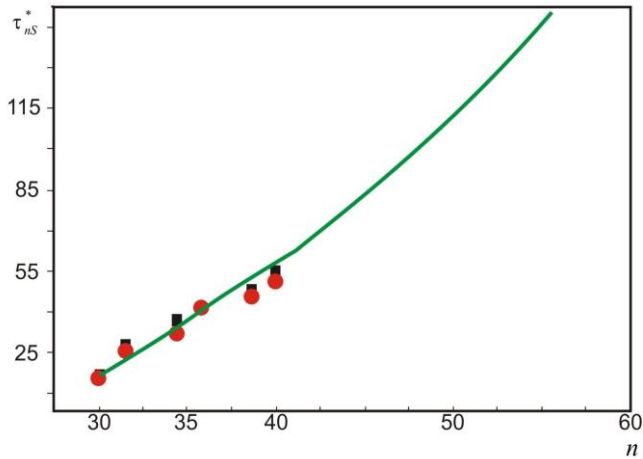


Рисунок 3.3 – Експериментальні (квадрати) [32] та теоретичні (Емпіричне кулонівське наближення Feng et al - кола;  $n < 40$ ; Наша теорія - EF- ab initio RMP - безперервна лінія) значення часу життя рідбергівських станів  $nS_{1/2}$  в спектрі Cs

Зазначимо, що теоретичні результати, отримані на основі як емпіричного кулонівського наближення Feng et al ( $n < 40$ ), так й нашого методу EF- ab initio RMP достатньо добре узгоджуються з експериментальними даними. Отримані, у переважній більшості лише в останні роки (див., напр., [26-28, 32, 33]) експериментальні дані в основному відносять до станів з  $n < 40$ . Очевидно, що емпіричні методи навряд чи можуть бути високо надійними і прецизійними при дослідженні параметрів атомів і відповідно рідбергівських станів, при відсутності фітінгової емпіричної інформації. Неемпіричні методи у цьому сенсі мають вагомі переваги як у плані теоретичної послідовності, так й безпосередньо точності обчислених параметрів. Відмітимо, що в нашій роботі вперше отримані значення про часи життя рідбергівських станів Cs з  $n = 40-60$ .

Далі ми провели дослідження спектроскопічних характеристик (енергій рівнів, амплітуд переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n = 10-80$ ),  $7P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n = 10-80$ ) в спектрі рідбергівського Fr. На рисунку 3.4 наведена обчислена нами залежність величин редукованих матричних елементів переходів  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n = 10-80$  (безперервна лінія – наші дані) від головного квантового числа для рідбергівського Fs. Для амплітуд переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n = 10-80$ ) отримані аналогічні дані. В

таблицях 3.11, 3.12 надані результати наших обчислень енергій рівнів часів життя низки високо збуджених рівнів  $ns^2 S_{1/2}, nd^2 D_{3/2}, nd^2 D_{5/2}$  атому Fr.

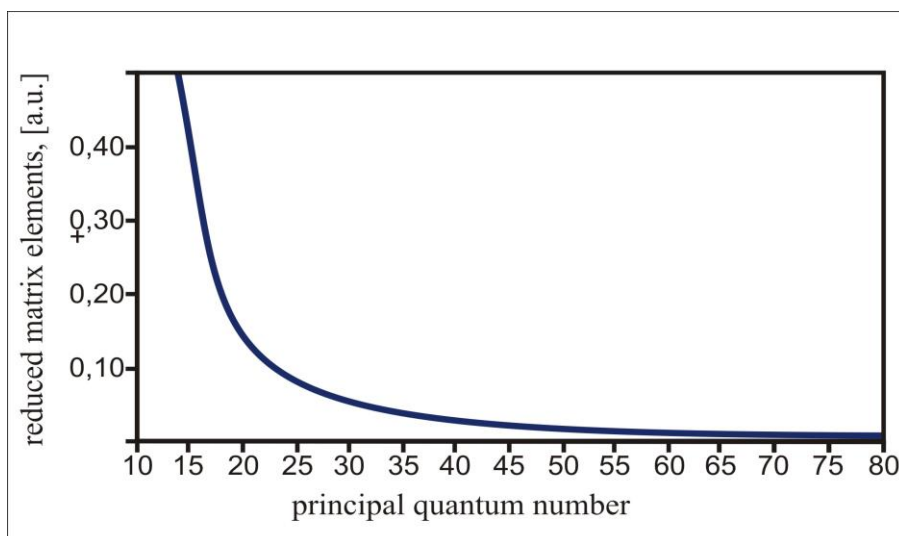


Рисунок 3.4 – Залежність значень редукованих матричних елементів від головного квантового числа для рідбергівського Fr  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  (наші дані)

Таблиця 3.11 – Теоретичні та експериментальні значення енергій (в  $\text{cm}^{-1}$ ) декотрих рідбергівських станів  $ns^2 S_{1/2}, nd^2 D_{3/2}, nd^2 D_{5/2}$  атому Fr: Експеримент (Exp.), теорія: емпіричне кулонівське наближення (KH)[32], і EF-RMP – наші дані

n	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{5/2}$	$nd^2 D_{5/2}$
E	$E_{\text{cal}}$ [32]	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$
20	32356.42	32356.42	32356.44	32449.484	32449.483	19739.98	19739.98
22	32465.929	32465.933	32465.937	32465.94	32465.937	32450.489	32450.488
24	32542.59	32542.59	32542.59	32589.68	32589.68	32590.20	32590.20
28	32640.14	32640.11	32640.14	32667.16	32667.18	32667.47	32667.49
30	32672.29	32672.27	32672.29	32693.48	32693.50	32693.73	32693.75
35	32726.36	32726.34	-	32738.79	-	32738.94	-
40	32758.93	32758.91	-	32766.82	-	32766.91	-
45	32780.04	32780.01	-	32785.37	-	32785.42	-
46	32783.36	32783.33	-	32788.33	-	32788.39	-
48	32789.33	32789.31	-	32793.61	-	32793.68	-
50	32793.51	32793.49	-	32798.26	-	32798.32	-

Таблиця 3.12 – Теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи станів атому Fr: Експеримент (Exp.), теорія: кулонівське наближення (КН) та МР

Рівень	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$np^2 P_{1/2}$	$np^2 P_{3/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{5/2}$
n/τ	τ <sub>cal</sub> [33]	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані
10	2.304D2	2.337D2	3.275D2	2.338D2	2.093D2	2.064D2
12	6.244D2	6.270D2	1.035D3	5.657D2	3.970D2	3.962D2
15	1.847D3	1.889D3	2.698D3	1.438D3	8.645D2	8.668D2
16	2.472D3	2.480D3	3.437D3	1.846D3	1.085D3	1.089D3
20	-	6.328D3	8.156D3	3.294D3	2.380D3	2.385D3

Аналіз наведених у таблицях 3.11, 3.12 даних показує, що, по перше, використання нашого неемпіричного методу, також як й емпіричного кулонівського наближення (фактично з компіляцією) у обчисленні енергій рівнів дає дуже добру згоду з експериментальними даними (до n=30; для більш високо розташованих станів надійних емпіричних даних поки немає), що є достатньо природно враховуючи, що точність обчислення енергій залежить в основному від коректності гамільтоніану відповідної атомної моделі, та ступеню урахування ОК ефектів за рахунок або коректних теоретичних моделей або використання емпіричних даних в якості фітінгових параметрів. На відміну від енергій, обчислення властивостей типу сил осциляторів, часів життя тощо є значно більш складною задачею і визначається якістю базисів релятивістських орбіталей. Крім того, слід розуміти, що залежність сил осциляторів від n, напр., для розглянутих вище переходів  $nS \rightarrow nP$ ,  $nP \rightarrow nD$ , здається має монотонно убуючий характер, але насправді, це не так, оскільки навіть для наведених переходів у випадку n~8-14 мають місце незвичайні нерегулярності. Крім того, для інших переходів, за участю, напр., F станів можливі зміни убуювання на ріст і таке ін-



ше. Тому, будь-який новий метод обчислення спектроскопічних параметрів складних важких атомів має бути максимально неемпіричним й коректним. Як вказувалося вище, ключові елементи послідовного теоретичного високо прецизійного підходу до розрахунку радіаційних амплітуд, сил осциляторів, часів життя тощо важких рідбергівських багатоелектронних атомних систем повинні включати використання високо оптимізованих базисів релятивістських орбіталей, виконання принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні амплітуд радіаційних переходів і, зрозуміло, обов'язковий послідовний та прецизійний облік як одно-частинкових, так й більш складних багаточастинкових ОК ефектів. Саме ці моменти складають основні елементи новизни нашого підходу та, на нашу думку, забезпечують коректне і прецизійне описання спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів. У випадку францію (радіоактивний елемент, що звичайно уповільнює його експериментальне дослідження) до теперішнього часу спостерігається значний дефіцит прецизійних спектроскопічних даних, особливо для рідбергівських станів. У цьому сенсі отримані нами дані мають вагомий теоретичний та практичний інтерес.

### 3.4. Висновки до розділу 3

Основні результати розділу полягають у наступному:

1. На основі нового теоретичного підходу проведено масові тестові розрахунки енергій рівнів, радіаційних ширин (амплітуд переходів) для переходів  $nlj_{1/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах важких Li-подібних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$  (зокрема, іонів  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Kr}^{33+}$ ,  $\text{Rb}^{34+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ ,  $\text{Mo}^{39+}$ ,  $\text{Cs}^{52+}$ ,  $\text{Tm}^{66+}$ ,  $\text{Fr}^{67+}$ ,  $\text{Fr}^{84+}$ ), низько розташованих переходів  $nlj - n'l'j'$  ( $n=5-10$ ,  $l=0-4$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах атомів Rb, Cs, Fr, і показано, що новий підхід у порівнянні з експериментом переважає по точності як спрощені методи типу НКД, квазікласичні моделі, так і методи типу РХФ та ДФ та ін. за рахунок оптимізації рідбергівських орбіталей, прецизійного урахування ОК ефектів, в т.ч. ефекту некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму.

2. Вперше отримано прецизійні дані по енергетичним та спектроскопічним характеристикам (енергії рівнів, радіаційні ширини, амплітуди переходів, час життя рідбергівських станів) рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, для переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3/2} \rightarrow n'D_{3/2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; для рідбергівського францію у переважній більшості вперше розраховано та кількісно передбачено спектроскопічні дані по ймовірностям переходів, часам життя рідбергівських станів та переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$ ,  $7P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n=20-80$ ).

## РОЗДІЛ 4

### РОЗРАХУНОК ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

4.1. Елементи нової версії операторної ТЗ для багатоелектронних атомних систем в електромагнітному полі, теорії квазіенергетичних станів та методу комплексних координат

Розглянемо будь-яку релятивістську атомну систему у зовнішньому полі. Добре відомо [6, 7], що в рамках послідовної релятивістської теорії резонансних станів у спектрі атома у зовнішньому електромагнітному полі на відміну від нерелятивістської теорії з'являються комплексні власні енергії:

$$E = E_{\Gamma} + i\Gamma/2, \quad (4.1)$$

де  $E_{\Gamma}$  – енергія резонансу,  $\Gamma$  – ширина резонансу.

В межах класичної операторної ТЗ важливим моментом є використання відомого в теорії розсіювання “distorted waves наближення”, включеного в рамки формально точної ТЗ. Згідно з [42], гамільтоніан нульового наближення такої ТЗ має спектр стаціонарних пов'язаних станів, станів розсіювання тощо, і визначається набором ортогональних власних функцій і значень енергії. Другий важливий момент пов'язаний із достатньо швидкою збіжністю ряду ТЗ (на відміну від стандартної ТЗ із суттєвою розбіжністю внаслідок відомого феномена Дайсона) завдяки вибору фізично розумного спектра власних функцій та енергій в нульовому наближенні.

Згідно з [42], головна ідея побудови оптимального гамільтоніану нульового наближення базується на тій умові, щоб він збігався з повним гамільтоніаном задачі для атома в електричному полі  $H$  при  $F \Rightarrow 0$  ( $F$  – напруженість електричного поля). Далі, з метою оптимізації базису функцій штарківських резона-

нсів (що дає можливість використовувати метод операторної ТЗ в полях будь-якої напруженості), важливим моментом методу є заміна однорідного електричного поля початкової напруженості  $F_0$  полем, що описується функцією [6]:

$$F(t) = \frac{1}{t} F_0 \left[ (t - \tau) \frac{\tau^2}{\tau^2 + t^2} + \tau \right], \quad (4.2a)$$

з достатньо великим параметром  $\tau$  ( $\tau = 1.5 t_2$ ; друга поворотна точка для потенціалу задачі Штарка). Далі, як звичайно, в методі операторної ТЗ показується, що функція  $F(t)$  практично збігається з  $F_0$  всередині бар'єрної області руху (при  $t < t_2$ ) і зникає при  $t \gg t_2$ . Зрозуміло, що у послідовній реалізації допустиме значення параметра  $\tau$  підбирається чисельно з умови, що кінцеві результати виявляються не залежними від  $\tau$ .

На асимптотиці (коли електричного поля немає) електрон є природно вільним з ефективним хвильовим числом [7]:

$$k_{eff} = (E/2 + F\tau/4)^{1/2}. \quad (4.2b)$$

Відповідно далі можна показати, що енергетичний спектр станів розсіювання електрона атома в задачі Штарка знаходиться в області  $(F\tau/2, +\infty)$ , в той час як в однорідному електричному полі  $(-\infty, +\infty)$ . При цьому важливо, що стани розсіювання в присутності однорідного електричного поля залишаються квантованими при будь-якій енергії  $E$ .

Параметром малості операторної ТЗ є  $\Gamma/E$  ( $\Gamma, E$  – ширина енергії розглянутого рівня), причому виявляється, що  $\Gamma/E \leq 1/n$  навіть в околиці границі нового континууму системи, що виникає в спектрі атомної системи в сильному електромагнітному полі. Ці ключові ідеї операторної ТЗ будуть збережені нами і в нашій новій релятивістській моделі, яка, на відміну від попередніх (див., напр., [121, 221, 233]) різноманітних версій операторної ТЗ [42], природно базу-

ється вже на релятивістському рівнянні Дірака.

