

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

На правах рукопису

Заїчко Павло Олександрович

УДК 539.184: 539.192

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА ТЕОРІЯ ІОНІЗАЦІЇ РІДБЕРГІВСЬКИХ
АТОМІВ В ПОЛІ ТЕПЛОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ**

01.04.05 – оптика та лазерна фізика

ДИСЕРТАЦІЯ

на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

**Науковий консультант:
Глушков Олександр Васильович
доктор фізико-математичних
наук, професор**

ОДЕСА – 2016

ЗМІСТ

Список скорочень в тексті дисертації, сталі, одиниці.....	5
ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1 СПЕКТРОСКОПІЯ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У ПОЛІ ТЕПЛО-ВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ: ЯКІСНІ АСПЕКТИ, ЕКСПЕРИМЕНТИ, ОГЛЯД ТЕОРЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ОБЧИСЛЕННЯ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВВР ПОЛІ	15
1.1 Якісні аспекти спектроскопії рідбергівських атомів у вільному стані та у полі теплового випромінювання.....	15
1.2 Огляд експериментальних досліджень та теоретичних методів опису характеристик рідбергівських атомів у полі теплового випромінювання.....	29
1.3 Критичний огляд методів теоретичного опису атомів та іонів, у тому числі рідбергівських атомів, та заключні зауваження.....	34
РОЗДІЛ 2 НОВА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ТЕОРІЯ ЗБУДЖЕННЯ ТА ІОНІЗАЦІЇ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ПОЛІ ВВР ВИПРОМІНЮВАННЯ: КАЛІБРОВОЧНО-ІНВАРІАНТНА ВЕРСІЯ МЕТОДУ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ	39
2.1 Вступні зауваження.....	39
2.2 Релятивістський енергетичний підхід в теорії збудження та іонізації рідбергівських атомів в полі теплового випромінювання: концептуальні положення.....	41
2.3 Нова версія релятивістської багаточастинкової теорії збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема в калібрувально-інваріантному формулюванні в теорії рідбергівських атомів.....	47
2.3.1 Основні рецепти побудови формалізму ТЗ, вступні припущення, гамільтоніан нульового наближення.....	47

2.3.2 Релятивістська багато-частинкова теорія збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема в теорії рідбергівських атомів: Поправка першого порядку, радіаційна амплітуда, кулонівські і брейтівські інтеграли.....	53
2.3.3 Релятивістська багато-частинкова теорія збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема: Поправки другого та вище порядків, обмінно-кореляційні ефекти.....	59
2.4 Удосконалений метод Дірака-Штурма для урахування станів континууму та процедура оптимізації базисів релятивістських електронних хвильових функцій.....	68
2.5 Висновки до розділу 2.....	72
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ В ПОЛІ ТЕПЛООВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ.....	74
3.1 Вступні зауваження.....	74
3.2 Тестові обчислення одно-електронних енергій, дипольних матричних елементів, сил осциляторів радіаційних переходів в лужних атомах у вільному стані.....	75
3.2.1 Тестові обчислення одно-електронних енергій в лужних атомах у вільному стані: Na, K, Rb, Cs.....	75
3.2.2 Тестові обчислення дипольних матричних елементів, сил осциляторів радіаційних переходів в лужних атомах у вільному стані: Na, K, Rb, Cs та Na-подібних іонах.....	78
3.2.3 Обчислення енергій та ймовірностей радіаційних переходів у іоні Hg ⁺	82
3.3 Результати обчислення ефективних часів життя, швидкостей VBR іонізації для РА лужних та інших атомів та іонів у полі теплового випромінювання.....	84
3.3.1 Результати обчислення величин дипольних матричних елементів, ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрі атому натрію.....	84

3.3.2 Результати обчислення величин ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрах калію та калій-подібного іону кальцію.....	91
3.3.3 Результати обчислення величин ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрах атомів рубідію та цезію.....	95
3.4 Висновки до розділу 3.....	100
ВИСНОВКИ	102
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	105

Список скорочень в тексті дисертації, сталі, одиниці

РА – рідбергівський атом

BBR – blackbody radiation (теплове випромінювання)

Coupled Cluster (CC) – зв'язаних кластерів (метод)

DBKS (ДБКШ) – Dirac-Breit-Kohn-Sham (Дірака-Брейта-Кона-Шема метод)

DF (ДФ) – Dirac-Fock (Дірака-Фока; метод, гамільтоніан)

DKS (ДКШ) – Dirac-Kohn-Sham (Дірака-Кона-Шема; метод, гамільтоніан)

DS (ДШ) – Dirac-Sturm (Дірака-Штурма метод)

EA (ЕП) – енергетичний підхід (energy approach)

MP (МП) – метод модельного потенціалу (model-potential)

PT (ТЗ) – perturbation theory (теорія збурень)

PTDF (ТЗДФ) – багато-частинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням;

PTRHF (ТЗРХФ) – багато-частинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням;

QA (КН) - кулонівське наближення

QDM (МКД) – метод квантового дефекту

QED (КЕД) – квантовоелектродинамічний (quantum electrodynamics)

QCA (ККН) - квазікласичне наближення

RHF (РХФ) – релятивістське наближення Хартрі-Фоку

RPT (РТЗ) – релятивістська теорія збурень

Single-Double (SD) (states, configurations) – 1-,2- збуджені (стани, конфігурації)

Фундаментальні сталі: Швидкість світла $c=2.997925 \cdot 10^8$ м/с; Елементарний заряд $e=1.60219 \cdot 10^{-19}$ Кл; Маса електрона $m=9.1095 \cdot 10^{-31}$ кг; Постійна Планка $\hbar=1.05459 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; Постійна Рідберга $R_\infty=1.0973732 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ Борівський радіус $\hbar^2/me^2=0.5291773$ Å; Постійна тонкої структури $\alpha=e^2/\hbar c, 1/\alpha=137.03597$;

Одиниці. Всюди, де не зазначено, використані атомні одиниці: $e=1, \hbar=1, m=1$ ($c=137.03597$). Атомна одиниця енергії (а.о.е.) $me^4/\hbar^2=2Ry=27.2116\text{эВ}=4.3598 \cdot 10^{-18}$ Дж= $2.19475 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ ($me^4/2\hbar^2=Ry$ – Рідберг). Атомні од.довжини, часу, швидкості: $\hbar^2/me^2=5.291773 \cdot 10^{-11}$ м, $\hbar^3/me^4=2.4189 \cdot 10^{-17}$ с, $e^2/\hbar=2.1877 \cdot 10^6$ м/с. Енергія в кулонівських одиницях (к.о.): $1 \text{ к.о.е.}=Z^2$ а.о.е. (Z – заряд ядра атома). Релятивістські одиниці: $\hbar=1, c=1, m=1, e^2=1/137.03597$.

ВСТУП

Актуальність теми. В останні два десятиріччя в сучасній оптиці та спектроскопії дуже активний розвиток отримав новий напрямок досліджень, а саме квантова оптика та спектроскопія рідбергівських атомів (РА) та іонів. Мова йде про атомні системи, які знаходяться у високо збуджених станах із великими значеннями головного квантового числа n . До речі, відомо, що ряд астрофізичних процесів в міжзоряному газі, який взаємодіє з фрагментами вибуху наднових, зіткненнями міжзоряних хмар, і надзвукові потоки газу при утворенні зірок приводять до виникнення РА з дуже великими n (~ 1000). Причини значного інтересу до РА добре відомі і по'язані, по-перше, із надзвичайними для звичайних атомів властивостями, а саме достатньо великими часами життя ($\tau \sim n^3$ для $l \sim 1$, $\tau \sim n^5$ для $n \sim l$; l - орбітальне квантове число) та геометричними розмірами, значними поляризуємостями ($\sim n^2$), дипольними моментами радіаційних переходів, високою чутливістю до зовнішніх електромагнітних полів (зсув Штарка $\sim n^7 l^5$, ефект Зеєману $\sim n^2$). Більш того, цілком обгрунтовано висловлюється ідея щодо існування п'ятого стану речовини, а саме, рідбергівської речовини. В результаті це стимулювало в останні роки інтенсивні дослідження як в галузі стандартної фундаментальної спектроскопії РА, по'язані із обчисленням енергетичних і спектроскопічних параметрів цих атомів, важливих для загального розвитку релятивістської (квантово-електродинамічної, QED) теорії атомних спектрів, так й прикладні дослідження в галузі квантової оптики, інформатики, криптографії, квантового комп'ютингу (див., напр., Los Alamos Nat. Security, LLC, at <http://qist.lanl.gov/>), інтерферометрії, астрофізичної та лабораторної плазми тощо, у т.ч., вивчення властивостей бозе-конденсату у парах РА, фонтанів холодних атомів, атомно-радіаційних машин Карно і т.ін. Природньо, залишається високою актуальність дослідження спектроскопічних характеристик РА для розв'язання багатьох задач не тільки у стандартному наборі оптичних додатків, а саме, у фізиці лазерів, квантовій електроніці, астрофізиці та радіоастрономії, фізиці Сонця, полярних сьйв тощо, але й у відносно нових дода-

тках, таких як розвиток принципово нових експериментальних методів лазерної спектроскопії, магнітно-оптичних пасток, дослідження властивостей холодних РА, взагалі ультрахолодної рідбергівської плазми, яка, зокрема, виникає при іонізації РА лазерним або тепловим (black-body radiation, BBR) випромінюванням. З фізичної точки зору тут має місце спонтанне перетворення хмари холодних РА в магнітно-оптичних пастках в ультрахолодних плазму внаслідок лавинної іонізації РА тепловим BBR випромінюванням. Слід зараз же підкреслити, що шукані процеси іонізації на сьогодні вивчені абсолютно недостатньо. Основні дані стосуються у переважній більшості лише РА лужних елементів, але часто ця інформація має лише обмежений характер. З іншого боку, прецизійні спектроскопічні дані щодо процесів збудження та іонізації РА BBR випромінюванням мають величезне значення не тільки для вище перелічених багаточисельних додатків, у т.ч., спектроскопії ультрахолодної плазми, а також для фізики РА у резонаторах, рідбергівських мазерів, техніки детектування сигналів НВЧ випромінювання на квантовому рівні чутливості, оптичних та атомних стандартів частоти, атомних годинників, що в свою чергу відкриває нові шляхи побудови квантових стандартів для вимірювання фундаментальних констант (у т.ч. з'ясування можливого дрейфу значення сталої тонкої структури), тестування фізичних постулатів, розвитку інерційної навігації, магнітометрії тощо. На кінець, є важливим, що багато ефектів квантової оптики та електродинаміки низьких енергій (напр., бездисипатівне загасання осциляцій Рабі в квантовому полі резонатора, або колапс Каммінгса, субвипромінювання Діке, процеси в мазерах на одному атомі, двофотонних мазерах, у т.ч., тонкі ефекти, пов'язані з квантовими властивостями фотонного поля в мікрохвильовому діапазоні) можуть кількісно адекватно вивчатися на основі фізичних систем із РА. Природньо, для реалізації всього вище сказаного, є принципово важливою наявність докладних прецизійних даних щодо спектроскопії багатьох РА, у т.ч., їх характеристик збудження та іонізації у BBR полі. Причини відсутності надійних даних для РА, особливо багатоелектронних та важких, на сьогодні добре відомі й пов'язані (не дивлячись на наявність сьогодні величезної кількості різ-

номанітних квантово-механічних і навіть КЕД версій методів атомної спектроскопії, таких як методи самоузгодженого поля типу Дірака-Фока, Хартрі-Фока, модельного потенціалу, функціоналу густини, квантового дефекту, зв'язаних кластерів т.ін.) із недостатньо прецизійним рівнем одночасного урахування релятивістських, обмінно-кореляційних, а також КЕД ефектів, невиконанням принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні радіаційних амплітуд, повільної збіжності ряду теорії збурень (ТЗ) для енергії, недостатньою оптимізацією базисів електронних хвильових функцій тощо. Можна констатувати, що на сьогодні існує гостра необхідність розвитку нового або суттєвого удосконалення існуючих методу прецизійного обчислення характеристик РА, насамперед, їх збудження та іонізації в електромагнітному, зокрема, VBR полі.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дослідження, виконані в роботі, увійшли в плани НДР Одеського державного екологічного університету (2003-2015): “Квантово-механічні методи розрахунку атомно-молекулярних систем у зовнішніх електричному і лазерному полях. Нелінійні селективні фотопроекти в атомах і молекулах”, “Квантово-механічні методи розрахунку ядерних, атомних та молекулярних систем у зовнішніх електричному, магнітному і лазерному полях. Динамічний хаос в атомних і мультиосциляторних системах”, “Нейронномережеве моделювання у кібернетиці, прикладній математиці, геофізиці та теорії викладання математики”, “Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах класичної, квантової механіки, КЕД” (№ держр. 0104U002222, 0104U 002223), “Розвиток нових високоточних методів розрахунку елементарних атомних процесів, вкл. процеси у полі лазерного випромінювання, та нових оптимальних технологічних схем лазерного розділення ізотопів” у відп. з грантом Президента України від 26.06.08 № 207/2008рп (N держр. 0108U010783), НДР “Розвиток та застосування нових квантово-механічних та КЕД методів в задачах обчислювальної математики та математичної фізики, теорії ядра і частинок, квантовій геометрії” (№ держр. 0109U000348), “Розвиток та застосування кібернетичних методів до дослідження динаміки ієрархічних хаотичних

процесів у квантових, інформаційних системах” (№ держр. 0111U005226), “Розвиток і застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики і атомної та ядерної спектроскопії” (№ держр. 0111U005225).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є розробка нового, послідовного релятивістського підходу до опису та обчислення енергетичних і спектральних характеристик (радіаційних амплітуд, ефективних часів життя, швидкостей VBR іонізації) релятивістських рідбергівських атомів у полі теплового VBR випромінювання і докладне вивчення цих характеристик для РА лужних та інших елементів.