Також далі варто зазначити, що при формуванні нового релятивістського квантового підходу до моделювання хаотичної динаміки атомних систем в електромагнітному полі ми використовуємо в якості основи метод комплексних координат (МКК або обертання координат) і відому теорію ККЕС. Метод ККЕС у нерелятивістському наближенні раніше застосовувався до вивчення динаміки атому водню в електромагнітному полі, а також більш складних атомів в полі в наближеннях одно- та багатоканального методу квантового дефекту [6, 96-98, 121, 233, 253]. Нагадаємо також, що метод МКК у ряді робіт з успіхом був застосований для розв'язання низки задач нерелятивістської квантової механіки, зокрема, класичної задачі про квазістаціонарні стани, вивчення поведінки атому водню в статичних полях, задачі обчислення амплітуд розсіювання електрона на атомі водню, ряді молекулярних задач і т.д. [6, 7, 121, 233, 253].

Нижче ми вперше застосуємо вказані підходи до розв'язання класу задач нелінійної динаміки релятивістських багатоелектронних атомних систем у полі. Основна ідея методу МКК (див., напр., [6, 96-68]), полягає в тому, що комплексне перетворення координат  $r \rightarrow r \exp(i\theta)$  в гамільтоніані задачі не змінює його власні значення (енергії станів), але в той же час переводить його власні функції в простір квадратично інтегрованих функцій, тобто фактично в задачі з'являється неунітарно комплексний оператор:

$$R(\theta) = \exp(-i\theta/2[\vec{r}\vec{p} + \vec{p}\vec{r}]) . \quad (4.3)$$

На рівні обчислювального алгоритму задача обчислення енергій резонансів фактично замінюється на задачу обчислення власних значень неермітової матриці.

У методі ККЕС, з урахуванням відомої теореми Флоке, для періодичного зовнішнього поля (період  $T=2\pi/\omega$ ) у нерелятивістському наближенні записується залежне від часу рівняння Шредінгера у вигляді:

$$i\partial_t |\Psi(r,t)\rangle = H |\Psi(r,t)\rangle, \quad (4.4)$$

$$H(t+T) = H(t).$$

Після цього відповідні рішення (4.24) шукаються у вигляді суперпозиції добутоків фазового множника  $\exp(-iE_j t)$  і періодично залежної від часу функції  $|\Psi(r,t)\rangle$ :

$$|\Psi(r,t)\rangle = \sum_j c_j \exp(-iE_j t) |\Psi_{E_j}(r,t)\rangle \quad (4.5)$$

$$|\Psi_{E_j}(r,t)\rangle = |\Psi_{E_j}(r,t+T)\rangle.$$

Так звані флоківські функції  $|\Psi_{E_j}(r,t)\rangle$  і квазіенергії  $E_j$  далі визначаються стандартно власними функціями і власними значеннями гамільтоніану Флоке  $H_F = H - i\partial_t$ . Задача їх обчислення в подальшому зводиться до задачі рішення стаціонарного рівняння типу Шредінгера:

$$H_F |\Psi_{E_j}(r,t)\rangle = E_j |\Psi_{E_j}(r,t)\rangle, \quad (4.6)$$

кожне рішення якого, як підкреслювалося, напр., в [92, 199], визначає клас рішень  $\exp(-ik\omega t) |\Psi_{E_j}(r,t)\rangle$  з відповідними квазіенергіями  $E_j + k\omega$ :

$$\exp(-i[E_j + k\omega]t) |\Psi_{E_j+k\omega}(r,t)\rangle = \exp(-iE_j t) |\Psi_{E_j}(r,t)\rangle. \quad (4.7)$$

Тут  $k$  – числа фотонів, якими атомна система обмінюється з електромагнітним полем. Варто зазначити, що насправді зовнішнє змінне електромагнітне поле індукує зв'язок всіх атомних станів, “одягнених”  $k$  фотонами з станами, “одягненими” відповідно  $(k-1)$  і  $(k+1)$  фотонами. До речі, ця обставина грає дуже ва-

жливу роль при виникненні відповідної хаотичної динаміки для атома в полі.

З урахуванням виразу (4.3) для визначення величини ймовірності іонізації атомної системи в методі ККЕС вводиться оператор тимчасової еволюції  $U(t_2, t_1)$ , який для комплексного гамільтоніану Флоке записується у вигляді [239]:

$$U(t_2, t_1) = \sum_{j, k_1, k_2} e^{-iE_j(t_2-t_1)} e^{ik_1\alpha_1} e^{-ik_2\alpha_2} R(-\theta) | \Psi_{E_j, \theta}^{k_2} \rangle \langle \Psi_{E_j, \theta}^{k_1} | R(\theta). \quad (4.8)$$

Відповідно ймовірність іонізації атомної системи у стані  $|n_0 l_0 m_0\rangle$  в електромагнітному полі визначається як [239]:

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{k, j} \langle \Psi_{E_j, \theta}^k | R(\theta) | n_0 l_0 m_0 \rangle^2 \exp(-i\Gamma_j t), \quad (4.9a)$$

ймовірність виживання атомної системи в акті взаємодії з полем:

$$P_{surv}(t) = 1 - P_{ion}(t), \text{ або}$$

$$P_{surv}(t) = \sum_{k, j} \langle \Psi_{E_j, \theta}^k | R(\theta) | n_0 l_0 m_0 \rangle^2 \exp(-i\Gamma_j t). \quad (4.9b)$$

Для подальшого розгляду теорії, зокрема, порівняння теорії з експериментом, варто мати на увазі, що зазвичай в експерименті вимірюється ймовірність іонізації, усереднена по початковій фазі зовнішнього змінного поля, тобто величина [239]

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{E_j} w_j \exp(-i\Gamma_j t) \quad (4.10)$$

з вагами  $w_j$ , які фактично визначають перекривання функції початкового стану атома з власними векторами  $|E_j\rangle$  системи “атом–зовнішнє поле”.

Викладені аспекти полягли в основу нового прецизійного вперше релятивістського підходу до розрахунку та аналізу енергетичних та спектроскопічних

характеристик (енергії та ширини штарківських резонансів) важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі, динаміки хаотичної іонізації важких рідбергівських атомних систем у мікрохвильовому НВЧ полі, який базується на теорії квазістаціонарних квазіенергетичних станів, релятивістській версії оптимізованої операторній ТЗ та *ab initio* методі модельного потенціалу, алгоритмі комплексного обертання координат (e.g., [3-5,44,65,66,147-149,170-172,212, 213, 239, 242, 307,308,317]).

#### 4.2. Спектроскопія та іонізаційна динаміка релятивістських рідбергівських атомів рубідію і францію в мікрохвильовому полі: Квантовий розрахунок

В даному підрозділі ми наведемо результати застосування викладених вище нових методів моделювання та аналізу динаміки релятивістських атомних систем в електромагнітному, зокрема, мікрохвильовому полі, а також докладні дані порівняння з деякими наявними результатами експериментів, проведених групами Stony Brook-Pittsburg, Virginia (USA) і Munchen (Germany) [112-118]. Отримані в роботі чисельні дані можуть далі використані для вперше кількісного опису феномену релятивістського квантового хаосу в рідбергівських лужних атомах в мікрохвильовому полі (в т.ч. ефект хаотичної іонізації), наприклад, з використанням універсального єдинообразного хаос-кібернетичного апарату, викладеному в [307,308,317].

Почнемо розгляд з представлення наших результатів по дослідженню динаміки іонізації релятивістських атомних систем, зокрема, рубідію (Rb), францію (Fr), в рідбергівських станах з головним квантовим числом  $n=60-80$  в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля змінюється в межах  $F=(1,2\div 3,2)\cdot 10^{-9}$  ат.од,  $\omega/2\pi=8,87$  ГГц (як в експерименті для Rb, Munich group [118]) і  $\omega/2\pi=36$  ГГц; час взаємодії атом-поле  $T=(327\div 560)\cdot 2\pi/\omega$ . Серед теоретичних робіт по рубідію варто відзначити роботи Krug-Buchlienter [109-111], Glushkov-Prepelitsa et al, Ignatenko [120-123], в яких були проведені прямі чисе-



льні розрахунки ймовірностей іонізації, зокрема, Li, Rb, з  $n > 60$  на основі численного рішення нерелятивістського рівняння Шредінгера в Н-подібному наближенні та наближенні квантового дефекту й спрощеного модельного потенціалу. Принципово новим елементом нашої роботи є те, що на відміну від зазначених альтернативних нерелятивістських методів ми вперше розвинули істотно послідовний релятивістський підхід, що базується на рівнянні Дірака з використанням (також вперше) базису розкладання релятивістської операторної ТЗ, таким чином заклавши основу для подальшого кількісного опису феномену релятивістського квантового хаосу. В таблиці 4.1 ми приводимо обчислені нами (Th3 – наша релятивістська теорія) теоретичні ймовірності іонізації атома Rb ( $l_0=0, m_0=0, n_0=60-66$ ) для параметрів мікрохвильового поля  $F=3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од., частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц, 8.87ГГц (параметр  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ ), а також для порівняння – аналогічні теоретичні дані, зокрема, Th1 – нерелятивістська теорія Krug-Buchleitner [15] на основі рівняння Шредінгера; Th2 – нерелятивістська теорія Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [120,121]. Нижче ми наведемо результати порівняння нашої теорії з експериментальними даними Munich group [118].

Таблиця 4.1 – Теоретичні ймовірності іонізації атома Rb ( $l_0=0, m_0=0, n_0=60-66$ ) для параметрів поля:  $F=3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од.,  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ ; частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц і 8,87ГГц (Th1 – нерелятивістська теорія Krug-Buchleitner [111] на основі рівняння Шредінгера; Th2 – нерелятивістська теорія Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [120,121]; Th3 – наша релятивістська теорія)

	Th.1	Th.2	Th.3	Th.1	Th.2	Th.3
$n_0$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=36$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=36$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=36$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=8,87$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=8,87$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=8,87$
60	0,25	0,252	0,27	0,20	0,21	0,24
63	0,36	0,358	0,38	0,30	0,31	0,33
64*	-	-	0,36	-	-	0,31
65	0,34	0,347	0,37	0,28	0,29	0,32
66	0,36	0,371	0,39	0,34	0,35	0,38

Далі у таблицях 4.2, 4.3 наведені обчислені нами у релятивістському наближенні значення (Th.1) ймовірності іонізації атома рубідію, підготовлених спочатку в станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=58-66$ , в залежності від амплітуди поля для різних величин часу взаємодії атома з полем:  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ ;  $t = 650 \cdot 2\pi/\omega$ .

Таблиця 2– Ймовірність іонізації атомів Rb в станах з  $l_0=0$ ,  $m_0=0$ ,  $n_0=58-66$  як функція амплітуди поля  $F$  (в  $10^{-9}$  ат.од.;  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц)

$n_0$	$F= 2,0$	$F= 2,3$	$F=2,5$	$F=2,8$	$F= 3,1$
58	0,03	0,04	0,08	0,14	0,21
60	0,05	0,06	0,13	0,21	0,27
62	0,09	0,14	0,18	0,28	0,34
64	0,139	0,318	0,316	0,33	0,36
66	0,12	0,27	0,29	0,35	0,39

Аналіз отриманих результатів для рубідію показує, що, по-перше, із збільшенням амплітуди мікрохвильового поля збільшуються й значення ймовірності іонізації, однак тут же спостерігається і різко виражений пороговий характер кривих (особливо у разі  $n=63$ ), по-друге, абсолютно чітко фіксується заздалегідь неочікуваний феномен локальних порушень регулярної залежності  $P$ , зокрема для  $n_0 \sim 64$ , від величини амплітуди поля. При цьому відповідні особливості у релятивістському наближенні проявляються більш чітко.

Фізика процесу свідчить про те, що при малих значеннях напруженості поля  $F$  має місце домінування кулонівського поля атомного остова над зовнішнім, однак при значенні напруженості  $F \sim 2,5 \cdot 10^{-9}$  ат.од. ситуація змінюється, і, навпаки, зовнішнє поле починає домінувати над полем кулонівського тяжіння. До речі, дана обставина також зазначена у роботах Krug-Buchlienter, Ignatenko et al [111, 121], але амплітуда поля була завищеною (див. нижче). Звичайно, фі-

зику нерегулярності можна пояснити, зокрема, антиперетином двох сусідніх флоківських станів в спектрі квазіенергій при зміні амплітуди поля  $F$ . При поміщенні рідбергівського атому у мікрохвильове поле має місце індукування великого числа квазістаціонарних станів, їх сильний зв'язок із станами континууму, що істотно впливає на кількісну поведінку ймовірності іонізації.

Таблиця 4.3 – Ймовірності іонізації атомів Rb в станах з  $l_0=0, m_0=0, n_0=58-66$  для амплітуд поля:  $F=(2,0-3,1) \cdot 10^{-9}$  ат.од. ( $t = 650 \cdot 2\pi/\omega$ ; частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц)

$n_0$	$F= 2,0$	$F= 2,3$	$F=2,5$	$F=2,8$	$F= 3,1$
58	0,05	0,08	0,11	0,17	0,23
60	0,06	0,08	0,15	0,24	0,29
62	0,12	0,16	0,21	0,29	0,36
64	0,16	0,33	0,362	0,35	0,42
66	0,15	0,32	0,35	0,40	0,46

Мова йде про суттєве резонансне ускладнення структури спектра Флоке і, особливо, посилення зв'язку з континуумом. Крім цього, має місце також й значне збільшення впливу багатофотонних резонансів між пов'язаними атомними станами. Відомо, що багатофотонні резонанси між пов'язаними станами при даній амплітуді поля додаються до комплексу майже вироджених власних станів системи “рідбергівський атом – мікрохвильове поле”, що своєю чергою додатково підсилює їх зв'язок з автоіонізаційними резонансами та континуумом і призводить до нерегулярної поведінки величини імовірності іонізації. Очевидно, що описана фізика процесів у релятивістському наближенні є, по-перше, більш адекватною й близькою до реальності, по-друге, теоретичні дані є більш точними з точки зору врахування значно більшої кількості атомних станів, які виникають завдяки спін-орбітальній взаємодії, звичайно відсутньою у будь-яких нерелятивістських моделях типу [109-111,120-123].