Для досягнення мети дослідження були сформульовані такі завдання:

1. Розробити новий, послідовний релятивістський підхід до опису та обчислення енергетичних і спектральних характеристик релятивістських рідбергівських атомів у полі VBR випромінювання, в основі якого лежить узагальнення та застосування релятивістського енергетичного підходу (на основі S -матричного Gell-Mann та Low формалізму).
2. Для РА в полі VBR випромінювання розвинути нову версію релятивістської ТЗ з гамільтоніаном Dirac-Breit-Kohn-Sham і в межах останньої вперше побудувати оптимізоване одно-електронне представлення (релятивістських біспінорів) з використанням фундаментального принципу мінімізації калібровочно-неінваріантних внесків у радіаційні ширини.
3. Розробити нову методику обчислення радіаційних амплітуд з прямим введенням в матричні елементи переходів послідовного обмінно-поляризаційного оператора теорії функціоналу густини і в межах релятивістської ТЗ розробити ефективну процедуру урахування основних обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч., поляризації остову та некулонівського групування рідбергівських станів.
4. Провести тестові обчислення низки спектральних параметрів атомів, у т.ч., 1-електронних $ns_{1/2}, np_{1/2}$ енергій (іонізації), радіаційних амплітуд переходів в спектрах лужних атомів Na, K, Rb, Cs, 3s-3p, 3p-3d переходів в Na-подібних іонах SVI, CIVII, E1, E2 переходів в Hg^+ , ефективного часу життя, швидкості VBR-

іонізації для окремих рідбергівських станів лужних атомів, для яких є наявно-сті прецизійні експериментальні дані.

5. На основі нового підходу провести обчислення радіаційних амплітуд, ефективних часів життя, швидкостей VBR іонізації для груп рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів атомів Na, K, Ca⁺, Rb, Cs, Hg⁺ в широкому температурному інтервалі 0-600K.

Об'єкт дослідження – оптика та спектроскопія рідбергівських атомів.

Предмет дослідження – нова релятивістська теорія іонізації рідбергівських атомів в полі теплового випромінювання.

Методи дослідження: методи квантової механіки, оптики, квантової електродинаміки, атомної спектроскопії, у т.ч., методи релятивістської ТЗ, адиабатичний S-матричний формалізм Gell-Mann та Low, обчислювальні методи, у т.ч., розв'язання систем інтегро-диференціальних рівнянь Дірака, метод диференціальних рівнянь та інші.

Наукова новизна отриманих результатів, насамперед, пов'язана з послідовним вирішенням нової наукової проблеми релятивістської теоретичної оптики і спектроскопії РА у полі VBR випромінювання і полягає у наступному:

- розроблено новий, послідовний релятивістський підхід до опису та обчислення енергетичних і спектральних характеристик релятивістських РА у полі теплового VBR випромінювання, у т.ч. радіаційних амплітуд, ефективних часів життя, швидкостей VBR іонізації, в основі якого лежить узагальнення та застосування релятивістського енергетичного підходу у калібрувальній-інваріантній версії Glushkov-Ivanov (1992) і розвиток нової версії релятивістської ТЗ з гамільтоніаном Dirac-Breit-Kohn-Sham; в межах останньої вперше в теорії РА в VBR полі згенеровано оптимізоване одно-електронне представлення (релятивістських біспінорів) з використанням фундаментального принципу мінімізації калібровочно-неінваріантних ΔE_{minv} внесків в радіаційні ширини;
- вперше в теорії РА в VBR полі розроблено нову методику обчислення радіаційних амплітуд з прямим введенням в матричні елементи переходів послідовного обмінно-поляризаційного оператора теорії функціоналу густини; в межах

релятивістської ТЗ з гамільтоніаном Dirac-Breit-Kohn-Sham розвинено та узагальнено нову «гібридну» процедуру прецизійного урахування основних обмінно-кореляційних ефектів, зокрема, взаємного екранування частинок, їх обмінно-поляризаційної взаємодії, а також взаємодії з фотонним вакуумом через поляризуємий атомний остов, некулонівського групування рідбергівських рівнів, урахування станів безперервного спектру методом Dirac-Sturm та ін.

- на прикладі тестових обчислень енергетичних та спектральних характеристик атомів, у т.ч., 1-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій іонізації, радіаційних амплітуд для переходів головних серій в спектрах лужних атомів Na, K, Rb, Cs, 3s-3p, 3p-3d переходів в Na-подібних іонах *SVI*, *CVII* енергій, радіаційних амплітуд E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 переходу $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ Hg⁺ показано, що для забезпечення адекватної точності опису атомних властивостей РА в полі теплового випромінювання є потрібним коректне урахування релятивістських, обмінно-кореляційних ефектів, причому в переважній більшості досягається внесок $\Delta E_{\text{niv}} < 1\%$ в ширини;

- на прикладі обчислень величин ефективного часу життя, швидкості BBR-іонізації для окремих рідбергівських nS , nP , nD Na, Rb при $T=300, 500\text{K}$, температурних залежностей швидкостей іонізації РА, напр., $17D$ Na і порівняння з даними прецизійних експериментів Gallakher-Cooke (Virginia group), Beterov-Ryabtsev et al (Novosibirsk), Nascimento-Caliri-de Oliveira et al (São Paulo) продемонстрована достатньо висока ефективність теорії і показано, що при температурах нижче $\sim 150\text{K}$ відмінності даних обчислень в межах кулонівського наближення (методу квантового дефекту) від експерименту можна пов'язати із суттєвою роллю ефекту некулонівського групування рідбергівських рівнів, обмінно-поляризаційних ефектів; крім того, вперше в часових залежностях населеності рівнів $18s$, $17p$ і вище лежачих рівнів Na в атомних BBR-експериментах Gallakher-Cooke виявлено можливу наявність елементів слабого хаосу;

-на основі нової теорії отримані прецизійні (у переважній більшості вперше) теоретичні дані для радіаційних амплітуд, ефективного часу життя τ^{BBR} рідбер-

гівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів атомів Na, K, Ca^+ , Rb, Cs в широкому температурному інтервалі 0-600K, причому величини τ^{BBR} демонструють для ряду станів кількісно дуже суттєве зменшення під впливом BBR; отримані дані достатньо добре узгоджуються з даними удосконалених квазікласичних обчислень Veterov et al, Glukhov-Ovsiannikov, модельних обчислень Kleppner et al, Theodosiou, а для станів PA з $n=25-45$, де спостерігається відхилення квазікласичних даних від експерименту, одержано добре узгодження нашої теорії з останнім за рахунок коректного врахування суттєвого внеску поляризаційних ефектів, ефекту некулонівського групування рідбергівських рівнів тощо;

- на основі нової теорії отримані прецизійні теоретичні (для низки високо розташованих станів вперше) дані для швидкості BBR іонізації рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів Na, K, Ca^+ , Rb, Cs в температурному інтервалі 0-600K, максимум яких знаходиться в околі $n \sim 25$ (для різних станів Na, K, Rb, Cs з великими квантовими дефектами) при $T=300K$ й при більших T зсувається в сторону менших значень n ; показано, що відмінності даних по швидкостям BBR іонізації удосконалених квазікласичних обчислень, зокрема, для nS станів, пов'язані із суттєвим значенням багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, зокрема, поляризації багатоелектронного атомного остову, в той час як в розробленій теорії ці ефекти враховані коректно.

Практичне значення одержаних результатів. Розвинуті в роботі нові методи й отримані нові оптично-спектроскопічні дані по PA у вільному стані та у BBR полі можуть бути використані при розв'язанні багатьох суміжних задач у астрофізиці і радіоастрономії, фізиці Сонця і полярних сяйв, квантовій оптиці, інформатиці, криптографії, квантовому комп'ютингу, інтерферометрії, спектроскопії астрофізичної, лабораторної, криогенної плазми, фізиці лазерів і квантовій електроніці, у т.ч. PA у резонаторах, рідбергівських мазерів, вивчення властивостей бозе-конденсату у парах PA, фонтанів холодних PA, атомно-радіаційних машин Карно, а також розвитку принципово нових експериментальних методів лазерної спектроскопії, магнітно-оптичних пасток, техніки детектування сигналів НВЧ випромінювання на квантовому рівні чутливості, опти-

чних (атомних) стандартів частоти, атомних годинників, й на кінець, дослідження нового рідбергівського стану речовини, побудови нових квантових стандартів для вимірювання фундаментальних сталих (їх варіацій), тестування фундаментальних фізичних постулатів, розвитку інерційної навігації тощо.

Особистий внесок здобувача. Всі результати, які складають основний зміст дисертації і закладають основи нового методу вирішення наукової проблеми спектроскопії рідбергівських атомів в полі теплового випромінювання (побудови послідовної релятивістської теорії збудження та іонізації рідбергівських атомів в VBR полі), отримані особисто автором. Наведені в роботі нові дані для радіаційних амплітуд, імовірностей переходів, сил осциляторів, ефективних часів життя, швидкостей іонізації РА тепловим випромінюванням рідбергівських атомів належать особисто автору. В публікаціях у співавторстві автору належать основні ідеї, вивід мастерних формул та їх обґрунтування, всі дані обчислень, їх аналіз і основні висновки. Автор вважає своїм обов'язком висловити глибоку подяку науковому керівнику, проф. Глушкову О.В.

Апробація результатів дисертації. Головні результати роботи були представлені та обговорювались на таких наукових конференціях (школах): 23rd International Conference on Spectral Lines Shapes (Torun, Poland, 2016), 8th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016; Kielce, Poland, 2016), 28th IUPAP Conference on Computational Physics (Gauteng, South Africa, 2016), 13th SPARC Topical Workshop Jagiellonian University (Kraków, Poland, 2016), International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (Odessa, Ukraine, 2015), 3rd European Nuclear Physics Conference (Groningen, The Netherlands, 2015), XX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Varna, Bulgaria, 2015), International Symposium “Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy” (Odessa, Ukraine, 2015), 21th Central European Workshop on Quantum Optics.-(Brussels, Belgium, 2014), 13th International Conference on Artificial Intelligence, Knowledge Engineering and Data Bases (AIKED14; Gdansk, Poland, 2014), International Conference on Statistical Physics (Rhodes, Greece, 2014), 12th International Conference “Dynamical Systems-Theory and Applications” (DSTA-2013; Lodz, Poland, 2013), XVIII International

Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Paraty-Rio de Janeiro, Brasil, 2013), XI International Conference on Atomic and Molecular Pulsed Lasers (AMPL-13, Tomsk, Russia, 2013), III International School and Conference on Photonics (Belgrad, Serbia, 2013), 8th European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics” (Spetses, Greece, 2003) та наукових семінарах ОНПУ, НДІ фізики ОНУ ім. І.І. Мечникова, ОДЕКУ, Технічного ун-ту Dresden (Germany).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи викладені в більш 24 наукових публікаціях, зокрема, 1 монографії (Springer), 10 статтях у міжнародних фахових журналах і виданнях (всі входять до міжнародних науково-метричних баз типу Scopus та ін.), більш ніж 13 тезах та матеріалах доповідей на міжнародних наукових конференціях.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота викладена на 130 стор. машинописного тексту, містить у собі 16 рис., 16 таблиць, складається з вступу, 3-х розділів, висновків, списку використаних джерел (228 найм.).

РОЗДІЛ 1

СПЕКТРОСКОПІЯ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У ПОЛІ ТЕПЛООВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ: ЯКІСНІ АСПЕКТИ, ЕКСПЕРИМЕНТИ, ОГЛЯД ТЕОРЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ОБЧИСЛЕННЯ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВВР ПОЛІ

1.1. Якісні аспекти спектроскопії рідбергівських атомів у вільному стані та у полі теплового випромінювання

Як вказувалося у вступі, активне дослідження оптичних та спектроскопічних характеристик РА у вільному стані та у полі зовнішнього електромагнітного випромінювання, зокрема, теплового, пов'язано як з потребами величезної кількості додатків, зокрема, у астрофізиці та радіоастрономії, фізиці Сонця та полярних сяїв, квантовій оптиці, інформатиці, криптографії, квантовому комп'ютингу, інтерферометрії, спектроскопії астрофізичної, лабораторної, криогенної плазми, фізиці лазерів та квантовій електроніці, у т.ч. РА у резонаторах, рідбергівських мазерів, вивченням властивостей бозе-конденсату у парах РА, фонтанів холодних РА, атомно-радіаційних машин Карно, а також розвитком принципово нових експериментальних методів лазерної спектроскопії, магнітно-оптичних пасток, техніки детектування сигналів НВЧ випромінювання на квантовому рівні чутливості, оптичних та атомних стандартів частоти, атомних годинників тощо, так й унікальними властивостями саме РА [1-184]. Відомо, що ряд астрофізичних процесів в міжзоряному газі, який взаємодіє з фрагментами вибуху наднових, зіткненнями міжзоряних хмар, і надзвукові потоки газу при утворенні зірок приводять до виникнення РС з $n \sim 1000$.

Характерні скейлінгові співвідношення для основних характеристик РА зводяться до залежностей від головного квантового числа стану. Для часів життя: $n^3 a_0 \hbar / e^2 Z$ ($\tau \sim n^3$ для $l \sim 1$, $\tau \sim n^5$ для $n \sim l$; l - орбітальне квантове число), геометричних розмірів $\sim n^2$ ($n^2 a_0 / Z$, $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0,5291773 \text{ \AA}$), геометричних перерізів

$\pi^4 a_0^2 / Z^2$, енергій зв'язку рідбергівського електрону $Z^2 R_\infty / n^2$ ($R_\infty = 13.6058$ eВ), поляризуемостей $\sim n^2$, дипольних моментів радіаційних переходів $\sim n^2$, зсувів за рахунок дії зовнішніх полів, зокрема, зсув Штарка $\sim n^7 l^5$ та ефект Зеєману $\sim n^2$), які приводяться у багатьох багаточисельних оглядах по спектроскопії РА (див. [41-65]).

Оскільки з атомно-фізичної точки зору, РА як система, яка знаходиться у високо збудженому стані, в якісному аспекті дуже подібна атому водню, найбільш розповсюджений підхід до теоретичного опису РА, природньо, базується на воднеподібному QA, яке було часом трансформовано до так званого методу квантового дефекту [129]. Розвиток цього підходу починався із відомих класичних експериментів Рідбергу, присвячених аналізу спектрів лужних елементів, та відомих моделей типу Бейтса-Дамгаард та Берджеса-Ситона. За теперішнього часу ці моделі трансформовані в так звані одноканальне та багатоканальне приближення квантового дефекту [128-134,37,1739].

Природньо, що воднеподібні спектри лужних та подібних їм атомних систем досить задовільно описуються найпростішим вираженням виду:

$$E_{alk} = -\frac{1}{2n_{eff}^2} = -\frac{1}{2(n-\delta_l)^2}, \quad n \in N \quad (1.1)$$

де n_{eff} є ефективне квантове число,

δ_l – так званий квантовий дефект, який залежить від орбітального та головного квантових чисел.

Для досягнення більш високої точності визначення величини δ_l звичайно використати розкладання по енергії типу:

$$\delta_l = \delta_l^{(0)} + \sum_{i=1}^M \delta_l^i E^i \quad (1.2)$$

З атомно-фізичної точки зору, введення квантового дефекту фактично пов'язано із необхідністю у той чи іншій мірі врахувати вплив некулонівської

частини самоузгодженого поля в атомах. До речі, цей ефект не враховується в спрощених водне-подібних моделях. У разі станів континууму роль квантового дефекту для зв'язаних станів грає найважливіший в теорії розсіювання асимптотичний фазовий зсув:

$$\tau = \delta_l \cdot \pi$$

згідно із відомою теоремою Сітона [129]. В цілому ряді обзорів та монографій [94,119,128-134] дана докладна свідка з тим або іншим ступенем точності нерелятивістських значень квантових дефектів і фазових зрушень у переважності для лужних атомів в основному і збуджених станах для різних значень орбітального квантового числа.

У таблиці 1.1 ми наводимо найбільш точні на сьогодні значення коефіцієнтів (1.2) для обчислення величин квантових дефектів для рідних станів РА лужних атомів (з [94,134,173]).

У релятивістському наближенні для дискретних рівнів енергії одночастинкових (тобто з одним валентним електроном) атомів релятивістський квантовий дефект записується згідно із стандартним визначенням як :

$$\mu_\chi(E_n) = n - \nu_n + \gamma - |\chi|, \quad (1.3)$$

де n і χ – головне та Дірака квантові числа,

$$\begin{aligned} \gamma &= \sqrt{\chi^2 - (\alpha z)^2}, \\ \nu_n &= \frac{z\varepsilon}{\lambda}, \\ \lambda &= \sqrt{-E_n(1 + \varepsilon)}, \\ \varepsilon &= 1 + \alpha^2 E_n. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Відповідний вираз для одноелектронної енергії має відомий вигляд:

$$E_n = \frac{1}{\alpha^2} [(1 - 2\alpha^2 x)^{-1/2} - 1] = x + \frac{3}{2}(\alpha x)^2 + \frac{5}{2}\alpha(\alpha x)^3 + \dots \quad (1.5a)$$

Таблиця 1.1.

Значення квантових дефектів для ридберговських станів лужних атомів

		$S_{1/2}$	$P_{1/2}$	$P_{3/2}$	$D_{3/2}$	$D_{5/2}$	$(F_{5/2}) (F_{7/2})$
Li	a	0.39951	0.04717		0.00194		0.00031
	b	0.02825	-0.0240		-0.00377		-0.00099
	c	0.02082	0.01548		-0.01563		-0.00740
	d	-0.0979	-0.1607		0.10335		
	e	0.14782	0.33704				
Na	a	1.34797	0.85544	0.85463	0.01491	0.014924	0.00145 ^a
	b	0.06099	0.11207	0.11234	-0.04251	-0.04259	0.01731 ^a
	c	0.01967	0.0479	0.04971	0.00843	0.00840	-0.7809 ^a
	d	-0.0010	0.0457	0.04063			7.021 ^a
K	a	2.18020	1.71389	1.71085	0.27697	0.27716	0.01010
	b	0.13558	0.23329	0.23544	-1.02491	-1.02563	-0.10022
	c	0.0759	0.16137	0.11551	-0.70917	-0.59201	1.56334
	d	0.117	0.5345	1.1015	11.839	10.0053	-12.6851
	e	-0.206	-0.234	-2.0356	-26.689	-19.0244	
Rb	a	3.13118	2.65488	2.64167	1.34809	1.34647	0.01652 ($F_{5/2}$)
							0.01654 ($F_{7/2}$)
	b	0.17846	0.29006	0.29507	-0.60286	-0.59601	-0.085(9) ($F_{5/2}$)
							-0.086(7) ($F_{7/2}$)
Cs	a	4.04936	3.59159	3.55896 ^b	2.4754562 ^b	2.46632	0.03341
	b	0.23770	0.36093	0.39247 ^b	0.009320 ^b	0.01358	-0.19867
	c	0.25540	0.41905	-0.67431 ^b	-0.43498 ^b	-0.37457	0.28953
	d	0.00378	0.64388	22.3531 ^b	-0.76358 ^b	-2.1867	-0.2601
	e	0.25486	1.45035	-92.289 ^b	-18.0061 ^b	-1.5532	

де

$$x = -\frac{Z^2}{2[n - \mu_\chi(E_n) + \gamma - |\chi|^2]^2}. \quad (1.56)$$

Неважко перевірити, що у нерелятивістському ліміті, тобто при значенні сталої тонкої структури $\alpha \rightarrow 0$, релятивістські вирази для дефекту та енергії переходять у нерелятивістські типу (1.1).

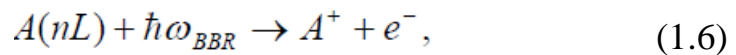
Для нас дуже важливо тут підкреслити, що насправді роль ефектів суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах [172,173,138], а також тиску континууму та інших обмінно-поляризаційних ефектів у багатьох сучасних теоріях РА достатньо прецизійно досі не врахована, що призводить до високого ступеню погрішності при опису спектрів, насамперд, важких багатоелектронних РА, хоча у випадку звичайних лужних елементів метод квантового дефекту дає досить прийнятні (але, не завжди) результати.

Як вказувалося вище, РА є дуже чутливими до дії зовнішніх електромагнітних полів, у тому числі, поля теплового випромінювання. З цієї обставини, пов'язаної з великими геометричними розмірами РА і великими значеннями дипольного моменту, РА дуже ефективно взаємодіють із фоновим тепловим випромінюванням (випромінювання абсолютно чорного тіла ВВР), яке очевидно викликає переходи як між дискретними рідбергівськими станами, так і з дискретних станів у стани континууму, тобто мова йде про процеси збудження та іонізації.

З атомно-фізичної точки зору, низькі частоти переходів між дискретними станами у РА знаходяться в області досить високої спектральної інтенсивності випромінювання абсолютно чорного тіла при всіх температурах, за винятком найнижчих. Взаємодія з ВВР випромінюванням призводить до суттєвого впливу на результати будь-яких експериментів з РА, в яких важливу роль відіграє заселеність рідбергівських станів. Нагадаємо, що типові електричні дипольні переходи з основного стану атома мають частоти $\sim 10^{13} - 10^{14}$ Гц, а переходи між рідбергівськими станами $\sim 10^{11}$ Гц. Фактично, у певному наближенні можна вважати, що ВВР випромінювання діє на атом в основному стані як повільно мінливе поле, в той час як РА відкликається на нього як на поле, що швидко змінюється [41,94].

Природньо, що теорія радіаційних переходів, збудження та іонізацій атомів будується на основі сучасної квантової теорії випромінювання. Якісна картина іонізації РА в полі ВВР в принципі уявляється достатньо зрозумілою, але кількісні аспекти вивчені абсолютно недостатньо.

Взаємодія РА з тепловим випромінюванням призводить не тільки до переходів в дискретном спектрі, але і до іонізації атома [41,55]:



де $\hbar\omega_{\text{ВВР}}$ - енергія поглиненого теплового фотона, A^+ - атомарний іон, e^- - вільний електрон, залишивший РА в результаті іонізації.

Для температур порядку $T=10^4$ К, частота більшої частини фотонів ВВР ω не перевищує 0.1 ат.од., тобто можливо використання одно-електронного наближення для опису перерізу іонізації $\sigma_{nl}(\omega)$. Остання величина звичайно повинна розглядатися з урахуванням Планківського розподілу для густини числа теплових фотонів:

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3 [\exp(\omega/kT) - 1]}, \quad (1.7)$$

де $k=3.1668 \times 10^{-6}$ ат.од.К⁻¹ – звичайна стала Больцмана,

$c = 137.03597$ ат.од. – швидкість світла,

T -температура випромінювання.

При обчисленні ймовірностей радіаційних переходів під дією теплового випромінювання звичайно переходять до чисел фотонів на моду поля випромінювання, тобто до чисел заповнення фотонів кожної моди з частотою ω (в атомних од.) [41]:

$$n_\omega = \frac{1}{[\exp(\omega/kT) - 1]} \quad (1.8)$$

Швидкість іонізації для зв'язаного стану nl визначається інтегруванням по частотам теплового випромінювання, а саме:

$$W_{nl}(T) = c \int_{|E_{nl}|}^{\infty} \sigma_{nl}(\omega) \rho(\omega, T) d\omega \quad (1.8)$$

де σ_ω –переріз фотоіонізації рідбергівського атому на частоті ω ,

$E_{nl} = 1/[2(n^*)^2]$ – порогова частота іонізації атому в рідбергівському стані nl з ефективним квантовим числом $n^* = (n - \delta_l)$,

δ – квантовий дефект рідбергівського стану.