Далі наведемо результати порівняння теоретичних даних з даними експерименту. Тут варто згадати, що експериментаторами здебільшого приводяться дані щодо порогових значень амплітуди поля  $F_{10\%}$  (при яких має місце 10% іонізація атомів). Теоретично ця характеристика легко розраховується на основі даних по залежності ймовірності іонізації від амплітуди поля при різних часах взаємодії “атом – поле”. На рис. 4.1 представлено дані по залежності величини  $F_{10\%}$  від  $n_0$  для Rb:  $\Delta$  – експериментальні дані [84-86] ( $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ); Теорія: 1) Нерелятивістські моделі Krug-Buchleitner, Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [109, 111, 120-122] (чисельне розв'язання рівняння Шредінгера), дані обох теорій в масштабі рисунку практично співпадають.  $\blacklozenge$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\bullet$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ ; 2) Наша релятивістська теорія:  $\star$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\star$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ .

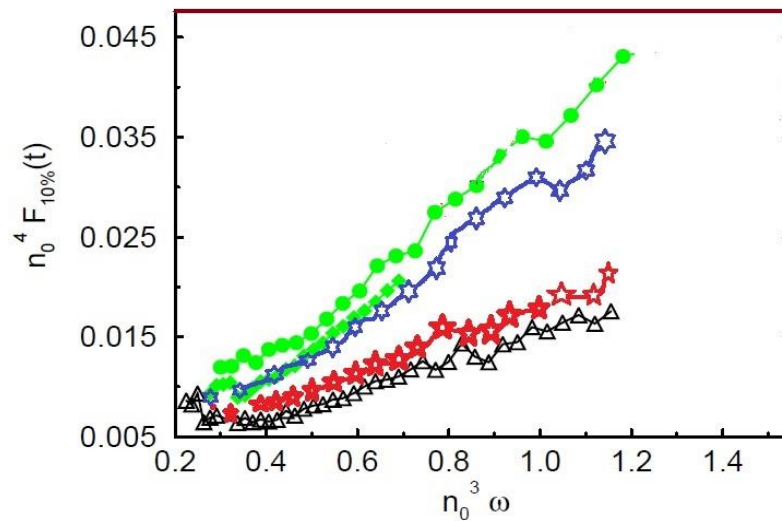


Рисунок 4.1 – Залежність  $F_{10\%}$  від  $n_0$  для Rb:  $\Delta$ – експеримент [84-86] ( $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ); Теорія: 1) Нерелятивістські моделі [111,121] (чисельне розв'язання рівняння Шредінгера):  $\blacklozenge$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ ГГц}$ ;  $\bullet$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ ГГц}$ ; 2) Наша релятивістська теорія:  $\star$ – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\star$ –  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$

Порівняння теоретичних та експериментальних даних, зокрема по рубідію, показує, що релятивістська теорія дає значно більш точні результати, які

істотно краще узгоджуються з експериментом у порівнянні з нерелятивістськими моделями навіть з використанням фізично коректних в даній задачі наближень квантового дефекту і модельного кулонівського потенціалу [109-111,120-123].

В таблиці 4.4 представлені вперше обчислені нами значення ймовірності іонізації атому францію Fr, підготовлених спочатку у станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=74-86$ , в залежності від амплітуди мікрохвильового поля (параметри:  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$ ГГц).

Таблиця 4.4 – Ймовірність іонізації атома Fr ( $l_0=0, m_0=0, n_0=74-86$ ) як функція амплітуди поля  $F$  (в  $10^{-9}$ ат.од.;  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$ ГГц)

$n_0$	$F=2,0$	$F=2,3$	$F=2,5$	$F=2,8$	$F=3,1$
74	0,05	0,09	0,18	0,34	0,41
77	0,11	0,26	0,40	0,39	0,50
80	0,21	0,28	0,39	0,51	0,61
83	0,28	0,55	0,57	0,56	0,60
86	0,12	0,27	0,29	0,67	0,69

Головною причиною такої ситуації є, очевидно, урахування релятивістських ефектів завдяки використанню в нашій теорії в якості базового рівняння Діраку. Важливо відзначити, що перелічені моделі [111, 120, 121] у випадку мікрохвильової іонізації легкого атому літію забезпечують практично спектроскопічну точність. З іншого боку, із ретельного порівняння наших теоретичних результатів для ймовірностей іонізації з експериментальними даними Munich group [118] видно, що також має місце невелика розбіжність даних, яку можна пояснити лише певною обчислювальною похибкою теоретичного розрахунку. Варто додати, що у випадку аналогічних більш легких атомних систем, зокрема, атомів водню, літію або натрію, як правило, нерелятивістська та релятивіст-

ська теорії дають практично однакові результати. У випадку динаміки релятивістських атомних систем, зокрема, таких як рубідій, та далі, безумовно, францій, значення релятивістських ефектів, у тому числі роль багатоелектронного релятивістського остову, для атомів навіть в рідбергівських станах стає дуже значною. Більш того, на відміну від атома водню, тут істотним є внесок поправок порядку  $1/n^3$  як в енергетичні так й радіаційно-динамічні характеристики системи.

Варто особливо зазначити, що досі в літературі немає жодних теоретичних або експериментальних даних щодо динаміки цього, до речі радіоактивного, атому у мікрохвильовому полі. Тобто отримані результати є першими даними щодо іонізаційної динаміки францію в мікрохвильовому полі.

Далі в таблиці 4.5 представлено обчислені значення (Th.1) ймовірності іонізації атома францію Fr, підготовленого спочатку у станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=77-86$ , в залежності від амплітуди мікрохвильового поля (параметри:  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  і  $8,87$  ГГц).

Таблиця 4.5 – Ймовірності іонізації атома Fr ( $l_0=0, m_0=0, n_0=77-86$ ) в залежності від напруженості  $F=2,8$  і  $3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од. ( $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц і  $8,87$  ГГц)

	Наша теорія	Наша теорія	Наша теорія	Наша теорія
$n_0$	$F=2,8 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=36$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=36$	$F=2,8 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=8,87$	$F=3,1 \cdot 10^{-9}$ $\omega/2\pi=8,87$
77	0,47	0,50	0,43	0,46
80	0,58	0,61	0,54	0,56
83	0,56	0,60	0,51	0,53
86	0,67	0,69	0,62	0,66

Аналіз отриманих нами даних для францію показує, що у випадку цього, досить важкого суттєво релятивістського атому, залежність ймовірності іонізації від амплітуди поля і квантових чисел стає значно складнішою, ніж у випадку більш легких лужних атомів. З даних таблиці 4.17 видно наявність двох порушень регулярної залежності ймовірності іонізації від амплітуди поля для різних станів. Як і вище, у разі рідбергівського атому францію у мікрохвильовому полі, суттєві значення мають одночасно і резонансне ускладнення структури спектра Флоке, сильний зв'язок квазістаціонарних станів з континуумом, суттєвий внесок багатофотонних резонансів і, нарешті, більш вагома роль релятивістського багатоелектронного остову атомної системи. Картина стає більш складною за наявності поблизу однофотонних резонансних переходів з квазі-випадковою відбудовою від резонансу і квантовим фазовим зсувом внаслідок розсіювання рідбергівського електрона на важкому релятивістському атомному остові. Перелічені фізичні аспекти пояснюють цілком нерегулярну динаміку квазістаціонарних станів важких релятивістських рідбергівських атомних систем при накладенні на атом мікрохвильового поля. Фактично мова йде про наявність в динаміці релятивістських рідбергівських атомів у мікрохвильовому полі елементів динамічного хаосу, який ми називаємо релятивістським квантовим хаосом.

#### 4.3. Висновки до розділу 4

Основний висновок проведених досліджень полягає у наступному:

1. На основі нового релятивістського методу опису важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі виконано кількісне моделювання спектроскопії та динаміки іонізації лужних атомів Rb (тест), у рідбергівських станах ( $n=60-80$ ) в мікрохвильовому полі ( $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87$ ГГц, 36 ГГц), розраховано залежності ймовірності  $P$  іонізації у рідбергівських станах від параметрів поля, які для Rb добре, значно краще всіх існуючих методів, узгоджуються з наявними експериментальними результатами Munich group для Rb:  $n_0>60$ ,  $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$  ат.од,  $\omega/2\pi = 8.87$ ГГц);

2. На основі нового релятивістського методу опису важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі виконано кількісне моделювання спектроскопії та динаміки іонізації лужних атомів Cs, Fr у рідбергівських станах ( $n=60-80$ ) в мікрохвильовому полі ( $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87$  ГГц, 36 ГГц), розраховано залежності імовірності  $P$  іонізації у рідбергівських станах від параметрів поля, причому для атомів Cs, Fr дані по іонізаційній динаміці передбачені вперше (експеримент або інші теорії відсутні).



## ВИСНОВКИ

Основні результати роботи полягають у наступному:

1. Розроблено принципово новий в спектроскопії релятивістських важких атомних систем квантово-динамічний підхід до опису енергетичних та спектроскопічних властивостей (енергії рівнів, сили осциляторів, редуковані матричні елементи радіаційних E1 переходів, часи життя) важких рідбергівських атомів у вільному стані; новий підхід в спектроскопії рідбергівських атомів базується на *ab initio* релятивістському методі ефективного потенціалу в межах енергетичного підходу (S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу) з оптимізацією базисів релятивістських орбіталей, безумовним дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та коректним прецизійним урахуванням ОК ефектів на основі послідовних багаточастинкових функціоналів електронної густини, а також урахуванням ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомах, який досі в достатній мірі принципово не враховано ні в одній моделі або методі, що використовуються у спектроскопії важких рідбергівських атомів.

2. На основі нового спектроскопічного підходу проведено масові тестові розрахунки енергій рівнів, радіаційних ширин (амплітуд переходів) для переходів  $n'l_{j1/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах важких Li-подібних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$  (зокрема, іонів  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Kr}^{33+}$ ,  $\text{Rb}^{34+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ ,  $\text{Mo}^{39+}$ ,  $\text{Cs}^{52+}$ ,  $\text{Tm}^{66+}$ ,  $\text{Fr}^{67+}$ ,  $\text{Fr}^{84+}$ ), низько розташованих переходів  $n'l_j - n'l'j'$  ( $n=5-10$ ,  $l=0-4$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах атомів Rb, Cs, Fr, і показано, що новий підхід у порівнянні з експериментом переважає по точності як спрощені методи типу НКД, квазікласичні моделі, так і методи типу РХФ та ДФ та ін. за рахунок оптимізації рідбергівських орбіталей, прецизійного урахування ОК ефектів, в т.ч. ефекту некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму.

3. Вперше отримано прецизійні дані по енергетичним та спектроскопічним характеристикам (енергії рівнів, радіаційні ширини, амплітуди переходів, час життя рідбергівських станів) рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, для

переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3/2} \rightarrow n'D_{3/2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; для рідбергівського францію у переважній більшості вперше розраховано та кількісно передбачено спектроскопічні дані по ймовірностям переходів, часам життя рідбергівських станів та переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$ ,  $7P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n=20-80$ ).

4. На основі нового релятивістського методу опису важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі виконано кількісне моделювання спектроскопії та динаміки іонізації лужних атомів Rb (тест), у рідбергівських станах ( $n=60-80$ ) в мікрохвильовому полі ( $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87$  ГГц, 36 ГГц), розраховано залежності імовірності  $P$  іонізації у рідбергівських станах від параметрів поля, які для Rb добре, значно краще всіх існуючих методів, узгоджуються з наявними експериментальними результатами Munich group для Rb:  $n_0 > 60$ ,  $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$  ат.од,  $\omega/2\pi = 8.87$  ГГц);

5. На основі нового релятивістського методу опису важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі виконано кількісне моделювання спектроскопії та динаміки іонізації лужних атомів Cs, Fr у рідбергівських станах ( $n=60-80$ ) в мікрохвильовому полі ( $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87$  ГГц, 36 ГГц), розраховано залежності імовірності  $P$  іонізації у рідбергівських станах від параметрів поля, причому для атомів Cs, Fr дані по іонізаційній динаміці передбачені вперше (експеримент або інші теорії відсутні).

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Grant I.P. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules*. Oxford, 2008. 650P.
2. Quiney H., *Relativistic Quantum Mechanics of Atoms and Molecules Quiney H. New Trends in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. Berlin: Springer, 2002. Vol.6. P.135–173.
3. Glushkov A.V. *Relativistic Quantum Theory. Quantum mechanics of Atomic Systems*. Odessa: Astroprint, 2008. 700 P.
4. Glushkov A.V. Advanced relativistic energy approach to radiative decay processes in multielectron atoms and multicharged ions. *Advances in Theory of Quantum Systems in Chem. and Phys. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. / eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G.Delgado-Barrio. Berlin: Springer, 2012.Vol.26. P.231-253.
5. Glushkov A.V. Operator perturbation theory for atomic systems in a strong DC electric field. *Adv.in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry*. / eds. M.Hotokka, J.Maruani, E. Brändas, G.Delgado-Barrio. Berlin: Springer, 2013. Vol.28. Part2. P.161-178.
6. Khetselius O. *Hyperfine structure of atomic spectra*. Odessa: Astroprint, 2008.
7. Ivanov L.N., Letokhov V.S. Autoionization states of multi-electron atoms. *Com. Of Modern Phys. D. Atom. and Mol.Phys.* 1985. Vol.3. P.169-184.; Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S. *Nuclear quantum optics*. Moscow, 1991 (preprint ISAN, USSR Academy of Sciences, NAS-3)
8. Khetselius O.Y. *Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems*. Odessa: Astroprint, 2011. 405 P.
9. Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L. et al. *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Physics and*

- Chemistry*. / eds.: S.Wilson, P.J.Grout, J. Maruani, G. Delgado-Barrio, P. Piecuch. Berlin: Springer, 2008. Vol.18. P.505-522.
10. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry*. / eds. P.Hoggan, E.Brandas, J.Maruani, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch. Berlin: Springer, 2011. Vol.22. P.51-70.
  11. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P. Radiation decay of atomic states. Generalized energy approach *In the book: Autoionization phenomena in atoms*. Moscow: MSU Publishing House, 1986. P.300.
  12. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions. *Phys. Lett.A.* , 1992. Vol.170. P.33-38.
  13. Relativistic calculation of spectra of 2-2 transitions in O-and F-like atomic ions / Driker M.N., Ivanova E.P., Ivanov L.N., Shestakov A.F. *J.Quant.Spectr. Rad.Transfer*. 1982. Vol.28. N6. P.531-535.
  14. Glushkov A.V., Ivanova E.P. Theoretical study of multicharged ions spectra of F-, Ne-isoelectronic sequences. *Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer*. USA, 1986. Vol.36. N2. P.127-145.
  15. Ivanov L.N.,Ivanova E.P., Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra *Atom.Data Nucl .Data Tab*. 1979. Vol.23. P.95-121.
  16. High Order Corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the Model Zeroth Approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions. / Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. *Phys.Scripta*. 1985. Vol.32,N5. P.513-522.  
URL: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/32/5/011>.
  17. Martin G. NIST Spectra Database, version 2.0: Washington, 2004. URL: <http://physics.nist.gov/asd>; Moore C., NBS Spectra Database: Washington, 1987.

18. Reiher G., Martin G., Wiese W. Atomic oscillator-strength distributions in spectral series of Li isoelectronic sequence *Phys. Rev. A.* 1976. Vol.13. P.699-714; Martin G., Wiese W. Tables of critically evaluated oscillator strengths for lithium isoelectronic sequence *Journ. of Phys. Chem. Ref. Data.* 1976. Vol.5. P.537-570.
19. Weiss A.W., Hartree-Fock line strengths for lithium, sodium and copper isoelectronic sequences *J.Quant. Spectr.Rad.Tr.* 1977. Vol.18. P.481-491.
20. Gounand F. Calculation of radial matrix elements and Radiative lifetimes for highly excited states of alkali atoms using the Coulomb approximation *Journ. de Phys.* 1979. Vol.40. P.457-460.
21. Lindgard A., Nielsen S.E. Transition probabilities for the alkali isoelectronic sequences: LiI, NaI, KI, RbI, CsI, FrI. *Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.* 1977. Vol.19. P.533-633.; Theodosiou C.E. Lifetimes of alkali-metal—atom Rydberg states. *Phys. Rev. A.* 1983. Vol.30. P.2881-2888.
22. Nahar S. N., Relativistic fine structure oscillator strengths for Li-like ions: C IV - Si XII, SXIV, ArXVI, CaXVIII, Ti XX, Cr XXII, Ni XXVI. *Astronomy and Astrophys.* 2002. Vol.389. P.716-728.
23. Schweizer W., Faßbinder P., Gonzalez R. Model potentials for alkali metal atoms and Li-like ions *Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.* 1999. Vol.72. P.33-55.
24. Zhi-WenW., Ye Li. Calculations of the transition energies and oscillator strengths for Cu<sup>26+</sup> ion. *Journ. of Atom. Mol. Sci.* 2010. Vol.1. P.62-67.
25. Lianhua Qu, Zhiwen Wang, Baiwen Li. Theory of oscillator strength of the lithium isoelectronic sequence *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1998. Vol.31. P.3601-3608.; Hu M-H, Wang Z-W. Oscillator strengths for 2S–n2P transitions of Li isoelectronic sequence from Z=11-20. *Chin.Phys.B.* 2009. Vol.18. P.2244-2253.
26. Precision lifetime measurements of 6p<sup>2</sup>P<sub>1/2,3/2</sub> states in atomic cesium / Rafac R., Tanner C., Livingston A. *Phys.Rev.A.* 1993. Vol.50. P.R1976-R1979.; Ali Nadeem Ali, Haq S.U. Photoionization from the 5p 2P<sub>3/2</sub> state of rubidium. *Phys. Rev. A.* 2011. Vol.83. P.063404 (8p.).

27. Two-Photon. Spectroscopy of the Francium  $8S_{1/2}$  Level/ Simsarian J., Zhao W., Orozco L., Sprouse G. *Phys.Rev.A*. 1999. Vol.59. P.195-202.
28. Measurement of the electric dipole moments for transitions to rubidium Rydberg states via Autler-Townes splitting/ Piotrowicz M., et al. 14 Mar 2011.( arXiv:1103.0109v2 [quant-ph])
29. Safronova U.I., Johnson W., Derevianko A. Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms. *Phys.Rev.A*. 1999. Vol.60. P.4476-4486.
30. Marinescu M., Vranceanu D., Sadeghpour H.P. Radiative transitions and van der Waals coefficients for francium. *Phys. Rev. A*. 1998. Vol.58. P.4259-4262; Marinescu M., Florescu V. and Dalgarno A. Two-photon excitation of the  $5/2$  D states of rubidium. *Phys.Rev.A*. 1993. Vol. 49(2). P.2714-2718
31. Safronova M.S., Safronova U.I. Critically evaluated theoretical energies, lifetimes, hyperfine constants, and multipole polarizabilities in  $^{87}\text{Rb}$ . *Phys.Rev.A*. 2011. Vol.83. P.052508; State-insensitive bichromatic optical trapping/ Safronova M.S., Williams C.J., Clark C.W. *Phys. Rev. A*. 2003. Vol. 69. P. 022509 (5p.).
32. Lifetime measurement of ultracold caesium Rydberg states/ Zhi-Gang Feng, Lin-Jie Zhang, Jian-Ming Zhao, Chang-Yong Liand Suo-Tang Jia. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2009. Vol.42. P.145303 (5P.); Measurement of Polarizability of Cesium  $nD$  State in Magneto-Optical Trap / J.Zhao et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2011. Vol. 80. P. 034303 (7P.).
33. van Wijngaarden W.A., Xia J. Lifetimes and polarizabilities of low lying S,P, D states of francium. *Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer.* 1999. Vol.61. N3.- P.557-561.; Huang S., Sun Q., Calculation of the Rydberg Energy Levels for Francium Atom, *Phys.Res.Internat.* 2010. Vol.33. P. 203497 (5P.).
34. Weber K. H., Sansonetti C. J. Accurate energies of  $nS$ ,  $nP$ ,  $nD$ ,  $nF$  and  $nG$  levels of neutral cesium. *Phys.Rev.A*. 1987. Vol. 35. P.4650–4660.
35. Martin I., Karwowski J. Quantum defect orbitals and the Dirac second-order equation. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1991. Vol.23. P.1539-1543.

36. Зилитис В.А. Теоретическое определение сил осцилляторов для главных серий литиеподобных ионов *Опт. Спектр.* 1983 Т.55. С.215-218.
37. Zilitis V.A. Determination of Rydberg  $D$  and  $F$  energy levels of Cs-like ions by method of interpolation of relativistic quantum defects. *Opt. Spectr.* 2012. Vol.113. P.231-233.
38. Tkach T.B. Optimized relativistic model potential method and quantum defect approximation in theory of radiative transitions in spectra of multicharged ions. *Photoelectronics.* 2012. Vol.21. P.14-17.
39. Froese Fischer C., Tachiev G. Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences. *Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.* 2003. Vol.87. P.1–184; Froese Fischer C., Tachiev G., Irimia A. Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences. *Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.* 2006. Vol.92. P.607–812.
40. Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. Approaches to the development of gamma ray lasers. *Rev.Mod.Phys.* 1981. Vol.53, N3. P.687-742.
41. Goldansky V.I., Letokhov V.S. On the effect of laser radiation on nuclear decay processes. *JETP.* 1973. T.67. No. 2(8). P. 513-516;
42. Ivanov L.N., Letokhov V.S. Spectrum of electron-nuclear gamma transitions of a nucleus in an atom. *JETP.* 1987. T.93. No. 2(8). P.396-402.
43. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S. Nuclear quantum optics. 1991. 16P. (preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Acad. Sci.(ISAN), AS N4).
44. Glushkov A.V., Ivanov L.N. DC strong - field Stark effect: New consistent quantum-mechanical approach. *J.Phys.B: At.Mol.Opt. Phys.* 1993. Vol.26. P.L379-386.; Glushkov A.V. Negative ions of inert gases. *JETP Lett.* 1992. Vol.55. P.97-100.
45. Feigenbaum M. J. Quantitative universality for a class of non-linear transformations. *J.Stat.Phys.* 1978. Vol.19. P.25-52.; Feigenbaum M. J. The metric uni-

- versal properties of period doubling bifurcations and the spectrum for a route to turbulence. *Ann. New York. Acad. Sci.* 1980. Vol.357. P.330-336.
46. Bunimovich L. *Dynamical Systems, Ergodic Theory and Applications*. Berlin: Springer, 2000. P. 210.; Sinai Ya.G. *Ergodic Theory and Dynamical Systems*. Berlin: Springer, 2010. P.450.
  47. Ullmo D. Many-body physics and quantum chaos. *Rep. Prog. Phys.* 2008. Vol.71. P.026001 (43p).; *Semiconductor lasers: Stability, Instability, Chaos.* / Ed. Ohtsubo J. London: Taylor and Francis, 2006. P.356.
  48. Steiner F. Quantum chaos. *Festschrift Univ.Hamburg: Schlaglichter der Forschung 75* / eds .R.Ansorge. Hamburg: Dietrich Reimer Verlag, 1993. P.543-564.; Flambaum V. V., Gribakina A. A., Gribakin G. F. Narrow chaotic compound autoionizing states in atomic spectra. *Phys.Rev.A.* 1996. Vol.53. P. 2066-2079.
  49. Connerade J.P. Quantum chaos and many electron atoms . *J.Phys.B: Atom.Mol.Opt .Phys.* 1997. Vol.30. P.L31-38
  50. Berman G.P., Kolovsky A.R. Quantum chaos in the interaction of multilevel quantum systems with a field of coherent radiation. *UFN*, 1992. T.162. P.95-160.
  51. Ragozin E.N., I.I. Sobelman. Laser sources in the soft x-ray region of the spectrum .*UFN*. 2005. T.175. P.1139-1141.
  52. Kunisz M.D. Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths. *Acta Phys.Pol.* 1982. Vol.A62. P.285-296.
  53. Ivanov L.N., Letokhov V.S. Selective ionization of atoms in electric and laser fields. *Quantum Electronics*. 1975. T.2, N3. P.585-590.; Seaton M.J. Quantum defect theory. *Rep. Prog. Phys.* 1983. Vol.46. P.167-258.
  54. Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum mechanics and path integrals*. N.-Y.: McGraw-Hill Co., 1965. P. 382.
  55. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика*. Москва.: Наука, 1977. С.700.; Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. *Рассеяние, реакции и*



- распады в нерелятивистской квантовой механике. Москва: Наука, 1971. С.238.
56. Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода. УФН. 1987. Т. 153(3). С.379-422.
  57. Damburg R.J., Kolosov V.V. Hydrogen atom in uniform electric field. *J.Phys.B.: Atom.,Mol.,Opt.Phys.* 1979. V.12. P.2637-2643.
  58. Kazansky A.I., Ostrovsky V.N. Diabatic quasi-stationary states and unstable closed trajectories. *JETP*. 1989. Т.95, No. 3. 3. 1162-1168; Turbiner A.V. On the algebraization of perturbation theory in quantum mechanics. *Letters to JETP*.1981.Т.33, No. 3. P.15-18.
  59. Strong field Stark effect: perturbation theory and  $1/n$  expansion / Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A., Weinberg V.M. *Phys.Lett.A*. 1990. V.149,N9. P.418-424; Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.  $1/n$  expansion for the Stark effect in Rydberg atoms. *Phys.Lett.A*. 1990. V.149. P.425-433.
  60. Kornev A., Zon B. Rydberg spectra of atoms and positive ions in the Thomas-Fermi model. *J.Phys.B:At.Mol.Opt. Phys.* 2003. Vol.36. P.4027-4033.
  61. Stark and Zeemane structure of Rydberg states of alkali-metal atoms/ Zimmerman M., Littman M., Kash M., Kleppner D. *Phys.Rev.A*. 1979. V.20,N6. P.2251-2275.
  62. Brändas E., Floelich P. Pade approximants to Stark effect energies for excited states of hydrogen. *Phys. Rev.A*. 1977. Vol.16. P.2207-2216; Hehenberger M., McIntosh H.V., Brändas E. Weil's theory applied to the Stark effect in the hydrogen atom. *Phys.Rev.* 1973. V.10. P.1494-1506.
  63. Stark effect in hydrogen: Dispersion relations, asymptotic formulas and calculation of the ionization rate via high-order perturbation theory/ Silverstone H., Adams B., Cizek J., Otto P. *Phys.Rev. Lett.* 1979. Vol.43,N20. P.1498-1501.
  64. Anokhin S.B., Ivanov M.V., Hydrogen and lithium atom in a strong electric field. *Opt. Spectr.* 1983. Т.59. P.499-502.; Ivanov M.V. Grid calculation of energies and widths for ground state of H molecule in strong electric field. *Opt.Spectr.* 1993. V.78(5). P.711-713.

65. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Consistent quantum mechanical approach to the problem of the Stark effect in a strong field: Operator form of perturbation theory. Atoms of H, Li, Tm in an electric field. *Materials III Semin. on Atomic Spectroscopy*. Chernogolovka, 1992. P.III-3. P.21.; Glushkov A.V., Ivanov L.N. DC Strong Field Stark effect: consistent quantum mechanical approach. *Preprint N92-1-AS.-Institute of Spectroscopy of RAN*. Troitsk, 1992. P. 13.
66. Glushkov A.V. Atoms and diatomic molecules in external effective fields of N-component materials Computer modeling of elementary atomic processes. Kiev, 1992. P.121-123.; Glushkov A.V., Ivanov L.N. A broadening of the thulium atom autoionization resonances in a weak electric field. Troitsk,1992. P.6. (preprint N92. 2-AS. Institute of Spectroscopy of RAN.)
67. Different approaches to Stark effect: Application to H ground state/Filho O, Fonseca A.,Nazareno H.,Guimaraes P. *Phys.Rev.A*. 1990. Vol.42. P.4008-4013.
68. Stambulchik E., Maron I. Stark effect of high- $n$  hydrogen-like transitions: quasi-continuous approximation. *J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys*. 2008 Vol.41. P.095703 (9p).
69. Theoretical complex Stark energies of lithium by a complex scaling plus the B-spline approach/ Meng H-Y.,et al. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys*. 2008. Vol.41. P.155003 (12p).
70. Генерация быстрых заряженных частиц и сверхсильных магнитных полей при взаимодействии сверхкоротких интенсивных лазерных импульсов с твердотельными мишенями/ В.С.Беляев, В.П. Крайнов, В.С.Лисица, А.П. Матафонов. *УФН*, 2008. Т.178. С. 823-852.
71. Harmin D.A. Theory of the non-hydrogenic Stark Effect. *Phys.Rev.Lett*. 1982. Vol.49,N2. P.128-131.
72. Glushkov A.V., Ambrosov S.V. Chaos and regular dynamics of complex atomic systems in magnetic field. *Journ. of Techn. Phys*. 1996. Vol.37, N3-3. P.347-348.

73. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L., Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the  $\beta$ -Decay parameters. *Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics* / eds. Piecuch P., Maruani J., Delgado-Barrio G., Wilson S. Berlin: Springer, 2009. Vol. 20. P. 125-172.
74. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Ambrosov S.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Consistent Quantum Approach. *Journ. of Techn. Phys.* 1997. Vol.38,N2. P.215-218.
75. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Shpinareva I.M. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Nonlinear Effects. Autoionization Resonances in Tm. *Journ.of Techn.Phys.* 1997. Vol.38, N2. P.211-213.
76. QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A. *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.* Springer, 2008. Vol.18. P. 201-220.
77. A.V. Glushkov, A.V. Loboda. Calculation of the characteristics of radiation lines of multi-photon absorption and emission during the interaction of an atom with a laser pulse . *Journal. Appl. Spektr.* 2007. T.74, No. 2. P.271-273.
78. Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields/ Dunning F.B., et al. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2009. Vol.42. P.022001.(22p.)
79. Spectroscopic study and multichannel quantum defect theory analysis of the Stark effect in Rydberg states of neon/ Grutter M., Zehnder O., Softley T.P., Merkt F. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2008. Vol.41. P.115001.(11p.)
80. Kohn W., Sham L., Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.A.* 1965. Vol. 137. P.1697-1710.; Green A.E.S., Sellin D.L., Eachor A.S. Analytic independent particle model for atoms. *Phys.Rev.A.* 1969. Vol.184,N1. P.1-9.

81. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. New laser-electron nuclear effects in the nuclear  $\gamma$  transition spectra in atomic and molecular systems. *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. Springer, 2008. Vol.18. P.221-233.
82. Глушков А.В. Новый метод расчета спектра, энергии связи отрицательных молекулярных ионов. *Онм.Спектр*. 1992. Т.72. N1. С.55-61.; Глушков А.В. Новый подход в теоретическом определении потенциалов ионизации молекул на основе метода функций Грина. *Журн. Физ. химии*. 1992. Т.66. N10. С.2671-2677.
83. QED Theory of Radiation Emission and Absorption Lines for Atoms and Atomic Ensembles in a Strong Laser Field/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E., Svinarenko A. *Physica Scripta*. 2009. Vol.133. P.305001 (6p).
84. Khetselius O.Yu. Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products. *Physica Scripta*. 2009. Vol.133. P.305090-1-7.
85. Gutzwiller M. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. Springer-Verlag, 1990. 720p.
86. Kleppner D., Chun-Ho I., Welch G.R. Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos/ eds. J.C.Gay. N-Y.: Kluwer, 1990. P.21-48.; Stark structure of Rydberg states of alkali-metal atoms/Kleppner D., Myron L., Zimmerman M., Littman M.G., Kash M. *Phys.Rev.A*. 1977. Vol.20. P.2251-2273.
87. Глушков А.В. Томас-Фермиевская модель многочастичного осциллятора.: Изв.вузов. Сер.Физика. 1992. N7. С.41-47. ; Kornev A., Zon B.A. Rydberg spectra of atoms and positive ions in Thomas–Fermi model. *J.Phys. B. at. Mol. Opt. Phys.* 2003. Vol.36. P.4027-4033.
88. Influence of oscillating electric field on the recurrence spectra of a Li Rydberg atom in strong magnetic field/ Wang D., Din S., Liu S. *J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2003. V.36. P.4225-4232.

89. Hegerfeldt G.C., Henneberg R. Level statistics for continuous energy spectra with application to H atom in crossed electric and magnetic field. *Phys.Rev.A*. 1993. Vol.49. P.3531-3540.
90. Rydberg-electron wave-packet dynamics in electromagnetic fields and evidence for stabilization/ Fielding H., Wals.J., van der Zande W., van den Heuvel H. *Phys. Rev.A* 1995-Vol.51. P.611-618.
91. Rao J., Delande D., Taylor K. Quantum manifestations of scattering orbits in scaled spectrum of non-hydrogenic atom in crossed fields. *J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2002. V.35. P.1-10.; Scaling relations for the hydrogen atom in a harmonic field: classical chaos and quantum suppression of diffusion/Kaulakys B., Gontis V., HermannG., Scharmann A. *Phys. Lett.* 1991. Vol.159. P.261-265.
92. Svinarenko A.A. Spectroscopy of autoionization states in spectra of helium, barium and lead atoms: New spectral data and chaos effect. *Photoelectronics*. 2013. Vol.22. P.31-36.; Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas/Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Tkach T.B. *Physica Scripta (IOP, London, UK)*. 2013. Vol.153. P.01437 (5p.).
93. Khetselius O.Yu., Relativistic Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure Parameters for Some Heavy-Element Isotopes. *Int. Journ. of Quantum Chemistry*. 2009. Vol.109. N13. P.3330-3335.
94. Quantum stochastic modelling energy transfer and effect of rotational and v-t relaxation on multi-photon excitation and dissociation for  $CF_3Br$  molecules/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Shpinareva I.M., Kozlovskaya V.P., Gura V.I. *Int. Journ.Quant.Chem.* 2005. Vol.104. N4. P.512-516.
95. Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry*, /eds. P.Hoggan, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch. Berlin: Springer, 2011.Vol.22. P.51-70.; Sensing the capture of negative muon by atoms: Energy

- approach/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Loboda A.V. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2006. N3. P.21-26.
96. Consistent quantum theory of the recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V. *J.Phys. CS.* 2006. Vol.35. P.425-430.
  97. Seaton M.J. Quantum defect theory. *Rep.Prog.Phys.* 1983. Vol.46. P.167-195.
  98. Ho Y-K., The method of complex coordinate rotations and its application to atomic collision processes. *Phys. Rep.* 1983. Vol.99. P.3-83.
  99. Spectrum of plasma containing Ne-and Na-like ions: Consistent account for Rydberg and autoionization Rydberg series in balance equations/ Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.V., Glushkov A.V. *Phys. Scripta.* 1996. Vol.53. P.653-667. Иванов Л.Н., Иванова Е.П. Метод штурмовских орбиталей в расчетах физических характеристик излучения атомов. *ЖЭТФ.* 1996. Т.110. С.483-498.
  100. Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths. *Phys. Rev.A.* 1993. Vol.48. P.4365-4373.
  101. Desclaux J.P., Multiconfiguration relativistic Dirac-Fock program *Comp. Phys. Commun.* 1975. Vol.9. N1. P.31-45. ; Fuentealba P., Stoll H. On the reliability of semiempirical pseudopotentials: simulation of Hartree-Fock and Dirac-Fock methods *J. Phys. B: At.Mol.Opt. Phys.* 1983. Vol.16. N2. P.323-328.
  102. Dietz K., Heß B.A. Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics. *Phys. Scripta.* 1989. Vol.39. P.682-688.
  103. Berk F. Atoms in astrophysics / eds. F. Burke, I. Eisner, D. Hammer, I. Percival. Moscow: Mir. 1986. 340P.
  104. Gell-Mann M., Low F. Bound states in quantum field theory. *Phys. Rev.* 1951. Vol.83. P.350-356.

105. Brown M.A., Dmitriev Yu.Yu., Labzovsky L.N. Relativistic theory of the heavy atom. *JETF*. 1969. T.57, No.6. P.2189- 2198.; Brown M.A., Gurchumelia A.D., Safronova U.I. Relativistic theory of the atom. Moscow.: Nauka, 1983. 268C.
106. Oks E.A. Spectroscopy of plasma with quasi-monochromatic electric fields. Moscow: Energoatomizdat, 1990. 240C.
107. Delone N.B., Krainov V.P. Atom in a strong light field. Moscow.: Atomizdat, 1993. 370C.
108. Letokhov V.S. Nonlinear selective photoprocesses in atoms and molecules. Moscow: Nauka, 1993. 408C.
109. Radtsig A.A., Smirnov B.M. Handbook of Atomic and Molecular Physics. M.: Energoizdat, 1986. 240C.
110. Corlis C., Sugar J. Energy levels of iron. NIST atomic spectra database (version 3.1.3; 2009), *J.Phys.Ch.Ref.Dat.* 1982. Vol.11. P.135-241. URL : <http://physics.nist.gov/asd3>.
111. Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G. Relativistic effects in atoms and molecules. Vancouver: Elsevier, 2001. 645p.
112. Rydberg atoms in parallel microwave and magnetic fields- classical dynamics/ Cheng T., Liu J., Chen S., Guo H. *Phys.Lett.A*. 2000. V.265. P.384-390.
113. Wang D., Din S., Liu S. Influence of oscillating electric field on the recurrence spectra of a Li Rydberg atom in strong magnetic field. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 2003. V.36. P.4225-4232.
114. Hegerfeldt G.C., Henneberg R. Level statistics for continuous energy spectra with application to H atom in crossed electric and magnetic field. *Phys. Rev.A*. 1994. Vol.49. P.3531-3540.
115. Rydberg-electron wave-packet dynamics in electromagnetic fields and evidence for stabilization/ Fielding H., Wals.J., van der Zande W., van den Heuvell H. *Phys.Rev. A* 1995 Vol.51. P. 611-618.
116. Rao J., Delande D., Taylor K. Quantum manifestations of scattering orbits in scaled spectrum of non-hydrogenic atom in crossed fields. *J. Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 2002. V.35. P.1-10.; Scaling relations for the hydrogen atom

- in a harmonic field: classical chaos and quantum suppression of diffusion/Kaulakys B., Gontis V., Hermann G., Scharmann A. *Phys.Lett.* 1991. Vol.159. P.261-265.
117. Buchleitner A., Delande D. Secular motion of the three-dimensional Rydberg states in a microwave field. *Phys. Rev.A.* 1997. Vol.55. P. 1585-1598.
118. Krug A. Residual symmetries in the spectrum of periodically driven alkali Rydberg states/ Krug A., Buchleitner A. *Europhys. Lett.* 2000. Vol.49. P.176-180.; Chaotic Ionization of non-hydrogenic alkali Rydberg states. *Phys.Rev.Lett.* 2001. Vol.86. P.3538-3541.
119. Krug A., Buchleitner A. Microwave ionization alkali-metal Rydberg states in a realistic numerical experiment. *Phys. Rev. A.* 2002. Vol.66. P. 053416 (10p.).
120. Koch P.M., Bayfield J.E., Gardner L.D. Observation of resonances in microwave-stimulated Multiphoton excitation and ionization of highly excited hydrogen atoms. *Phys.Rev.Lett.* 1977. Vol.39. P.76-80.
121. Koch P.M., van Leeuwen K.A.H. The importance of resonances in microwave ionization of excited atoms. *Phys.Rep.* 1996. Vol.255. P.289-364.
122. Ionization of sodium and lithium Rydberg atoms by 10-MHz to 15-GHz electric fields/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Dexter J. L., Pillet P. *Phys.Rev.A.* 1991. Vol. 44. P.1859-1872.
123. Gallagher T. F., Noel M. W., Griffith M. W. Classical subharmonic resonances in microwave ionization of lithium Rydberg atoms. *Phys. Rev.A.* 2000. Vol. 62. P.063401-063412.
124. Microwave ionization of hydrogenlike Li and Na/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Pillet P., Fu P., Newman J.B. *Phys.Rev.A.* 1989. Vol.39. P. 4545-4554.
125. Microwave ionization of Rydberg states of the barium ion/ Gallagher T. F., Seng M., Eichmann U., Lange V., Sandner W. *Eur.Phys.J.D.* 1998. Vol.3. P.21-26.
126. From coherent to noise-induced microwave ionization of Rydberg atoms/ Walther H., et. Al. *Phys.Rev.A* 1995. Vol.51. P.4862-4876.



127. Experimental study of quantum and classical limits in microwave ionization of rubidium Rydberg atoms/ Arndt M., Buchleitner A., Mantegna R., Walther H. *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol.67. P.2435-2442.
128. Physics of the laser-photoionization atomic processes in the isotopes and gases separator devices: new optimal schemes/ Glushkov A.V. et al. *Sensors Electronics and Microsystems Techn.* 2011. Vol. 2(8), N1. P.27-35.
129. 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.
130. Ignatenko A.V., Microwave ionization of lithium rydberg atoms and Wannier-Mott exciton: Regular and stochastic features. *Photoelectronics.* 2006. N15. P. 108-111.
131. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum/ Glushkov A.V. et.al. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine).* 2008. N4. P.5-11.
132. 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. *Europe. Phys. Journ. ST.* 2008. Vol.160. P.195-203.
133. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. Spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear effects in multiatomic molecules. *Molec. Physics (UK).* 2008. Vol. 106. N9,10. P.1257-1260.
134. Plummer M., Noble C.J. Non-hermitian dynamics of argon atoms at 248 nm. *J.Phys. B: At.Mol.Opt.Phys.* 2003. Vol.36. P.219-226.
135. Staudt A., Keitel C.H. Stabilization of He in intense high-frequency laser pulses beyond dipole approximation. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 2003. Vol. 36. P.203-209.
136. Hasbani R., Cormier E., Bachau H. Resonant and non-resonant ionization of He by XUV short intense pulses. *J.Phys.B: At.Mol.Phys.* 2000. Vol. 33. P.2101-2116.