В нерелятивістському наближенні переріз іонізації РА під дією фотонів з частотою ω із зв'язаного стану з головним квантовим числом n та орбітальним квантовим числом l визначається стандартним квантово-механічним співвідношенням (див., напр., [55]):

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{3c(2l+1)} [lM_{nl \rightarrow El-1}^2 + (l+1)M_{nl \rightarrow El+1}^2], \quad (1.9)$$

Вище радіальний матричний елемент переходу іонізації зі зв'язаного стану з радіальною хвильовою функцією $R_{nl}(r)$ в стан безперервного спектра з хвильовою функцією $R_{El}(r)$, нормовану на дельта-функції енергії,

$$\int_0^\infty R_{El'}(r)R_{El}(r)r^2 dr = \delta(E - E'),$$

виглядає стандартним чином

$$M_{nl \rightarrow El'} = \int_0^\infty R_{El'}(r)r^3 R_{nl}(r)dr. \quad (1.10)$$

Для континууму ($E \geq 0$) хвильові функції звичайно представити як лінійну комбінацію двох лінійно-незалежних кулонівських функцій. Наприклад, у випадку діраківського спінору (релятивістське кулонівське наближення) коефіцієнти в цій лінійній комбінації визначаються так, щоб при $r \rightarrow \infty$

$$\left. \begin{array}{l} G_\chi(E, r) \\ F_\chi(E, r) \end{array} \right\} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon \pm 1}{\pi p}} \sin \left[pr + y \ln 2pr + \xi - \arg \Gamma(\gamma + 1 + iy) - \frac{\pi\gamma}{2} + \delta_\chi(E) \right], \quad (1.11)$$

де $p = \sqrt{E(1 + \varepsilon)}$,

$$\varepsilon = 1 + \alpha^2 E,$$

$$y = \frac{z\varepsilon}{\rho},$$

$$\xi = \frac{1}{2} \arg \frac{\chi - i \frac{z}{\rho}}{\gamma - iy}$$

Швидкість іонізації, викликаной тепловим випромінюванням, при фіксованій температурі T остаточно запишеться у вигляді:

$$W_{BBR} = \frac{4}{3c^3} \int_{|E_{nl}|}^{\infty} \left[\frac{l}{2l+1} M_{nl \rightarrow El-1}^2 + \frac{l+1}{2l+1} M_{nl \rightarrow El+1}^2 \right] \cdot \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3 [\exp(\omega/kT) - 1]} d\omega. \quad (1.12)$$

Слід відзначити, що в літературі (див., напр., [45-60]) часто наводяться в певній мірі корисні наближені аналітичні вирази для швидкості іонізації, в яких явно визначена залежність від головного квантового числа n , орбітального моменту L і температури T . Як правило, для отримання таких виразів автори використовують аналітичні формули для радіальних матричних елементів радіаційних переходів в воднеподібному наближенні квазікласичного підходу. Напр., Cooke-Gallagher (див., напр., [41,42]), використовуючи стандартні правила сум, одержали таку оцінку для швидкості індукованої BBR депопуляції рідбергівських станів:

$$\Gamma_{BBR} = \frac{4kT}{3c^3 n_{eff}^2} \quad (1.13)$$

Але пізніше, Фарлі та Винг [60] показали, що це співвідношення суттєво завищує чисельно розраховані швидкості депопуляції, особливо для низьких n . Бетеров та інш. [50-55] суттєво покращили визначення швидкості депопуляції, запропонувавши такий вираз:

$$\Gamma_{BBR} = \frac{1}{n_{eff}^5} \frac{2.14 \times 10^{10}}{\exp(315780/n_{eff}^3 T) - 1} (s^{-1}) \quad (1.14)$$

Наведемо далі визначення в моделі Гореславського, Делоне і Крайнова [44] перерізу іонізації атому в рідбергівському стані nL , який виражається через функцію Макдональда $K_\nu(x)$:

$$\sigma_\omega(nL \rightarrow E, L \pm 1) = \frac{4L^4}{9cn^3\omega} \left[K_{2/3}^2\left(\frac{\omega L^3}{3}\right) + K_{1/3}^2\left(\frac{\omega L^3}{3}\right) \right] \quad (1.15)$$

а в роботах Бетерова ті інш. [50-55] наводиться достатньо ефективний вираз для швидкості іонізації:

$$W_{BBR} \approx \frac{T}{\pi^2 c^3} \left[\frac{2.80}{n^{7/3}} + \frac{2.09L^2}{n^{11/3}} \right] \ln\left(\frac{1}{1 - \exp(-\frac{\omega_{nL}}{T})}\right) \quad (1.16)$$

Й хоча приведені аналітичні вирази мають певне значення, в той же час, як відзначають самі автори, порівняння W_{BBR} , отриманих за допомогою наведених формул з результатами чисельних розрахунків на основі більш реалістичних послідовних підходів показує суттєву різницю в значеннях W_{BBR} , особливо для неводнеподібних станів лужних атомів з великими значеннями квантового дефекту. Для атомів в основному і низько розташованому станах з великими частотами переходів між ними при температурі 300К $n \ll 1$, і ймовірність індукованих тепловим випромінюванням переходів мала. Для рідбергівських станів з хвильовими числами переходів 10^4 см^{-1} маємо $n \sim 10$, тому ймовірність індукованих тепловим випромінюванням переходів може бути на порядок більше, ніж при спонтанному випромінюванні.

Ймовірність спонтанного випромінювання при переході атома з рівня nL на рівень $n'L'$ визначається звичайно коефіцієнтом Ейнштейна, тобто:

$$A(nL \rightarrow n'L') = -2\alpha^3 \omega_{nn'}^2 f(nL \rightarrow n'L') \quad (1.17)$$

де $\alpha=1/137.03597$ – стала тонкої структури,

$\omega_{nn'}$ – частота переходу між станами n та n' ,

$gf(nL \rightarrow n'L')$ – сила осцилятора:

$$f(nL \rightarrow n' L') = \frac{2}{3} \omega_{n'n} |R(nL \rightarrow n' L')|^2 \frac{L_{\max}}{2L+1} \quad (1.18)$$

$$L_{\max} = \max(L, L'), R(nL \rightarrow n' L')$$

У формулі (1.18) звичайно присутній квадрат радіального матричного елемента електричного дипольного моменту згідно із золотим правилом Фермі. Повна швидкість спонтанного розпаду звичайно визначається як сума ймовірностей переходів во всі нижче розташовані стани $n < n'$:

$$\Gamma_{nr} = \sum_{L'=L\pm 1} \sum_{n'}^n R(nL \rightarrow n' L') \quad (1.19)$$

Ймовірності індукованих BBR випромінюванням переходів також виражаються через сили осциляторів і числа заповнення фотонів на частоті ω_{mn} :

$$W(nL \rightarrow n' L') = 2\alpha^3 \omega_{mn}^2 |f(nL \rightarrow n' L')|^2 \bar{n}_\omega \quad (1.20)$$

Повна швидкість індукованих тепловим випромінюванням переходів визначається сумою швидкостей переходів по всім станам $n' L'$:

$$\Gamma_{BBR} = \sum_{L'=L\pm 1} \sum_{n'} W(nL \rightarrow n' L')$$

$$\Gamma_{BBR} = \sum_{L'=L\pm 1} A(nL \rightarrow n' L') \frac{1}{\exp(\omega_{mn} / kT) - 1} \quad (1.21)$$

Природньо BBR випромінювання сприяє заселенню як низько розташованих, так й високо розташованих станів, але в той же час під дією теплового випромінювання будуть заселятися переважно найближчі до даному стану з $n' = n \pm 1$, які і дають основний внесок в повну швидкість індукованих тепловим випромінюванням переходів, а в результаті спонтанного розпаду - саме низько лежачого стану. Очевидно, що внесок теплового випромінювання в повну швидкість розпаду збуджених станів буде достатньо істотним [41,42].

Крім каналу прямої фотоіонізації РА тепловим випромінюванням в задачах про іонізацію РА важливим також є канал іонізації рідбергівських станів витягаючим електричним полем. Справа у тому, що якщо ВВР випромінювання заселяє в РА стани з $n' \geq n$, є очевидним, що вони можуть бути іонізовані, причому відповідний внесок в загальний іонізаційний сигнал може бути порівняним з внеском каналу прямої ВВР фотоіонізації [54,55]. Для розрахунку швидкості в даному випадку польової іонізації W_{SFI} достатньо розрахувати швидкість заселення високо розташованих станів ВВР випромінюванням, тобто:

$$W_{SFI} = \sum_{n' \geq n} \sum_{L'=L \pm 1} W(nL \rightarrow n'L') \quad (1.22)$$

Наведемо конкретні вирази для величини (1.22), які використовуються у багатьох роботах, зокрема, наближення Гореславського, Делоне і Крайнова [47]:

$$W_{SFI} \approx \frac{1}{\pi^2 c^3 n^3} \int_{(1/2n^2) - (1/2n_c^2)}^{\omega_{nL}} [2.22\omega^{-1/3} + 2.63\omega^{1/3}L^2] \frac{d\omega}{\exp(\omega/kT) - 1} \quad (1.23)$$

а також вираз Бетерова та інших [55]:

$$W_{SFI} \approx A_L \frac{11500 T}{n^{7/3}} [\cos(\Delta_L^+ + \frac{\pi}{6})^2 + \cos(\Delta_L^- - \frac{\pi}{6})^2] \times \\ \times [\ln \frac{1}{1 - \exp(157890 / Tn_c^2 - 157890 / Tn^2)} - \ln \frac{1}{1 - \exp(-157890 / Tn^2)}] s^{-1} \quad (1.24)$$

Доречно також вказати на ще один канал, а саме описує процес другого порядку, так звані індуковані ВВР випромінюванням переходи з сусідніх станів n_1L_1 у високо розташовані стани n_2L_2 з $n_2 > n_1$ з можливою подальшою іонізацією витягаючим електричним імпульсом. В роботі [55] для величини швидкості цього процесу отримане наступне співвідношення :

$$W_{BBR}^{mix}(nS) = \sum_{n'} \frac{[W(nS \rightarrow n'P) + A(nS \rightarrow n'P)]W_{BBR}(n'P)}{1/\tau_{eff}^{n'P} - 1/\tau_{eff}^{nS}} \left(1 - \frac{t_{eff}^{nS}}{t_{eff}^{n'P}}\right) \quad (1.25)$$

де τ_{eff}^{nL} - ефективний час життя nL , причому замість величини W_{BBR} слід вставити величину W_{SFI} . (див. докладніше [50-55]).

У вказаних роботах наводиться вираз для величини повної швидкості іонізації РА як сума:

$$W_{BBR}^{tot} = W_{BBR} + W_{SFI} + W_{BBR}^{mix} + W_{SFI}^{mix} \quad (1.26)$$

де перший член в (1.26) W_{BBR} - швидкість прямої фотоіонізації з початково збудженого стану nL , другий член W_{SFI} - швидкість іонізації атомів у високо розташованих станах n_2L_2 , заселених тепловим випромінюванням, електричним полем; третій член в (1.26) - повна швидкість прямої іонізації РА у довколишніх до початково збудженого n_1L_1 станах; на кінець, останній – це іонізації високо розташованих станів, заселених в результаті двоступеневого процесу $nL \rightarrow n_1L_1 \rightarrow n_2L_2$.