137. Bucksbaum P.H., Sanpera A., Lewenstein M. Resonant double-excitation induced by wiggling ATI electrons. *J.Phys.B: At.Mol. Opt.Phys.* 1997. Vol. 30. P.843-850.
138. Laughlin C., Victor G.A. Laughlin C. Model potential method. *Adv. Atom. Mol. Phys.* 1988. Vol.25. P.163-193.
139. Guimaraes M.N., Prudente F.V. A study of the confined hydrogen atom using the finite element method. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 2005. Vol.38. P.2811-2825.
140. Courade E., Anderlini M., Ciampini D. Etal, Two-photon ionization of cold rubidium atoms with near resonant intermediate state. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 2003. Vol.37. P.967-979.
141. Mercouris T., Nikolaides C.A. Solution of the many-electron many-photon problem for strong fields: Application to  $\text{Li}^-$  in one and two-colour laser fields. *Phys.Rev.A.* 2003. Vol.67. P.063403-1-063403-12.
142. Kamta G.L., Starace A.F. Elucidating the mechanisms of double ionization using intense half-cycle, single-cycle and double-half-cycle pulses. *Phys.Rev.A.* 2003. Vol.68. P.043413-1-043413-11.
143. Relativistic perturbation method for studying radiation decay of highly-excited manyelectron atoms: Tm/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L, Ivanova E., Angelov D. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 1986. Vol.19. P. 2053-2069.
144. Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., Angelov D.A. Autoionization decay of excited Rydberg Tm states. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 1988. Vol.21. P.3877-3890.; Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N. Autoionizing Rydberg states of thulium. Re-orientation decay due to monopole interaction. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 1991. Vol.23. P.4147-4158.
145. Glushkov A.V., Ambrosov S.V. Calculation of the spectroscopic characteristics of complex atoms and ions in electric field; the Thulium. Bound Volume of Paris-Meudon Observatory. Paris, France. 1996. P.139-140.

146. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models/ Glushkov A.V. et. al. *Nucl. Phys.A.* 2003. Vol.733. P.21-25.
147. Relativistic Quantum Chemistry: Advanced Approach to Construction of the Green's Function of the Dirac Equation with Complex Energy and Mean-Field Nuclear Potential/ Glushkov A.V. et. al. *Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theor. Chem. and Phys./eds. M.Nascimento, J.Maruardi, E.Brändas, G.Delgado-Barrio. Springer, 2015 Vol. 29. Ch.12. P.197-218.*
148. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum/ Glushkov A.V. et.al: *Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine).* 2008. N3. P.5-11.
149. DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A. *Int. Journ. Quantum Chem.* 2003. Vol. 99. N5. P.936-940.
150. Ivanov L.N., Ivanova E.P., Glushkov A.V. PC atomic complex ‘Superatom-ISAN’: main possibilities and programs., 1991. 96P. (e-Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences, ASN1.); Cowan D. Methods of atomic structure calculations . N.Y.:Acad., 1973. 280P.
151. PC Program Complex for calculation of atomic characteristics in external electric and magnetic field: SuperAtom – Blocks “Stark-Zeemane”, “StarkMix”/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V. Odessa. N Ph-L-E3. 2003. 45P. (preprint of Physics Institute of I.I.Mechnikov Odessa National University.)
152. Теория кооперативных квантовых эффектов в атомах в сильном электромагнитном поле/ Глушков А.В., Хецелиус О.Ю., Дубровская Ю.В., Терновский В.Б. Одесса: Вид-во ТЕС, 2015. 405С.
153. Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B. Odessa: OSENU ТЕС, 2013.180P.

154. Advanced relativistic energy approach to radiation decay processes in atomic systems/ Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Nikola L.V. *Photoelectronics*. 2015. Vol.23. P.11-22.
155. Advanced relativistic model potential approach to calculation of the radiation transition and ionization characteristics for Rydberg atoms/ Ternovsky V.B., Florko T.A., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Tkach T.B. *Photoelectronics*. 2013. N23. P.91-95.
156. New relativistic model potential approach to sensing radiative transitions probabilities in spectra of heavy Rydberg atomic systems/ Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Zaichko P.A., Khetselius O.Yu., Florko T.A. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2015. Vol.12, N1. P.47-52.
157. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Optimized quasiparticle density functional approach for complex atoms: Spectroscopic Factors. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.11-24.
158. Makushkina M.P., Khetselius O.Yu., New formalism of relativistic many-body perturbation theory to computing hyperfine structure parameters of complex atomic systems *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.31-36.
159. Ternovsky E.V., Khetselius O.Yu., Spectral parameters of Li-like multicharged ions in plasmas within consistent relativistic approach. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.41-47.
160. Khetselius O.Yu., Mykhailov, O.L Relativistic theory of hyperfine structure of the Li-like multicharged ions. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.48-52.
161. Chernyshev A. S., Efimova E. A., Glushkov A. V. Relativistic approach to computing energy parameters of Auger and autoionization effect in complex systems *Photoelectronics*. 2021. Vol. 30. P. 89-94.
162. Glushkov A. V. Auger Spectroscopy of Multielectron Atoms: Energy Formalism. *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.* / edited by: Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer. 2021. Vol. 33. P. 3-23.

163. Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional and Radiative Spectroscopy of Ions in Plasmas / Buyadzhi V. V., Ternovsky E. V., Glushkov A. V., Kuznetsova A. A. *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.* / edited by: Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer. 2021. Vol.33. P. 25-41.
164. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atomic Systems and Many-Body Perturbation Theory Approach to computing  $\beta$ -Decay Parameters / Khetselius O. Y., Ternovsky V. B., Dubrovskaya Y. V., Svinarenko A. A. *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.* / edited by: Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer. 2021. Vol.33. P. 59-89.
165. Indelicato P., Desclaux J.P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method. *Phys. Scripta.* 1993. Vol. 46. P. 110-115.
166. Karaçoban B., Özdem L. Energies, Landé Factors, and Lifetimes for Some Excited Levels of Neutral Ytterbium ( $Z = 70$ ). *Acta Phys.Polonica.A.* 2011. Vol. 119. P. 342-353.
167. Jong-hoon Yi, Lee J., Kong H. J. Autoionizing states of the ytterbium atom by three-photon polarization spectroscopy. *Phys. Rev. A.* 1995. Vol. 51. P. 3053–3057.
168. Jong-hoon Yi, Park H., Lee J. Investigation of even parity autoionizing states of ytterbium atom by two-photon ionization spectroscopy. *J. Korean Phys.Soc.* 2001. Vol. 39. P. 916-920.
169. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A. Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanides atoms. *Physica Scripta (IOP, London, UK).* 2013. Vol. T153. Pp. 01429.
170. Relativistic Quantum Chemistry: Advanced Approach to Construction of the Green's Function of the Dirac Equation with Complex Energy and Mean-Field Nuclear Potential / Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Khetselius O. Yu., Buya-

- dzhi V. V., Florko T. A., Shakhman A. N. / editors Nascimento M., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G., In: *Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical. Chemistry and Physics*. Berlin: Springer, 2015. Vol. 29. P. 197-218.
171. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum / Glushkov A. V., Lepikh Ya. I., Fedchuk A. P., Ignatenko A. V., Khetselius O. Yu., Ambrosov S. V. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2008. № 4. P.5-11.
172. DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach / Glushkov A. V., Ambrosov S. V., Ignatenko A. V., Korchevsky D. A. *Int. Journ. Quantum Chem.* 2004. Vol. 99. №5. P. 936-940.
173. Studying interaction dynamics of the non-linear vibrational systems within non-linear prediction method (application to quantum autogenerators) / Glushkov A. V., Prepelitsa G. P., Svinarenko A. A., Zaichko P. A. *Dynamical Systems Theory*. / edited by: Awrejcewicz J., Kazmierczak M., Olejnik P., Mrozowski J. Lodz. Poland, 2013. Vol. T1. P. 467-477.
174. Modeling of interaction of the non-linear vibrational systems on the basis of temporal series analyses (application to semiconductor quantum generators) / Prepelitsa G. P., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Kuzakon V. M., Solyanikova E. P., Svinarenko A. A. *Dynamical Systems - Theory and Applications*. 2011. Vol. 2. P. 31-38. BIF-110 (8p.).
175. 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. *Coherence and Ultrashort Pulsed Emission*; edited by: Duarte F. J. Intech, Vienna. 2011. P. 159-186.
176. Prepelitsa G.P. Nonlinear dynamics of quantum and laser systems with elements of a chaos. *International Scientific Journal "Photoelectronics" ("Scopus")*. 2014. Vol. 23. P. 73-78.
177. Glushkov A. V., Prepelitsa G. P., Svinarenko A. A. 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. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* 2004. №2. P. 8-14.
178. Ivanov L. N., Ivanova E. P., Glushkov A. V. PC atomic complex ‘Superatom-ISAN’: main possibilities and programs. 1991. 96 P. (e-Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences, ASN1.); Cowan D., Methods of atomic structure calculations. N.Y.: Acad., 1974. 280P.; Cowan Code, adapted by A. Kramida. Troitsk: ISAN, version 1993.
  179. PC Program Complex for calculation of atomic characteristics in external electric and magnetic field: SuperAtom – Blocks “Stark-Zeemane”, “StarkMix” / Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Prepelitsa G. P., Svinarenko A. A., Ignatenko A. V. // *Preprint of Physics Institute of I.I. Mechnikov Odessa National University*. Odessa. №Ph-L-E3. 2004. 45 P.
  180. Ternovsky V. B. PC Program Complex for calculation of Rydberg atoms characteristics in a free state and electric field: Blocks “Rydberg-Stark”, “Rydberg-RadDecay” // E-preprint of Mathematics Department of the OSENU. 2010. №MA-05. 48 P.
  181. *Calculational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory* / Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Kruglyak Yu. A., Ternovsky V. B. P.3. Odessa: OSENU TEC, 2014. 180 P.
  182. Glushkov A. V., Ternovsky V. B., Buyadzhi V. V., Zaichko P. A., Nikola L. V. Advanced relativistic energy approach to radiation decay processes in atomic systems / Glushkov A. V., Ternovsky V. B., Buyadzhi V. V., Zaichko P. A., Nikola L. V. *Photoelectronics*. 2015. Vol. 24. P. 11-22.
  183. Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos / Glushkov A. V., Kuzakon V. M., Ternovsky V. B., Buyadzhi V. V. *Dynamical Systems Theory*. / edited by: Awrejcewicz J., Kazmierczak M., Olejnik P., Mrozowski J. Lodz, Poland. 2013. Vol. T1. P. 461-466.
  184. Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology / Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Ternovsky V. B., Brusentseva S. V., Zaichko P. A. *Advances in Neural Net-*

- works, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering*: edited by: Balicki J. World Sci. Pub. 2014. Vol. 21. P. 69-75.
185. Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process / Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Zaichko P. A. *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence. Series: Recent Advances in Computer Engineering.* / edited by: Balicki J. World Sci. Pub. 2014. Vol. 21. P. 143-150.
  186. Advanced relativistic model potential approach to calculation of radiation transition parameters in spectra of multicharged ions / Ternovsky V. B., Svinarenko A. A., Ignatenko A. V., Nikola V. V., Seredenko S. S., Tkach T. B. *Journal of Physics: C Series* (IOP, London, UK). 2014. Vol. 548. P. 012047 (6 p.).
  187. Advanced relativistic model potential approach to calculation of the radiation transition and ionization characteristics for Rydberg atoms / Ternovsky V. B., Florko T. A., Ignatenko A. V., Svinarenko A. A., Tkach T. B. *Photoelectronics*. 2014. №23. P. 91-95.
  188. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions / Glushkov A. V., Rusov V. D., Ambrosov S. V., Loboda A. V. *New Projects and New Lines of research in Nuclear physics*; edited by: Fazio G., Hanappe F. Singapore: World Sci. 2003. P. 142-154.
  189. Ivanov L. N., Letokhov V. S. Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements atoms. *Com. Mod. Phys. D.: At. Mol. Phys.* 1985. Vol. 4. P. 169-184.
  190. High order corrections in the relativistic perturbation theory with the model zeroth approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions / Ivanova E. P., Ivanov L. N., Glushkov A. V., Kramida A. E. *Phys. Scripta*. 1985. Vol. 32. P. 513-522.
  191. Glushkov A. V., Ivanov L. N. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions. *Phys. Lett. A*. 1992. Vol. 170(1). P. 33-36.



192. Ivanov L., Ivanova E., Knight L. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths. *Phys. Rev. A*. 1993. Vol. 48. P. 4365.
193. Glushkov A.V. Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions. In: Nishikawa, K., Maruani, J., Brändas, E., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., editors. *Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Progress in Theoretical Chemistry and Physics. Dordrecht. 2013. Vol. 26. P. 231-252.
194. Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas. In: Wang Y., Thachuk M., Krems R., Maruani J., editors / Glushkov A. V., Buyadzhi V. V., Svinarenko A. A., Ternovsky E. V. *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer, Cham.). 2018. Vol. 31. P. 55-69.
195. Svinarenko A. A., Khetselius O. Y., Florko T. A. Quantum Geometry: Generalized version of an energy approach in scattering theory and its application to electron-collisional excitation of multicharged ions. *Proceedings of the International Geometry Center*. 2020. Vol. 8(3-4). P. 86-91. URL: <https://doi.org/10.15673/tmgc.v8i3-4.1614>
196. Khetselius O. Yu. Optimized Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculation of Wavelengths and Oscillator Strengths for Li-like Multicharged Ions. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. P. 223-251.
197. Khetselius O. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. J. Quant.Chem.* 2009. Vol. 109(14). P.3330-3335.
198. Khetselius O. Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes. *Phys. Scr.* 2009. №. T135. DOI:10.1088/0031-8949/2009/T135/014023
199. Glushkov A. V., Ivanov L. N. DC Strong-Field Stark-Effect: consistent quantum-mechanical approach. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1993. Vol. 26. P. 379-386

200. Sensing stochasticity of atomic systems in crossed electric and magnetic fields by analysis of level statistics / Ambrosov S., Ignatenko V., Korchevsky D., Kozlovskaya V. *Sensor Electr. and Microsyst.Tech.* 2005. №2. P. 19-23.
201. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Gurnitskaya E. P. Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions. *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics*, 2008. Vol. 18. P. 507-524.
202. Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonance / Svinarenko A. A., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Ternovsky V. B., Dubrovskaya Yu. V., Kuznetsova A. A., Buyadzhi V. V. *In: Jose EA (5.ed) Rare Earth Element. InTech.* Orjuela, 2017. P. 83-104. DOI:<https://doi.org/10.5772/intechopen.69314>.
203. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions / eds. Grzonka D., Czyzykiewicz R., Oelert Walter, Rozek T., Winter P. *Low Energy Antiproton Physics, AIP Conf. Ser.* 2005. Vol.796. P.206-211.
204. Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors / Glushkov A. V., Kondratenko P. A., Lepikh Ya. I., Fedchuk A. P., Svinarenko A. A., Lovett L. *Int. J. Quant. Chem.* 2009. Vol.109(14). P.3473-3481.
205. Ambrosov S. V., Khetselius O. Y., Ignatenko A. V. Wannier-Mott exciton and H, Rb atom in a DC electric field: Stark effect. *Photoelectronics.* 2008. Vol.17. P. 84-87.
206. Sensing hyperfine-structure, electroweak interaction and parity non-conservation effect in heavy atoms and nuclei / Khetselius O. Y., Lopatkin Y., Dubrovskaya Y., Svinarenko A. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2010. №2. P. 11-19.
207. Studying interaction dynamics of the non-linear vibrational systems within non-linear prediction method (application to quantum autogenerators)/ Glushkov, A.V., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A., Zaichko P.A. *In: Dynamical*

- Systems Theory*. Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J. Eds. Wyd. Politech. Łódź. 2013. Vol T1, p.467-477.
208. Glushkov A.V. *Relativistic and Correlation Effects in Spectra of Atomic Systems*. Odessa: Astroprint: 2006.
209. Glushkov A.V. Relativistic polarization potential of a many-electron atom. *Sov. Phys. Journal*. 1990, 33(1), P.1-4
210. Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions./ Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Svinarenko, A.A., Buyadzhi, V.V. TEC: Odessa, 2015.
211. Glushkov A. V. Multiphoton Spectroscopy of Atoms and Nuclei in a Laser Field: Relativistic Energy Approach and Radiation Atomic Lines Moments Method. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. Ch. 11. P. 253-285. DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.004>
212. Khetselius O. Yu. Optimized Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculation of Wavelengths and Oscillator Strengths for Li-like Multicharged Ions. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. Ch. 10. P. 223-251. DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.001>
213. Nonlinear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field / Ignatenko A. V., Buyadzhi A. A., Buyadzhi V. V., Kuznetsova A. A., Mashkantsev A. A., Ternovsky E. V. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. P. 149-170; DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.006>
214. Advanced Quantum Approach in Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas / Buyadzhi V. V., Kuznetsova A. A., Buyadzhi A. A., Ternovsky E. V., Tkach T. B. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. Ch. 7. P. 171-191. DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.002>
215. Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems With Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects / Dubrovskaya Yu. V., Khetselius O. Yu., Vitavetskaya L. A., Ternovsky V. B., Ser-

- ga I. N. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. Ch. 9. P. 193-222. DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.003>
216. Spectroscopy of Multielectron Atomic Systems in a DC Electric Field / Kuznetsova A. A., Glushkov A. V., Ignatenko A. V., Svinarenko A. A., Ternovsky V. B. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*. 2019. Vol. 78. Ch. 12. P. 287-306. DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.005>
217. Spectroscopy of Rydberg Atoms in a Black-body Radiation field: Ionisation Rates and Effective Lifetimes / Glushkov A. V., Ternovsky V. B., Kuznetsova A. A., Romanenko E., Zaichko P. A. *Journal of Physics: Conference Series (IOP, London)*. 2019. Vol. 1289. DOI:10.1088/1742-6596/1289/1/012024
218. Parity non-conservation effect in heavy atomic systems within relativistic many-body perturbation theory: Advanced data / Khetselius O. Yu., Ternovsky V. B., Svinarenko A. A., Dubrovskaya Yu. V., Serga I.N. *Journal of Physics: Conference Series (IOP, London)*. 2019. Vol. 1289. DOI 10.1088/1742-6596/1289/1/012025
219. Deterministic chaos in a damage dynamics of the engineering structures under varying environmental and operational conditions / Glushkov A. V., Buyadzhi V. V., Mashkantsev A., Lavrenko A. *Theoretical Approaches in Non-Linear Dynamical Systems*. / edited by: Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Mrozowski J. Lodz: Lodz Univ. of Technology. 2019. Pp. 155-162.
220. Nonlinear dynamics of laser systems: Chaos, bifurcations and strange attractors / Buyadzhi V., Buyadzhi A., Chernyshev A., Plisetskaya E., Pavlov E., Kir'yanov S. *Applicable Solutions in Non-Linear Dynamical Systems*: edited by: Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Olejnik P. Lodz: Lodz Univ. of Technology. 2019. Pp. 99-106. BIF-271.
221. New generalized chaos-geometric and neural networks approach to nonlinear modeling of complex chaotic dynamical systems / Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A., Ignatenko A. V., Buyadzhi A. A. *Applicable Solutions in Non-Linear Dynamical Systems*. / edited by: Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Olejnik P. Lodz: Lodz Univ. of Technology. 2019. Pp. 267-276. MAT-270.

222. Chaos-geometric approach to analysis and forecasting evolutionary dynamics of complex systems: Atmospheric pollutants dynamics / Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A., Bunyakova Y. Y., Glushkov A. V. *Applicable Solutions in Non-Linear Dynamical Systems.* / edited by: Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Olejnik P. Lodz: Lodz Univ. of Technology. 2019. Pp. 259-266. LIF-266.
223. Dynamics of non-linear processes in a backward-wave tubes chain: Chaos and strange attractors / Ternovsky V. B., Glushkov A. V., Ternovsky E., Tsudik A. *Applicable Solutions in Non-Linear Dynamical Systems.* / edited by: Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Olejnik P. Lodz: Lodz Univ. of Technology. 2019. P. 491-498
224. Modeling of nonlinear optical effects in the interaction of laser radiation with atmosphere and sensing for energy exchange in a mixture atmospheric gases / Bunyakova Yu. Ya., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A., Ignatenko A. V., Bykowszczenko N. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol. 16. №3. P. 42-50.
225. Determination of radiation decay parameters for heavy complex atomic systems / Buyadzhi V. V., Glushkov A. V., Ternovsky E. V., Mykhailov O. L., Khetselius O. Yu. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol. 16. №3. P. 60-68.
226. Relativistic approach to calculation of ionization characteristics for rydberg alkali atom in a black-body radiation field / Glushkov A. V., Ternovsky V. B., Buyadzhi V. V., Tsudik A. V., Zaichko P. A. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol. 16. №3. P. 69-77.
227. Sensing and analysis of radioactive radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration chaotic variability in an atmosphere environment / Khetselius O. Yu., Glushkov A. V., Stepanenko S. N., Svinarenko A. A., Bunyakova Yu. Ya., Buyadzhi V. V. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol. 16. №4. P. 27-36.
228. New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. II. Computational algorithm / Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Ste-

- panenko S. N., Sofronkov A. N., Svinarenko A. A., Buyadzhi V. V. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2019. Vol. 57. P. 104-113. DOI: <https://doi.org/10.18524/0367-1631.2019.57.191958>
229. A chaos-geometric approach to analysis, modelling and forecasting atmospheric pollutants dynamics for industrial regions / Bunyakova Yu. Ya., Khetselius O. Yu., Florko T. A., Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Dubrovskaya Yu. V. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2019. Vol. 57. P. 114-120. DOI: <https://doi.org/10.18524/0367-1631.2019.57.191961>
230. Spectroscopy of multielectron atom in dc electric field: relativistic operator perturbation theory / Kuznetsova A. A., Glushkov A. V., Romanenko E. S., Pli-setskaya E. K. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 32-38. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194292>
231. Ternovsky V.B. Theoretical studying Rydberg states spectrum of the uranium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory. *Photoelectron-ics*. 2019. Vol. 28. P. 39-45. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194312>
232. Relativistic spectroscopy of heavy Rydberg atomic systems in a black-body ra-diation field / Tsudik A. V., Kuznetsova A. A., Zaichko P. A., Mansarliysky V. F. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 46-53. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194321>
233. Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for complex atoms within many-body perturbation theory / Antoshkina O. A., Makushkina M. P., Khetselius O. Yu., Tkach T. B. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 54-61. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194336>
234. Buyadzhi V. V. Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions: advanced energy approach. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 62-67. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194341>
235. Relativistic theory of spectra of pionic and kaonic atoms: hyperfine structure, transition probabilities for nitrogen / Dubrovskaya Yu. V., Serga I. N.,

- Chernyakova Yu. G., Vitavetskaya L. A. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.68-74. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.194343>
236. Theoretical studying spectral characteristics of Ne-like ions on the basis of optimized relativistic many-body perturbation theory / Glushkov A. V., Cherkasova I. S., Ternovsky V. B., Svinarenko A. A. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 75-82. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.195367>
237. 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. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.195373>
238. Relativistic theory of calculation of E1 transition amplitudes, and gauge invariance principle / Chernyshev A. S., Mykhailov O. L., Tsudik A. V., Cherkasova I. S. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 90-96. DOI: <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.195375>
239. Advanced photochemical box and quantum-kinetic models for sensing energy, radiation exchange in atmospheric gases mixtures and laser-molecules interaction / Khetselius O. Yu., Glushkov A. V., Stepanenko S. N., Svinarenko A. A., Bunyakova Yu. Ya., Vitovskaya E. T. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 97-104. DOI:<https://doi.org/10.18524/0235-2435.2019.28.195381>
240. Ternovsky E. V. Relativistic spectroscopy of multicharged ions in plasmas: Li-like ions. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 105-112.
241. Hyperfine structure parameters for Li-like multicharged ions within relativistic many-body perturbation theory / Mykhailov O. L., Efimova E., Ternovsky E. V., Serga I. R. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 113-120.
242. Dynamical and topological invariants of PbO dynamics in a resonant electromagnetic field / Pavlov E. V., Ignatenko A. V., Kirianov S. V., Mashkantsev A. A. *Photoelectronics*. 2019. Vol. 28. P. 121-126.
243. Spectroscopy of Rydberg Atoms in a Black-body Radiation field: Ionisation Rates and Effective Lifetimes / Glushkov A. V., Ternovsky V. B., Kuznetsova

- A. A., Romanenko E., Zaichko P. A. *Journal of Physics: Conference Series* (Online). 2019. Vol. 1289(1), 3. DOI:10.1088/1742-6596/1289/1/012024
244. Parity non-conservation effect in heavy atomic systems within relativistic many-body perturbation theory: Advanced data / Khetselius O. Yu., Ternovsky V. B., Svinarenko A. A., Dubrovskaya Yu. V., Serga I. N. *Journal of Physics: Conference Series* (Online). 2019. Vol. 1289(1), 3. DOI:10.1088/1742-6596/1289/1/012025.
245. Advanced quantum - kinetic models for sensing energy, radiation exchange in atmospheric gases mixtures and laser-molecules interaction./ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A. *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.6-10.*
246. Glushkov A.V. Quantum systems in strong external electric field: operator perturbation theory./ *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.11-15.*
247. Relativistic calculation of spectral parameters of the Li-like multicharged ions in plasmas./ Ternovsky E.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi. Odessa: TES, 2019. P.16-20.*
248. Khetselius O.Yu. Review of methods in spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy finite fermi-systems. *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.21-25.*



249. Spectrum of the rydberg states for uranium atom within relativistic many-body perturbation theory./ Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu. *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.26-30.*
250. Relativistic theory of spectra of pionic atoms with account of the radiative corrections: hyperfine structure. *Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry./ Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., Chernyakova Yu.G., Serga I.N., Koren V.S. Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.81-84.*
251. Relativistic calculation of spectral parameters for some of heavy pionic atoms./ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Dubrovskaya Yu.G., Belodonov N.N., Shakman A.N. *In: Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Odessa: TES, 2019. P.85-89.*
252. Glushkov A.V. Advanced Relativistic Energy Approach in Spectroscopy of Autoionization States of Multielectron Atomic Systems. *In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Eds. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser. Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.3-31*  
URL:[https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7_1)
253. Spectroscopy of Rydberg Atomic Systems in a Black-Body Radiation Field./ Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Tsudik A.V. *In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Eds. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.51-63*  
URL:[https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7\\_3](https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7_3)

254. Hyperfine and Electroweak Interaction in Heavy Finite Fermi-Systems and Parity Non-conservation Effect./ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Buyadzhi V.V., Mykhailov O.L. *In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Eds. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.65-81 URL:[https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7\\_4](https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7_4)
255. Relativistic Quantum Chemistry and Spectroscopy of Kaonic Atomic Systems with Accounting for Radiative and Strong Interaction Effects./ Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N. *In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Eds. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.33-50 URL:[https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-030-34941-7_2)
256. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Quantum Geometry and Dynamics of Resonances. Odessa: Publ. House "Helvetica", 2020. P.204.
257. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Mathematical Physics of classical and quantum systems. Odessa, OSENU: 2020, P.204.
258. Quantum geometry and dynamics of resonances. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V., Ignatenko G.V. Odessa: OSENU, 2020. P.150.
259. Glushkov A.V., Tsudik A.V., Computational methods of optics and dynamics of quantum and laser systems. R.1 (asp. special 104 Physics and astronomy). Odessa: ODEKU, 2020. P.80.
260. Glushkov A.V., Ignatenko G.V., Kvasytkova G.S. *Molecular optics and spectroscopy*. R.6 (asp. special 104 Physics and astronomy/optics) Odessa: ODEKU, 2020. P.80.
261. Glushkov A.V. *Optics and spectroscopy* R.3 (asp. special 104 physics and astronomy/optics) Odesa: ODEKU, 2020. P.102.
262. Khetselius O.Yu. *Mathematical physics of classical and quantum system*. P.6 (asp. special. 113 Applied mathematics). Odessa: ODEKU, 2020. P.89.