Повна ширина експериментально спостерігаемого рідбергівського стану атому або іону (природньо ізольованого від всіх зовнішніх полів крім BBR), складається, очевидно, із природньої, спонтанної радіаційної ширини та BBR-індукованої (теплової) ширини:

$$\Gamma_{nl}^{tot} = \Gamma_{nl}^{sp} + \Gamma_{nl}^{BBR}(T) \quad (1.27)$$

Ефективний час життя стану РА природньо є обернено пропорційним повній швидкості розпаду збудженого стану в результаті спонтанних переходів і переходів, індукованих тепловим випромінюванням, тобто можна записати:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \Gamma_0 + \Gamma_{BBR} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{BBR}} \quad (1.28)$$

Слід згадати, що наведені вище формули для визначення імовірностей, швидкостей переходів, часу життя записані у нерелятивістському наближенні й фактично використані у переважній більшості сучасних теорій та модельних уявлень щодо процесів збудження та іонізації РА в полі теплового випромінювання (див., напр., [41-78]). Слід підкреслити, що насправді, процес збудження та іонізації РА тепловим випромінюванням не є простим процесом, як може здаватися на перший погляд; більш того, саме теоретичні та експериментальні складнощі опису РА підкреслюються практично у всіх оглядах. З теоретичної точки зору, послідовний розгляд процесу повинен включати і пряму фотоіонізацію з початково збудженого стану nL , іонізацію витягаючими електричними імпульсами високо лежачих рідбергівських станів, заселених тепловим випромінюванням, пряму фотоіонізацію рідбергівських станів, сусідніх до початково збудженого та спочатку заселених тепловим випромінюванням, на кінець іонізацію електричними імпульсами вище розташованих станів, заселених внаслідок дво-багато-ступеневих процесів. На наш погляд, у будь-якому випадку найбільш коректна та послідовна квантова теорія збудження та іонізації РА в полі теплового випромінювання бажано будувати на принципах КЕД, або відповідному релятивістському наближенні.

Далі розглянемо коротко принципово важливу та актуальну проблему зсуву частоти атомного переходу (в атомних годинниках, атомних та оптичних стандартах частоти). Фізичний аспект проблеми ілюструє рис.1 (докл. див.: <http://www.physics.udel.edu/~msafono>, а також [96-108]).

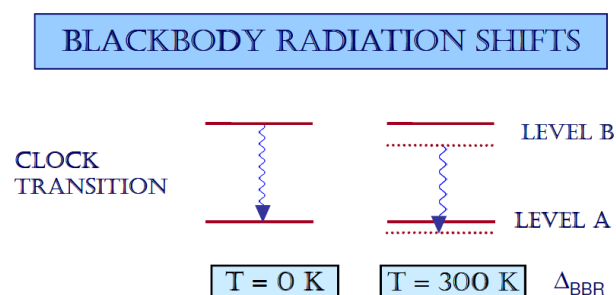


Рисунок 1.1 Зсув частоти переходу в атомному годиннику за рахунок ефекту впливу теплового випромінювання

Фактично мова йде про те, що на практиці частоти переходів в атомних (оптичних) годинниках (атомні та оптичні стандарти частоти) мають бути скоректовані за рахунок урахування ефекту VBR зсуву, до речі, який дуже важко точно виміряти безпосередньо. Відповідний VBR зсув насправді може бути пригнічений тільки охолодженням годинника. При кімнатній температурі різниця VBR зсувів двох рівнів переходу стає одним із найбільших внесків у величину невизначеності для оптичних (атомних) годинників. Як приклад, нагадаємо, що перехід у годиннику на Sr має найбільший VBR зсув серед всіх оптичних стандартів частоти і за теперішнього часу це питання знаходиться у стадії активної розробки (див. [96-1099]); так званий частинний VBR зсув ν_{VBR}/ν_0 в Sr більш ніж в 1000 разів більше, ніж подібний зсув в атомному годиннику на іоні Al^+ .

Якщо вважати, що закон випромінювання Планка обумовлює залежність від частоти випромінювання чорного тіла при температурі T , то зсув частоти переходу внаслідок дії цього ефекту може бути пов'язаний з відповідною скалярною поляризуемостью α_0 згідно виразу [108,109]:

$$\Delta\nu = -\frac{1}{2}(831.9V/m)^2\left(\frac{T(K)}{300}\right)^4\alpha_0(1+\eta) \quad (1.29)$$

де η - досить мала так звана динамічна поправка (дивись докладніше [98-105]).

Відповідно, корисно нагадати стандартні визначення скалярної і тензорної поляризуемостей атому у стані, скажемо, ν [108,109]:

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{2}{3(2j_\nu + 1)} \sum_k \frac{\langle k \parallel D \parallel \nu \rangle^2}{E_k - E_\nu}, \\ \alpha_2 &= -4C \sum_k (-1)^{j_\nu + j_k + 1} \begin{Bmatrix} j_\nu & 1 & j_k \\ 1 & j_\nu & 2 \end{Bmatrix} \frac{\langle k \parallel D \parallel \nu \rangle^2}{E_k - E_\nu}, \\ C &= \left(\frac{5j_\nu(2j_\nu - 1)}{6(j_\nu + 1)(2j_\nu + 1)(2j_\nu + 3)} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

У виразах (1.30) фігурують стандартні редуковані матричні елементи, а сумування введеться по всім проміжним станам, природньо, які дозволяються правилами відбору для електричних дипольних переходів. Проблеми обчислення виразів типу (1.30) аналізуються докладно у вище перелічених роботах.

1.2 Огляд експериментальних досліджень та теоретичних методів опису характеристик рідбергівських атомів у полі теплового випромінювання

Зрозуміло, що теоретичні аспекти випромінювання чорного тіла достатньо давно дуже добре зрозумілі, в той час як кількісні ще далекі від задовільного рівня. В світі нових теоретичних та експериментальних проблем (див. вище вступ), в останні роки інтерес до дослідження теплового випромінювання різко зріс.

Одним з перших експериментальних спостережень взаємодії РА з полем теплового випромінювання були роботи Gallakher-Cooke (Фізична лабораторія Університету шт. Вірджинія) [41,42], в яких були проведені вимірювання значень часів життя, зокрема, рідбергівських станів 17P і 18P атому натрію. У подальшому програма досліджень тут була суттєво розвинена.

За теперішнього часу експериментальні установки для дослідження взаємодії пучка теплових РА мікрохвильовим полем мають такі групи: група С. Арош (Франція, Центр мікрохвильової спектроскопії, Еколь Нормаль, Париж), R. Walther (ФРН, Мюнхенський університет), Т. Gallakger (Фізична лабораторія Університету шт. Вірджинія), D.Kleppner (Масачусетський технологічний інститут, США) [38-76].

В останній час дослідження з детектування дії теплового випромінювання на РА потужно проводяться групою Леонарда в Технічному університеті Ганновера (ФРН), й особливо ефективно групою Бетерова-Рябцева в Інституті напівпровідників РАН (раніше в Інституті теплофізики СО РАН) [50-55].

На сьогодні переважна більшість експериментів із дослідження РА виконувалося з використанням атомів лужних металів, і в загальному аспекті експе-

риментальні установки по отриманню високо збуджених РА, у т.ч. для рідбергівських мазерів [75], майже ідентичні і відрізняються типами використовуваних лазерів, специфічними режимами їх роботи, особливостями реєстраційної техніки обробки сигналу, тощо.

Особливою слід вважати експериментальну установку групи П. Коча (США, Нью-Йоркський Університет), в якій швидкі РА отримувалися в результаті перезарядки протонів на мішені.

На рисунку 1.2 наведена характерна схема приготування та детектування РА лужних металів з огляду [92].

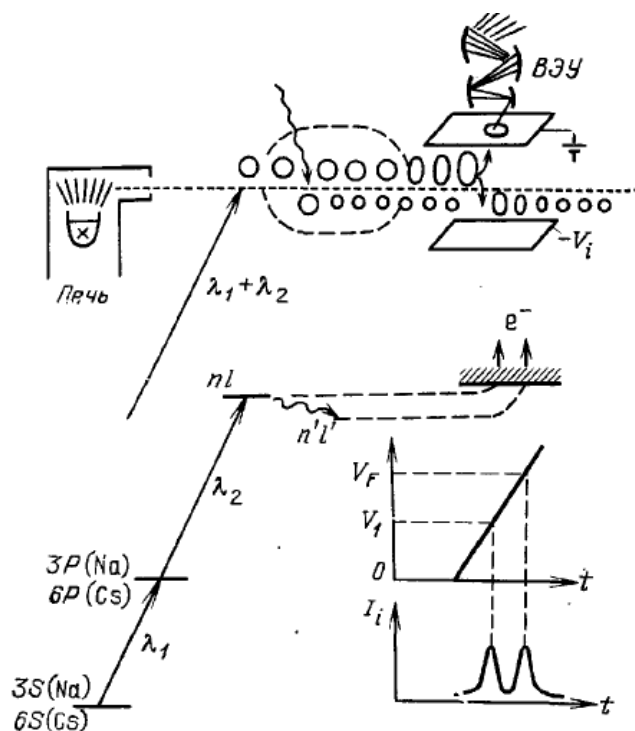


Рисунок 1.2 Схема приготування та детектування лужних РА (з [92]).

В якості ілюстрації можливостей дослідження спектрів РА в холодній плазмі на рисунку 1.3 наведений експериментальний спектр рубідію в рідбергівських станах, який випромінює в холодній плазмі (із роботи [93]). Добре спостерігаються рідбергівські стани з головним квантовим числом 23-45 і різними значеннями орбітального квантового числа.

Стосовно сучасних теоретичних моделей збудження та іонізації РА тепловим випромінюванням, слід тут же підкреслити, що оскільки цей клас задач є

стандартним класом задач квантової оптики та спектроскопії атомів, звичайно для відповідних обчислень енергетичних та спектральних властивостей РА були використані існуючі добре відомі, підкреслимо, у переважній більшості, нерелятивістські методи та моделі. Авжеж, аналітичні вирази для радіаційних амплітуд звичайного РА водню виявилися дуже корисними й були використані для перших оцінок.

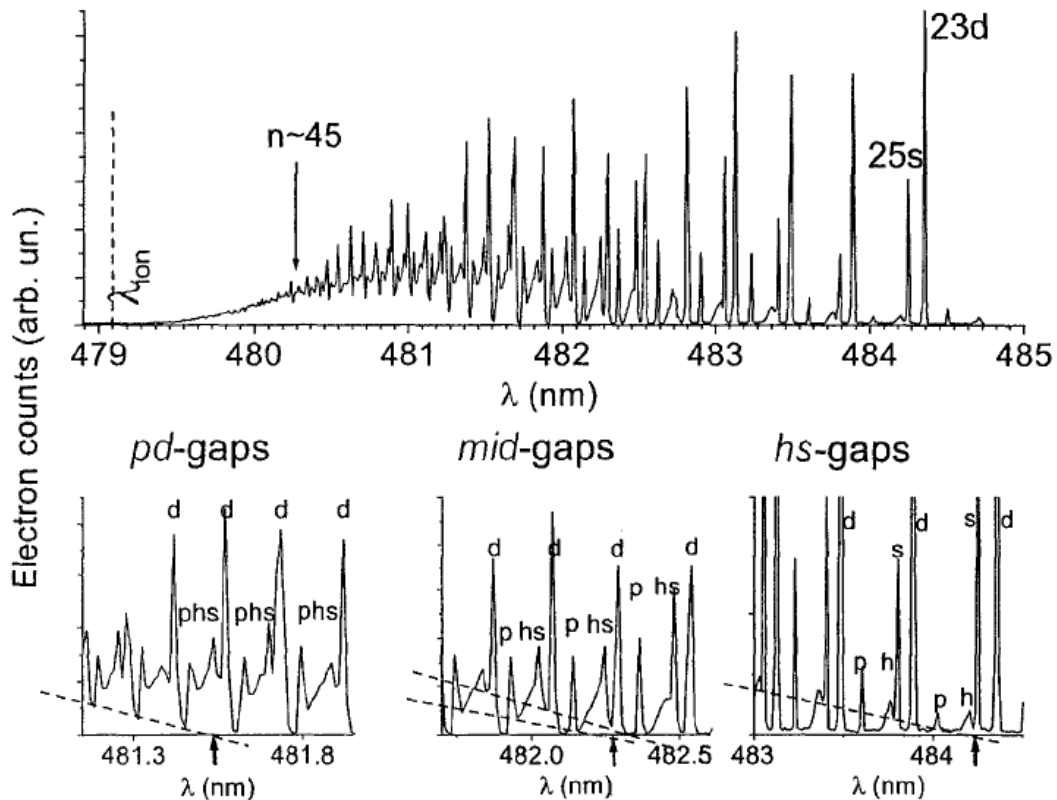


Рисунок 1.3 - Експериментальний спектр рубідію в рідбергівських станах, розташованого в холодній плазмі (із роботи [93])

Переважає більшість існуючих робіт по опису РА в полі теплового випромінювання (див. [71-56,76-93]) базується на так званому кулонівському водне-подібному наближенні, різних версіях методу квантового дефекту, класичних та квазікласичних модельних підходах, методах модельного та псевдопотенціалу. Причина такого становища пояснюється досить очевидно, оскільки фактично у всіх перелічених роботах об'єктами дослідження були РА лужних елементів. Lehman, Kleppner D та співр. [41-45] застосували водне-подібне на-

ближення, метод квантового дефекту у простіших нерелятивістських версіях, метод модельного потенціалу типу Simons-Fues для обчислення радіаційних та спектральних характеристик РА лужних елементів. Глуховим та Овсянниковим також був використаний метод модельного потенціалу [56-59].

Слід особливо відзначити окремо цикли теоретичних та експериментальних робіт Рябцева-Бетерова та співр, а також теоретичних робіт Гореславського та ін., Дьячкова-Панкратова та ін. [48-60], в яких фактично розвиваються удосконалені версії квазікласичного підходу до обчислення радіаційних амплітуд, сил осциляторів, перерізів іонізації РА в полі теплового випромінювання. В роботах Рябцева, Бетерова та інш. [50-55] представлені результати розрахунків швидкості фотоіонізації високо збуджених (рідбергівських) атомів літію, натрію, калію, цезію і рубідію фоновим тепловим випромінюванням. Обчислення проведені для nS , nP і nD станів в діапазоні головних квантових чисел $n = 8-65$ для температур рівноважного теплового випромінювання $T=77, 300$ і 600 К. У квазікласичному наближенні отримані прості аналітичні формули для оцінки швидкості іонізації РА атомів тепловим випромінюванням. Перелічені вище теоретичні роботи та відповідні моделі суттєво базувались на нерелятивістському наближенні. Природньо, відповідне релятивістське узагальнення уявляється скоріше технічною процедурою, ніж принципово важким кроком, тем не менш, переважна частина робіт з опису іонізації РА виконана в нерелятивістському наближенні.

Як виключення з цього, слід вказати також вказати роботи [36,37], в яких розвивалося які узагальнене наближення квантового дефекту і ab initio метод модельного потенціалу для РА, багатозарядних іонів і автори провели розрахунки енергій, сил осциляторів переходів в спектрах $Li-(Z=13-70)$, $Na-(SVI, C1VII)-$, $Be-(Z=26-36)$ подібних іонів у вільному стані і плазмі з $N_e=10^{22}-10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T=0.5-2 \text{ keV}$, а також енергетичних параметрів, радіаційних амплітуд для РА Na, K, Rb, Cs , швидкостей їх іонізації із станів в полі теплового випромінювання. Терновський та інші [136-138] на основі методу модельного потенціалу в межах релятивістського енергетичного підходу розвинули новий реля-

тивістський підхід до опису характеристик важких рідбергівських атомів у вільному стані і у зовнішньому електромагнітному полі (DC, AC ефект Штарка), а також новий метод моделювання хаотичної динаміки їх іонізації в мікрохвильовому полі, та отримав декотрі нові дані по енергіям рівнів, радіаційним ширинам, часам життя станів, енергіям, ширинам штарківських резонансів для рідбергівських Rb, Cs, Fr ($n < 80$), а також ряду станів Li-подібних іонів. Обидва підходи [36,37,136-138], також багаточисельні теоретичні розробки (див. [121-126, 143-146,148,150,181-184] та джерела в них) суттєво базуються на відомому в теоретичній атомній фізиці калібрувально-інваріантному релятивістському енергетичному формалізмі Глушкова-Іванова [12-15,1,3,4,20-22], що є удосконаленою версією звичайного енергетичного підходу, який був розвинутий в роботах Іванова-Іванової і співр. [9,10,16-19,25,26,173,174] для багатоелектронних атомів і Лабзовським, Дмитрієвим [157,158] для атому водню.

Окремо, у дослідженні спектроскопічних властивостей атомів, причому не тільки РА, стоять цикли робіт Сафронової У., Сафронової М., та інших, (дивись напр., [96-108] та інші), в яких теоретично вивчалися властивості різноманітних як лужних, так й значно більш складних багатоелектронних атомів, з точки зору впливу теплового випромінювання на енергетичні, спектральні, радіаційні характеристики вказаних атомних систем. Головним стимулом до проведення відповідних прецизійних обчислень було коло проблем, пов'язаних із атомними годинниками, атомними та оптичними стандартами частоти, а також побудовою нових квантових стандартів для вимірювання фундаментальних констант, у т.ч., з'ясування можливого дрейфу або варіацій значення сталої тонкої структури, тестування фізичних постулатів тощо. Для багаточисленних розрахунків авторами було розроблено формалізм багаточастинкової релятивістської теорії збурень (TZ=PT) з Дірак-Фоківським (DF) нульовим наближенням $PTDF^{SD}$, в якому виконано акуратне врахування одно-і двічі збуджених додаткових конфігурації (фактично, тут мова йде про багатоконфігураційне наближення).

На рис.1.4 наведена коротка свідка об'єктів та енергетичних та спектрос-

копічних властивостей багатоелектронних атомів (як правило не в рідбергівських станах), які досліджувались за допомогою методу ТЗДФ^{SD} і, взагалі кажучи, є дуже важливими для розв'язання вище перелічених проблем, зокрема, пов'язаних із атомними годинниками, атомними та оптичними стандартами частоти, з'ясування можливого дрейфу або варіацій значення сталої тонкої структури, тестування фундаментальних фізичних постулатів і т.ін.

Monovalent systems: very brief summary of what we calculated with all-order method

Properties

<http://www.physics.udel.edu/~msafrono>

- Energies
- Transition matrix elements (E1, E2, E3, M1)
- Static and dynamic polarizabilities & applications
 - Dipole (scalar and tensor)
 - Quadrupole, Octupole
 - Light shifts
 - Black-body radiation shifts
 - Magic wavelengths
- Hyperfine constants
- C_3 and C_6 coefficients
- Parity-nonconserving amplitudes (derived weak charge and anapole moment)
- EDM enhancement factors
- Isotope shifts (field shift and one-body part of specific mass shift)
- Atomic quadrupole moments
- Nuclear magnetic moment (Fr), from hyperfine data

Systems

Li, Na, Mg II, Al III,
Si IV, P V, S VI, K,
Ca II, In, In-like ions,
Ga, Ga-like ions, Rb,
Cs, Ba II, Tl, Fr, Th IV,
U V, other Fr-like ions,
Ra II

Рисунок 1.4 Лист атомних систем, енергетичних та спектроскопічних властивостей багатоелектронних атомів (як правило не в рідбергівських станах), обчислених методом ТЗДФ^{SD} Safronova U.I., Safronova M.S. та ін. (докладніше див. сайт: <http://www.physics.udel.edu/~msafrono>; [96-108])

1.3 Критичний огляд методів теоретичного опису атомів та іонів, у тому числі рідбергівських атомів, та заключні зауваження

Слід спочатку нагадати, що сучасна атомна оптика та спектроскопія у своєму теоретичному та обчислювальному арсеналі має достатньо значну кіль-

кість різноманітних в той чи іншій мірі прецизійних методів розрахунку основного набору енергетичних та спектральних параметрів атомів, іонів, й зокрема, частково рідбергівських атомів. В літературі є достатня кількість оглядів, монографій, статей тощо, в яких перелічуються існуючі теоретичні методи (див. [1-184]). Як правило окремо виділяються емпіричні, полуемпіричні та неемпіричні методи. Серед простих підходів варто нагадати такі методи як багаточисельні квазікласичні та класичні моделі, кулонівське наближення (QA), метод квантового дефекту (QDM) в нерелятивістській та релятивістській формуваннях, різні версії методу модельного потенціалу, псевдопотенціалу тощо. До числа більш послідовних та широко використовуваних відносяться різні версії методу самоузгодженого поля, чи то методи Хартрі-Фока (ХФ=HF), релятивістський ХФ (RHF), Дірака-Фока (DF) в одно-та багато-конфігураційному наближеннях, а також дуже цікавий метод мега-DF, метод функціоналу густини, R-матричний підхід, далі дуже популярний в останні роки серед дослідників так званий метод Coupled Cluster (CC), відповідні багаточисленні нерелятивістські, релятивістські, QED версії формалізму ТЗ з нульовими DF, RHF, HF, модельним псевдопотенціальним тощо наближеннями та інші. Слід зазначити, що більшість у вказаних методів реалізована у вигляді відомих атомних комп'ютерних кодів (комплексів), зокрема, "Dirac", "Coan Code", "Grasp", "FAC", "Bertha", "Superstructure", "Superatom" та інші (див., докладніше, [185-192]).

В той же час, хоча за допомогою перелічених підходів на протязі останніх декілька десятків років було отримано багато корисної інформації щодо властивостей багатьох легких та середніх атомів та іонів, тем не менш, на жаль, при конкретному застосуванні до обчислення характеристик рідбергівських атомів більшість з перелічених методів, як це не дивно, не здатні забезпечити спектроскопічну точність опису властивостей складних багатоелектронних атомів, у тому числі й РА з максимально повним урахуванням всього набору складних обмінно-кореляційних ефектів, а також додатково одночасно релятивістських, радіаційних та ядерних (у випадку важких систем).

Перелічені вище стандартні методи самоузгодженого поля та їх узагаль-

нення у вигляді методів ТЗ зіштовхуються із класичними як принциповими, так й обчислювальними складнощами. У багатьох оглядах та монографіях з атомної теоретичної фізики та атомної спектроскопії у той чи іншій мірі шукані проблеми обговорюються, тому, на погляд, можна коротко виділити наступні [1-4,9-15,138,148]. По-перше, у багатьох випадків мова йде про недостатньо оптимізовані для цілей розв'язуємих задач так звані затравочні гамільтоніани задачі, досить повільну збіжність відповідних рядів ТЗ. Значні погрішності виникають в атомних обчисленнях внаслідок не достатньо коректного, повного та ефективно урахування основних обмінно-кореляційних ефектів (вічна проблема квантової хімії), що включають багаточастинкові кореляційні ефекти, тиск континууму тощо. Ці проблеми набувають значних додаткових труднощів у випадку моделювання атомів у зовнішніх полях, особливо високої інтенсивності. Ключовою проблемою багатьох сучасних методів є використання так званих оптимізованих базисів електронних хвильових функцій, виконання принципу калібровочної інваріантності при обчисленнях радіаційних амплітуд. Як вказано в [1], різниця в значеннях сил осциляторів, радіаційних амплітуд та інших аналогічних характеристик може досягати сотні процентів, особливо у випадку використання різних виразів для фотонного пропатора.

У випадку складних багатоелектронних атомів дуже важливою є проблема адекватного вибору нульового затравочного гамільтоніану та відповідно самоузгодженого потенціалу середнього поля, при цьому у випадку складних атомів із багато електронним атомним остовом навіть для рідбергівських станів принципово важливим є урахування так званого ефекту некулонівського групування рівнів [173,138]. Особливо ці проблеми проявляються при обчисленні ймовірностей радіаційних, автоіонізаційних та інших переходів, характеристик багатофотонних резонансів тощо. Для рідбергівських атомних систем ці проблеми пояснюють, чому так звані або кулонівське наближення, або метод квантового дефекту не дозволяють коректно описати асимптотичні залежності радіаційних амплітуд від квантових чисел рідбергівського електрону. Відомі роботи, в яких дається докладне пояснення цього ефекту, це, напр., роботи Аумар et

al, Ivanov et al та інші (див., напр., [1,37, 172-174, 136-138]).

Фактично проблема зводиться до того, що при обчисленні радіаційних амплітуд (сил осциляторів, перерізів збудження та іонізації тощо) має місце компенсація відповідних інтегралів внаслідок осциляцій електронних орбіталей, що значно погіршує точність та змінює величини відповідних матричних елементів. Тут же слід нагадати про відчутність взаємного розташуванням вузлів електронних орбіталей до типу атомної моделі, зокрема, напр., виду використовуемого в теорії відповідного самоузгодженого потенціалу середнього поля (напр.. можна казати про потенціал взаємодії “зовнішня квазічастинка-атомний остов” у випадку багаточастинкових атомних систем (див. докладніше [1-4]). Дуже критичне значення має адекватне сумування та максимальне урахування проміжних станів при обчисленні обмінно-кореляційних поправок другого та вище порядків ТЗ, поляризуємостей атомів та інших аналогічних величин. Авжеж у сучасній атомній теорії розроблені методи обчислення відповідних безкінечних сум типу (1.20), у тому числі, різні версії методу функцій Гріну, метод диференціальних рівнянь Іванова-Іванової та інші, тем не менш, часто їх використання потребує значних обчислювальних ресурсів [1-22]. У всякому випадку розв’язання цієї проблеми потребує ретельного розгляду у тій чи іншій задачі.