263. Khetselius O.Yu. *Computational methods of dynamics of classical and quantum systems* P.6 (asp. spec. 113 Applied mathematics). Odessa: ODEKU, 2020. P.80.
264. Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu. *Quantum optics and laser physics*. R.1 (asp. special 104 physics and astronomy/optics). Odessa: ODEKU, 2020. P108.
265. Svinarenko A.A. *Optics and spectroscopy of a solid body*. R.2 (asp. spec. 104-physics and astronomy/optics). Odessa: ODEKU, 2020. P76.
266. Glushkov O.V. *Atomic optics and spectroscopy*. R.4 (asp. spec. 104 physics and astronomy/optics). Odessa: ODEKU, 2020. P.82.
267. Theoretical Auger spectroscopy of solids: sensing energy parameters./ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Chernyshev A.S., Efimova E.A., Tsudik A.V. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2020. Vol.17. N1. P.21-28.
268. Sensing cooperative electron-gamma-nuclear effect in multiatomic molecules and its application./ Ignatenko G.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bumyakova Yu.Ya., Svinarenko A.A. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2020. Vol.17. N1. P.39-47.
269. New theoretical approach to dynamics of heat-mass-transfer, thermal turbulence and air ventilation in atmosphere of an industrial city./ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A., Ignatenko G.V. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2020. Vol.58. P.93-101.
270. Optimized quasiparticle density functional approach for multielectron atomic systems./ Glushkov A.V., Kovalchuk V.V., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P. 38-44.
271. Makushkina M.P., Antoshkina O.A., Khetselius O.Yu. Hyperfine structure parameters for complex atoms within relativistic many-body perturbation theory. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.52-59.
272. Ternovsky E.V., Mykhailov A.L. New relativistic approach to computing spectral parameters of multicharged ions in plasmas. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.60-67.

273. Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Plisetskaya E.K. Theoretical complex energies of Stark resonances in lithium by operator perturbation theory approach. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.68-77.
274. Relativistic theory of spectral characteristics of pionic atomic systems. Application to heavy systems./ Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O. Yu., Serga I.N., Chernyakova Yu. G. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.78-85.
275. Optimized quasiparticle density functional and Green's functions method to computing bond energies of diatomic molecules./ Ignatenko G.V., Svinarenko A.A., Mansarliysky V.F., Sakun T.N. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.86-93.
276. Cascade of Auger transitions in spectrum of xenon: Theoretical data./ Chernyshev A.S., Efimova E.A., Buyadzhi V.V., Nikola L.V. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.94-101.
277. Buyadzhi V.V. Relativistic energy approach and many-body perturbation theory to computing electron-collision cross-sections of complex multielectron ions. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.102-109.
278. Advanced computing topological and dynamical invariants of relativistic backward-wave tube time series in chaotic and hyperchaotic regimes./ Tsudik A.V., Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.110-117.
279. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Dubrovskaya Yu.V. Theoretical studying excited states spectrum of the ytterbium within the optimized relativistic many-body perturbation theory. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.118-125.
280. Relativistic calculation of the radiative transition probabilities and lifetimes of excited states for the rubidium atom in a black-body radiation field./ Zaichko P.A., Kuznetsova A.A., Tsudik A.V., Mansarliysky V.F. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.126-133.
281. Khetselius O.Yu., Mykhailov, A.L. Relativistic calculation of wavelengths and E1 oscillator strengths in li-like multicharged ions and gauge invariance principle. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.134-142.

282. Dynamical and topological invariants of nonlinear dynamics of the chaotic laser diodes with an additional optical injection./ Kirianov S.V., Mashkantsev A.A., Bilan I.I., Ignatenko G.V. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.149-155.
283. Theoretical studying spectral characteristics of Zn-like ions on the basis of relativistic perturbation theory./ Cherkasova I.S., Ternovsky V.B., Nesterenko A.A., Mironenko D.A. *Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.156-160.
284. Spectroscopy and kinetics of IR laser interaction with atmospheric molecules: Effects of cooling and chaos./ Ternovsky E.V., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Bunyakova Y.A. *Journal of Physics: C Ser. (IOP, Lndon)*. 2020, Vol. 1412, P.87-97.
285. Glushkov A.V. Auger Spectroscopy of Multielectron Atoms: Energy Formalism. /eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics and Biology. Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P.3-23.  
URL:<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-68314-6>
286. Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional and Radiative Spectroscopy of Ions in Plasmas./ Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Glushkov A.V., Kuznetsova A.A. /eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 25-41.
287. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atomic Systems and Many-Body Perturbation Theory Approach to computing  $\beta$ -Decay Parameters./ Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Y.V., A.A. Svinarenko / eds.Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 59-89.

288. Relativistic Quantum Chemistry and Spectroscopy of Some Kaonic Atoms: Hyperfine and Strong-Interaction Effects./ Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Serga I.N., Svinarenko A.A. /eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 91-110.
289. A Quasiparticle Fermi-Liquid Density Functional Approach to Atomic and Diatomic Systems. Spectroscopic factors./ Glushkov A.V., Ignatenko G.V., Tsudik A.V., Mykhailov A.L. /eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. Eds: *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 133-150.
290. Advanced Quantum Approach to the Calculation of Probabilities of Cooperative Electronic-Vibrational-Nuclear Transitions in Spectra of Diatomic Molecules./ Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Mansarliysky V.F., Zaichko P.A. / eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics and Biology*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 181-206.
291. Buyadzhi Advanced Quantum-Kinetic Model of Energy Exchange in Atmospheric Molecule Mixtures and CO<sub>2</sub> Laser-Molecule Interaction./ Khet-selius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S. M., Svinarenko A. A./ eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 207-216.
292. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu. Nonlinear Dynamics of Complex Neurophysiologic Systems within a Quantum-Chaos Geometric Approach./eds. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. *In: Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry. Physics, and Biology*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P.291-303

293. Chaos, Bifurcations and Strange Attractors in Environmental Radioactivity Dynamics of Some Geosystems./ Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Stepanenko S.M., Ternovsky E.V. / eds. Awrejcewicz J. (*Perspectives in Dynamical Systems II*). *Mathematical and Numerical Approaches. Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics*. Cham: Springer. 2021 vol 363. P.79-88. (ISBN 978-3-030-77310-13)  
URL: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-77314-4>
294. Nonlinear Dynamics of Atomic and Molecular Systems in an Electromagnetic Field: Deterministic Chaos and Strange Attractors./ Glushkov A.V., Ignatenko G.V., Kuznetsova A.A., Bakunina E.V., Dykyi O.V., Makarova A.F., Ternovsky E.O. In: Awrejcewicz J. *Perspectives in Dynamical Systems II: Mathematical and Numerical Approaches. Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics*. Cham: Springer. 2021 vol 363. P.113-123. (ISBN 978-3-030-77310-16) URL:<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-77310-6>
295. Deterministic Chaos, Bifurcations and Strange Attractors in Nonlinear Dynamics of Relativistic Backward-Wave Tube./ Glushkov A.V., Tsudik A.V., Ternovsky V.B., Astaykin D.V., Bondarenko A.V., Danylenko D.V., Buyadzhi V.V. In: Awrejcewicz J. *Perspectives in Dynamical Systems II: Mathematical and Numerical Approaches. Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics* Cham :Springer. 2021 vol 363. P.125-135 (). (ISBN 978-3-030-77310-17) URL:<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-77310-6>
296. Nonlinear Dynamics of the Industrial City's Atmospheric Ventilation: New Differential Equations Model and Chaotic Ventilation./ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.M., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. In: Awrejcewicz J. *Perspectives in Dynamical Systems III: Control and Stability. Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics*. Cham : Springer. 2021 vol 364. P. 199-209. (ISBN 978-3-030-77314-4)  
URL:<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-77314-4>

297. New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. III. Low-frequency approximation and singularities in fields of meteoelements./ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Sofronkov A.N., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2021 Vol.59. P.127-140. URL: <http://fas.onu.edu.ua/article/view/227306>
298. Advanced Laser-Photoionization Scheme of Separation of Heavy Isotopes in the Gases Separator Devices./ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuznetsova A.A., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2021. Vol.59. P.106-112. URL: <http://fas.onu.edu.ua/article/view/227379>
299. Glushkov A.V., Svinarenko A.A. Optimized quasiparticle density functional approach for complex atoms: Spectroscopic Factors. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P. 11-24.
300. Makushkina M.P., Khetselius O.Yu. New formalism of relativistic many-body perturbation theory to computing hyperfine structure parameters of complex atomic systems. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.31-36.
301. Ternovsky E.V., Khetselius O.Yu. Spectral parameters of Li-like multicharged ions in plasmas within consistent relativistic approach. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.41-47.
302. Khetselius O.Yu., Mykhailov O.L Relativistic theory of hyperfine structure of the Li-like multicharged ions. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.48-52.
303. Glushkov A.V., Ignatenko G.V., Kuznetsova A.A. Consistent relativistic theory of the BBR radiation ionization of atoms. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.53-59.
304. Relativistic theory of spectral characteristics of complex exotic systems: Pionic atoms./ Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O. Yu., Serga I.N., Florko T.A. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.75-82.
305. Optimized quasiparticle density functional and many-body perturbation theory formalism to computing spectral parameters of diatomic molecules./ Ignatenko



- G.V., Svinarenko A.A., Mansarliysky V.F., Sakun T.N. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.83-88.
306. Chernyshev A.S., Efimova E.A., Glushkov A.V. Relativistic approach to computing energy parameters of Auger and autoionization effect in complex systems. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.89-94.
307. Tsudik A.V., Zaichko P.A. New data on topological and dynamical invariants of relativistic backward-wave tube in chaotic regimes. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.111-118.
308. Kirianov S.V., Mashkantsev A.A., Svinarenko A.A. Advanced computing dynamical and topological invariants of nonlinear dynamics of the chaotic laser diodes. *Photoelectronics*. 2021. Vol.30. P.141-145.
309. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Higher Mathematics, Part 3. Odessa: TES. 2019.
310. Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology \*monograph) / Glushkov, A.V., Khetselius, O.Y., Maruani, J., Brandas, E. Cham: Springer, 2021, 360p (Nobel Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics).
311. Relativistic spectroscopy of many-electron and hadronic atomic systems: monograph / A.V. Glushkov, O.Yu.Khetselius, A.A. Svinarenko, V.B. Ternovsky, Odesa: Odesa State Environmental University, 2022. 264 p.
312. Theoretical spectroscopy and dynamics of molecular systems in the free state and in an external electromagnetic field: monograph / O.V. Glushkov, O.Yu.Khetselius, A.A. Svinarenko, A.V. Ignatenko, Odesa: Odesa State Environmental University, 2022. 230 p.
313. Quantum Geometry and Dynamics of Resonances. monograph / O.V. Glushkov, O.Yu.Khetselius, A.A. Svinarenko. Odessa: Publ. House Helvetica, 2020. 204p.
314. Analysis, modeling and forecasting air pollution for industrial cities. Applications. / O.V. Glushkov, O.Yu.Khetselius, A.A. Svinarenko. Odessa: Publ. House Helvetica, 2020. 140p.

315. Relativistic theory of shift and broadening of spectral lines of complex atoms in the atmosphere of buffer gases. (monograph) / Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Ignatenko A.V., Mansarlisky V.F. Odesa: Odesa State Environmental University, 2023. 350P.
316. Theoretical spectroscopy of complex atomic systems in an intense electromagnetic field. (monograph) / Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Svinarenko A.A., Kuznetsova A.A. Odessa: OSENU, 2023.
317. Catalysis as an effective tool of green chemistry: Novel electrodynamic and quantum chemical computational approaches to catalytic processes modelling./ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A. In: L. Mammino, Ed., Green Chemistry and Computational Chemistry, 1<sup>st</sup> Ed. Shared Lessons in Sustainability, Elsevier, 2021, Ch14. P.333-354. URL:<https://www.elsevier.com/books/green-chemistry-and-computational-chemistry/mammino/978-0-12-819879-7>
318. Buyadzhi V.V. Frontiers in green radiochemistry: New optimized quantum approach to laser separation of isotopes and transmutation of radioactive waste./ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., In: L. Mammino, Ed., Green Chemistry and Computational Chemistry, 1<sup>st</sup> Ed. Shared Lessons in Sustainability, Elsevier, 2021, Ch.16. P385-402. URL:<https://www.elsevier.com/books/green-chemistry-and-computational-chemistry/mammino/978-0-12-819879-7>
319. Optimized laser photoionization scheme of separation of complex isotopes in the separator devices./ Glushkov A.V., Sofronkov A.N., Dubrovskaya Y.V., Florko T.A. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2023. Vol.61. P.183-192.
320. Khetselius O.Y., Antoshkina O.A. Collisional broadening and shift of the hyperfine lines for complex atomic systems in atmosphere of the buffer inert gases. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2023. Vol.61. P.176-182.
321. Svinarenko A.A., Smishchenko M.V. Study of characteristics elementary atomic processes in the neon-like multicharged ions plasma within an energy approach. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2023. Vol.61. P.150-157.

322. Ignatenko G.V., Tkach T.B., Ivanova I.V. Chaotic dynamics of diatomic systems in an electromagnetic field: Dynamical and topological invariants. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2023. Vol.61. P. 158-164.
323. New theoretical approach to dynamics of heat-mass-transfer, thermal turbulence and air ventilation in atmosphere of an industrial city II. Spectrum of thermal turbulence. / Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.M., Svinarenko A.A. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2023. Vol.61. P. 165-175.