Також до недоліків перелічених вище методів та моделей обчислення багатоелектронних атомів, у тому числі РА в полі теплового випромінювання, авжеж навіть з урахуванням величезної теоретичної та практичної значущості результатів, отриманих у багатьох вище перелічених роботах, на наш погляд, треба віднести те, що, по-перше, основна увага приділена лише РА лужних елементів, причому природньо досліджена невелика частина цікавих для додатків та застосувань енергетичних станів, спектральних властивостей вказаних РА, по-друге, на наш погляд, значної уваги потребують дослідження багатоелектронних РА, у тому числі важких та супер важких атомних систем. Залишаються актуальними і перелічені вище проблеми та недоліки стандартних методів атомної спектроскопії при застосуванні до розрахунку властивостей РА у

полі теплового випромінювання.

Таким чином, можна констатувати, що у всякому випадку на сьогодні існує гостра необхідність розвитку нових або суттєво удосконалених існуючих методів обчислення характеристик РА, у т.ч., їх збудження та іонізації в електромагнітному, зокрема, ВВР полі, насамперед на основі послідовних релятивістських або КЕД підходів для забезпечення адекватної сучасному рівню спектроскопії точності. Крім того, дуже бажаним уявляється подальше отримання максимально достовірної інформації про енергетичні та спектральні характеристик не тільки легких, відносно простих атомів типу лужних, не тільки для низько розташованих, але й високо розташованих, автоіонізаційних станів, для більшого набору характеристик складних, багатоелектронних РА, про більшість з яких у сучасній атомній спектроскопії на сьогодні немає достовірної інформації.

РОЗДІЛ 2

НОВА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ТЕОРІЯ ЗБУДЖЕННЯ ТА ІОНІЗАЦІЇ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ПОЛІ ВВР ВИПРОМІНЮВАННЯ: КАЛІБРОВОЧНО-ІНВАРІАНТНА ВЕРСІЯ МЕТОДУ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ

2.1 Вступні зауваження

В даному підрозділі ми викладемо новий підхід до обчислення енергетичних та спектральних характеристик (у т.ч. осциляторів, радіаційних ширин, швидкостей збудження і іонізації) РА тепловим ВВР випромінюванням, який базуються на узагальненому релятивістському енергетичному підході з використанням S-матричного формалізм Gell-Mann та Low, вперше у послідовній і повній формі застосуємо його для розв'язання класу задач по обчисленню імовірностей, редукованих матричних елементів радіаційних E1 переходів, швидкостей збудження та іонізації РА в ВВР полі [198-206]. Крім того, формується нова так звана «гібридна» калібровочно-інваріантна версія релятивістської ТЗ Dirac-Breit-Kohn-Sham з ефективним акуратним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів як ефектів другого та вище порядків ТЗ плюс поправки на тиск континууму.

Важливо підкреслити цілу низку елементів, які відрізняють розробляємий в даній роботі підхід стосовно класу задач збудження та іонізації РА в полі теплового випромінювання від існуючих на сьогодні альтернативних методів, саме в теорії РА в ВВР полі, переважна більшість яких, по-перше, фактично базується на стандартному амплітудному квантово-механічному формалізмі, плюс, по-друге, які, як правило, побудовані у нерелятивістському наближенні [41-60]. Наш підхід є послідовно релятивістським і фактично базується на калібруваль-но-інваріантній версії енергетичного формалізму Glushkov-Ivanov [12-15,1,3,4] (S-матричний формалізм Gell-Mann та Low [156] з КЕД матрицею розсіяння),

який, до речі сходить в теорії релятивістського атома від робіт Лабзовського Л.Н., Іванова Л.Н., Іванової О.П. та інших [18-20,157,158]. Слід зазначити, що формалізм [12-15,1,3,4] отримав широке розповсюдження як в роботах вітчизняних, так й зарубіжних дослідників, зокрема, с успіхом адаптований до розв'язання різноманітних класів задач оптики та спектроскопії важких атомів, багатозарядних іонів у вільному стані, автоіонізаційної спектроскопії, спектроскопії атомів в інтенсивному полі лазерного випромінювання тощо. Наступний момент є в тому, що ми вперше сформулюємо в теорії РА в полі теплового випромінювання необхідний апарат релятивістської ТЗ на основі гамільтоніану Dirac-Breit-Kohn-Sham. На відміну від відомих версій формалізму релятивістської ТЗ Dirac-Breit [16-20,125,126,138,148] в роботі вперше розвинута нова гібридна схема урахування як одно-так й багато-квазічастинкових обмінно-кореляційних ефектів (які включають ефекти взаємного екранування квазічастинок, тобто віртуальні збудження зовнішніх квазічастинок, обмінно-поляризаційне квазічастинок через поляризуємий багато електронний остов, а також їх взаємодія з остовом через фотонний вакуум, ітераційні поправки до масового оператора квазічастинок, тиск континууму та інші), зокрема, поляризаційні ефекти враховуються як у гамільтоніану задачі, так й у відповідних амплітудах радіаційних переходів шляхом введення неемпіричного багато-частинкового поляризаційного функціоналу (взято оригінальну форму функціоналу Глушкова [18b), в той час як екранувальні обмінно-кореляційні ефекти враховувались шляхом розширення базису релятивістських діраківських орбіталей, урахування станів континууму виконано у межах узагальненої ефективної процедури Dirac-Sturm [37,125,126].

Відповідно, у світлі сказаного вперше в теорії РА в полі теплового випромінювання, стартуючи з гамільтоніану Дірака-Брейта-Кона-Шема, ми розвиваємо фактично нову процедуру обчислення відповідних характеристик збудження та іонізації РА, радіаційних амплітуд саме на основі релятивістського калібровочно-інваріантного енергетичного формалізму Glushkov-Ivanov [12-15,1,3,4]. Важливо також нагадати, що останній суттєво удосконалює початкову

форму енергетичного підходу Іванова-Іванової та співр. [17-22], для складних багато електронних атомів, і має суттєві переваги над стандартним амплітудним формалізмом квантової механіки (який базується фактично на золотом правилу Фермі). Тут слід апіорі відзначити й єдинообразність обчислення спектрів та спектральних характеристик РА, зокрема, дійсної частини комплексної електронної енергії атому (тобто спектри енергетичних рівнів), так й уявної частини (яка відповідає радіаційним амплітудам, ширинам тощо), автоматичне розв'язання відомої в квантовій механіці атомів проблеми узгодження фаз та інші.

Додомо також, що в новому підході більш досконало (на відміну від всіх існуючих на сьогодні моделей та теорій іонізації РА в поле теплового випромінювання), точніше фактично вперше розв'язуються проблеми ефективного та коректного виконання принципу калібровочної інваріантності, що означає й відповідне акуратне та ефективне урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч. станів континууму в межах процедури Дірака-Штурма-Кона-Шема, конструювання базисів оптимізованих релятивістських орбіталей. Фактично це складає основу ефективної методики обчислення характеристик РА, які містять у своїх визначеннях суми другого порядку ТЗ із підсумовуванням по безкінечному набору проміжних станів, наприклад, поляризованості тощо.

2.2 Релятивістський енергетичний підхід в теорії збудження та іонізації рідбергівських атомів в полі теплового випромінювання: концептуальні положення

Важливий стартовий момент полягає у тому, що в теорії релятивістського атома на відміну від нерелятивістського випадку відома польова процедура розрахунку енергетичних зсувів ΔE , пов'язана із діагоналізацією секулярної матриці, з використанням адіабатичної формули Gell-Mann та Low [156] передба-

чає обчислення матричних елементів секулярного оператора для збуджених станів, які є комплексними вже у другому порядку ТЗ (відповідно, перший порядок ТЗ для ΔE). Повна енергія системи в теорії релятивістського атому має стандартний вигляд, а саме [1,15,20]:

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

$$\text{Im} \Delta E = -\Gamma/2, \quad (2.3)$$

де Γ звичайно інтерпретується як ширина атомного рівня, при цьому ймовірність розпаду (переходу) $\Gamma=W$ і в межах формалізму ТЗ представляється у вигляді суми по віртуальним станам, окремі члени якої відповідають внескам різних каналів розпаду в ширину рівня.

Викладаємий концептуальний підхід дозволив раніше у єдино образному представленні дуже ефективно розв'язати самі різноманітні класи задач, зокрема, в квантовій оптиці, атомній спектроскопії, теорії радіаційних переходів вільних атомів, автоіонізаційній спектроскопії, мезоатомній фізиці, теорії ядра і в багатьох інших галузях [1-26,125-126,136-138,148-153]. У випадку взаємодії релятивістського атому з лазерним випромінюванням формалізм Gell-Mann & Low дозволив побудувати теорію визначення енергетичного зсуву ΔE атомного рівня через електродинамічну матрицю розсіювання, яка включає взаємодію РА з полем фотонного вакууму (спонтанні радіаційні переходи, або природня радіаційна ширина; ΔE^{sp}), так й полем лазерного випромінювання (ΔE) [1,15,20]. Стосовно нашого класу задач, таким образом, мова піде про визначення енергетичного зсуву ΔE^{BBR} атомного рівня при наявності, крім спонтанного каналу радіаційного розпаду, також і каналу розпаду внаслідок дії BBR випромінювання, з цією різницею, що, очевидно, з'явиться температурний множник:

$$\Delta E^{BBR}(T) = E^{BBR}(T) - i \frac{\Gamma^{BBR}(T)}{2}. \quad (2.4)$$

Далі стандартна техніка використання адіабатичної формули Гелл-Мана і Лоу з електродинамічною матрицею S [1,15,20]:

$$\Delta E_i = \lim_{\gamma \rightarrow 0} i\gamma g \ln \langle \Psi_i | S_\gamma(0, -\infty | g) | \Psi_i \rangle |_{g=1} \quad (2.5)$$

$$S_\alpha(0, -\infty) = \sum_n \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n v(t_1) \dots v(t_n) e^{\gamma(t_1 + \dots + t_n)} (-1)^n, \quad (2.5a)$$

$$V(t) = \exp(iH_0 t) V_P \exp(-iH_0 t) \quad (2.5b)$$

де γ - адіабатичний параметр,

g - константа зв'язку,

H_0 - незбурений гамільтоніан системи,

далі фактично призводить до побудови відповідного ряду ТЗ для зсуву енергії із звичайною фейнманівською діаграматизацією (для нас важливі лише діаграми, внесок яких в радіаційну ширину атомного рівня є ненульовим). Докладне та ретельне обґрунтування всіх аспектів процедури такої побудови викладено, напр., в [1,3,4,12-20,125,126]. При цьому уявна частина енергетичного зсуву ΔE^{BBR} безпосередньо пов'язується із імовірністю розпаду атомного рівня в полі теплового випромінювання, авжеж з урахуванням (1.16). Розглядаємо далі для визначеності одноквазічастинковий атом (тобто багато електронний атом з одним валентним електроном над остовом заповнених оболонок, при чому останній створює деякий потенціал, скажемо V_{core} ; узагальнення на випадок багаточастинкових атомних систем є лише технічним моментом, хоча очевидно викладки суттєво ускладнюються. Якщо у нульовому наближенні багато електронна підсистема релятивістського атому розглядається як система невзаємодіючих діраківських електронів, то включення кулонівської взаємодії між електронами індукує спонтанний зсув. Опускаючи технічні деталі, неважко зрозуміти, що загальний вигляд оператора збурення ТЗ в КЕД теорії для атомної системи є:

$$- V_{core}(r) - J_\mu(x) A^\mu(x), \quad (2.6)$$

де A - вектор- потенціал електромагнітного поля, J -оператор струму. Подальша процедура передбачає конкретні обчислення ненульових внесків в уявну частину енергетичного зсуву для декотрого рівня α з урахуванням (2.5), тобто [1]:

$$\Delta E_{\alpha}(\omega_0) = i \lim_{\gamma \rightarrow 0} \gamma \{2S_{\gamma}^{(2)} + 4S_{\gamma}^{(4)} - 2S_{\gamma}^{(2)} S_{\gamma}^{(2)}\} \quad (2.7)$$

з відповідним усередненням фотонних операторів по стану фотонного вакууму і т.ін.

В загальному випадку можна визначити фотонний пропагатор у вигляді сума членів з поперечною (T) і поздовжньою (L) частинами як [1]:

$$D = D_T + C \cdot D_L = \frac{\delta_{\mu\nu}}{k_0^2 - k^2} + C \frac{k_{\mu}k_{\nu}}{k_0^2 - k^2} \quad (2.8a)$$

де C –калібровочна стала.

Природно, вид фотонного пропагатору задається відповідною калібровкою. Корисно нагадати вираз для фотонного пропагатору, скажемо, в калібровці Кулона:

$$D_{\mu\nu} = -\frac{1}{8\pi^2} \delta_{\mu\nu} \frac{1}{r_{12}} \int d\omega \exp(-i\omega\alpha_2 + i|\omega|r_{12}) \quad (2.8b)$$

В нашій роботі далі використовуються калібровки Кулона, Фейнмана, Бабушкіна). Конкретні вирази для відповідних внесків в уявну частину енергетичного зсуву природно залежать від порядку ТЗ, розглядаємих фейнманівських діаграм тощо. Нагадаємо, що в нашому випадку, як й у випадку вільного атому, єдиною діаграмою другого порядку ТЗ, внесок якої в уявну частину є ненульовим, є діаграма виду: $V = \text{---} \overbrace{\text{---}}^{\text{---}}$. Згідно із стандартною технікою (див. деталі в [12-15,20]) пунктирній лінії в діаграмі V відповідає "оператор" електрон-електронної взаємодії:

$$\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r} \exp(i|\omega|r_{12})(1 - \alpha_1\alpha_2) \quad (2.9)$$

Як показано в [15,20] і це природно вірно й в нашому випадку у другому порядку ТЗ внесок в $\text{Im}\Delta E$, відповідний діаграмі В:

$$\text{Im}\Delta E_i(B) = \sum \text{Im}\Delta E(i-j|B), \quad (2.10a)$$

$$\rightarrow -\frac{1}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_i^+(r_1) \psi_j^+(r_2) D_T(r_1 r_2) \psi_i(r_2) \psi_j(r_1) \quad (2.10b)$$

або після декотрих викладок:

$$\text{Im}\Delta E = -\frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{\substack{i>j>f \\ \{i<j\leq f\}}} V_{ij}^{|\omega_{ij}|} \quad (2.11a)$$

$$W_{ij} \sim V_{ij}^{|\omega_{ij}|} = \langle ij | \sin(i|\omega|r_{ij})(1 - \alpha_i \alpha_j) / r_{ij} | ji \rangle, \quad (2.11b)$$

Тут ω_{ij} – частота радіаційного електронного переходу ,

Ψ_i - діраківський біспіно́р електрону.

α_i – матриці Дірака.

Окремі члени суми по n в (2.11) являють собою внески різних каналів, зокрема, ймовірність, скажемо, дипольного переходу дорівнює [1,15,20]:

$$W_{ij} = \frac{1}{4\pi} \cdot V_{ij}^{|\omega_{ij}|} n_{\omega} \quad (2.12)$$

Аналогічно (дивись докладніше [1,15]) проводиться розгляд внесків діаграм четвертого порядку КЕД ТЗ (ненульовий внесок в радіаційну ширину дають обмінно-кореляційні діаграми , наведені на рис.2.1).

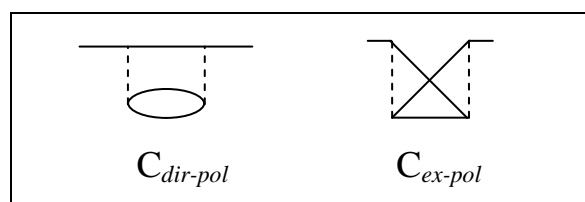


Рисунок 2.1 Діаграми четвертого порядку КЕД ТЗ, які дають ненульовий внесок в радіаційну ширину

Як показано в [15] (див. також [1,3]) це природно вірно й в нашому випадку у четвертому порядку ТЗ внесок в $\text{Im}\Delta E$, відповідний діаграмам С є:

$$\begin{aligned} \text{Im} \Delta E_{pol-C}(i-j|C_d) = & -\frac{C}{4\pi} \iiint \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \sum \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{ij}} + \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{ij}} \right) \cdot \\ & \cdot \Psi_i^+(r_1) \Psi_m^+(r_2) \Psi_j^+(r_3) \Psi_n^+(r_4) (1 - \alpha_1 \alpha_2) / r_{12} \cdot \{ [(\alpha_3 \alpha_4 - (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34})) / r_{34} \cdot \\ \sin[\omega_m(r_{12} + r_{34}) + \omega_m \cdot \cos[\omega_m(r_{12} + r_{34})] \cdot (1 + (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34}))]] \} & \Psi_m(r_3) \Psi_i(r_4) \Psi_n(r_2) \Psi_j(r_1) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Нагадаємо, згідно із [15], що внесок (2.13) формально відображає роль складних багаточастинкових колективних, кореляційних ефектів, й насправді, може залежати від калібровки фотонного пропагатора, якщо діраківські біспінори для електронів атомної системи визначені не абсолютно точно (що звичайно й має місце практично завжди). До речі, саме, цей фундаментальний факт пояснює відому принципову проблему всієї сучасної теоретичної атомної спектроскопії, пов'язану із неспівпадінням значень сил осциляторів, обчислених в амплітудному підході на основі відомих формул «довжини» (калібровка фотонного пропагатора Кулона) та «швидкості» (калібровка Фейнмана).

В роботах [12-15] запропонований потужний фундаментальний принцип побудови оптимізованого одноквазічастинкового представлення в теорії релятивістського багатоелектронного атома (перевірки виконання принципу калібровочної інваріантності, принаймні при обчисленні радіаційних ширин) і урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. Коротко основна концепція полягає у тому, що для оптимізації релятивістських електронних біспінорів використаний фундаментальний принцип мінімізації енергетичного функціонала (2.13), що представляє внесок кореляційних діаграм 4 порядку ТЗ, фактично, тобто внесок діаграм, пов'язаний з обміном поздовжніми фотонами в уявну частину енергії системи. Вклади залежать від калібровки потенціалів електромагнітного поля, й називаються калібровочно-неінваріантними.

ми. Тоді електронний базис буде оптимізованим, якщо вже в 2-му наближенні мінімізувати калібровочно- неінваріантні внесок типу (2.13).

У подальшому ця процедура буде адаптована повністю імплементована й в наш підхід до визначення ймовірностей збудження та іонізації РА тощо, в тому числі, в полі теплового випромінювання, причому вперше для розв'язуємого класу задач в межах нової версії релятивістської багаточастинкової теорії збурень типу Дірака-Брейта-Кона-Шема. Розглянемо далі ключові аспекти цієї теорії.

2.3 Нова версія релятивістської багаточастинкової теорії збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема в калібрувальньо-інваріантному формулюванні в теорії рідбергівських атомів

2.3.1 Основні рецепти побудови формалізму ТЗ, вступні припущення, гамільтоніан нульового наближення

Слідуючи рецептам [1], для розвитку основ нового методу обчислення РА в полі теплового випромінювання ми побудуємо апарат аб ібітію релятивістської ТЗ, причому вже в нульовому наближенні будемо намагатися врахувати основну частину релятивістських та обмінно-кореляційних (принаймні одночастинкових ефектів). Загальний рецепт, як вказувалося вище, полягає у використанні адіабатичної формули Гелл-Мана та Лоу з електродинамічної матрицею для послідовного релятивістського розрахунку енергетичного зсуву [1,15-20]. Далі природно слід конкретизувати гамільтоніан атомної системи в нашій теорії, а саме: гамільтоніан Дірака-Брейта-Кона-Шема (DBKS). При цьому на відміну від альтернативних аналогічних версій ми будемо оптимізувати базис релятивістських DBKS орбіталей.

Загальне визначення гамільтоніану Дірака-Брейта (в атомних одиницях) є таким:

$$H^{DB} = \sum_i \{-i\alpha c \nabla_i - \beta m c^2 + V_{eN}(Z | r_i)\} + \sum_{i>j} V_{ee}^{rel}(r_{ij}), \quad (2.14)$$

де α_i, β – матриці Дірака,

Z - заряд ядра,

c - швидкість світла,

m – маса електрону ($m=1$ в атомних од.),

$V_{eN}(Z | r_i)$ - потенціал електрон-ядерної взаємодії (формально: $-Z^2/r_i$).

На кінець, в (2.14) $V_{ee}^{rel}(r_{ij})$ - релятивістський потенціал між електронної взаємодії, який фактично враховує як брейтівську, тобто, магнітну взаємодію, так й ефекту запізнення, і має стандартний вигляд [18]:

$$V_{ee}^{rel}(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}} \quad (2.15)$$

де ω_{ij} – частота переходу. До речі, використання (2.15) є також елементом новизни для сучасних теорій РА ВБР полі.

Відзначимо, що у зв'язку з тим, що наш новий підхід фактично адаптується до комп'ютерного атомного коду “Superstom-ISAN”[191-195], в якому точковий потенціал електрон-ядерної взаємодії:

$$V_{eN}(r) = -Ze^2/r, \quad (2.16a)$$

насправді замінений на потенціал взаємодії електрону із ядром скінченного розміру, що має декотрий (напр., модель Гауса або Фермі [1]) розподіл заряду у просторі (тобто враховується важливий для важких та супер важких атомів ефект скінченного розміру ядра), а саме:

$$V_{eN}^{FS}(r, R) = -((1/r) \int_0^r d\tilde{r} \tilde{r}^2 \rho_{nuc}(\tilde{r}, R) + \int_r^\infty d\tilde{r} \tilde{r} \rho_{nuc}(\tilde{r}, R)) \quad (2.16b)$$

(тут R – радіус ядра важкого атому, а ядерна густина може бути визначена, напр., в моделі Гауса), наша теорія може в принципі застосовуватися для вивчен-

ня властивостей й супер важких атомів. З іншого боку, хоча ми ввели в нашу теорію послідовний потенціал (2.16б), зрозуміло, що для вивчаємих нами РА, тим паче РА у полі теплового випромінювання, урахування ефекту скінченного розміру ядра є не принциповим внаслідок достатньо малому внеску, принаймні не для важких атомів.

Далі формально розглядаємо багато-електронний РА із декількома квазі-частинками над остовом заповнених електронних оболонок. Відповідні стани з декількома квазічастинками у спектрі атому, згідно із [1,15-20], звичайно будемо розглядати як групу вироджених станів і далі формально може бути визначена відповідна секулярна матриця:

$$M = \sum_{i=0}^{Nk} M^{(i)}, \quad (2.17)$$

де Nk - число квазічастинок,

$M^{(0)}$ - внесок вакуумних діаграм (див. далі),

$M^{(1)}$ - внесок одно-квазічастинкових діаграм,

$M^{(2)}$ – дво-квазічастинкових діаграм, тощо.

Величина $M^{(1)}$ є рівною сумі енергій відокремлених QR без врахування їх взаємодії. У подальшому, згідно із [1,15-20], виникне задача діагоналізації відповідної дійсної матриці M , після чого визначається дійсна матрицю коефіцієнтів з власними векторами станів B_{iv,ie,J_i}^{IK} . В релятивістському наближенні одночасно реалізується перехід від чистої j - j схеми зв'язку моментів до представлення проміжної схеми, де квантові числа I, I' нумерують стани.

Діагональні елементи трансформаційної матриці $\langle IK | M | I'K' \rangle$ мають вигляд:

$$\langle IK | M | IK \rangle = \sum_{iv',ie'} B_{iv',ie'}^{IK'} \langle iv',ie',J_i | M | iv,ie,J_i \rangle B_{iv,ie,J_i}^{IK}, \quad (2.18)$$

Для подальшого будування ряду релятивістської ТЗ нам потрібно визна-

читися з гамільтоніаном нульового наближення, для чого використаємо рецепти [1,15,20] і напишемо шуканий гамільтоніан у формі, яка дозволить врахувати всі основні релятивістські ефекти як одно-частинкові, так й дво-частинкові з точністю до α^2 (α – стала тонкої структури), а також суттєву частину одно-та багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів у релятивістському наближенні функціоналу густини KS. Фактично останнє конкретизує визначення самоузгодженого потенціалу середнього атомного поля V_{SCF} . Таким чином, гамільтоніан нульового наближення в нашій теорії прийме такий вид:

$$H_0^{DB} = \sum_i \{ \alpha c p - \beta m c^2 + [V_{eN}(Z | r_i) + V_{SCF}(r_i)] \} \quad (2.19)$$

$$V_{SCF}(r) = [V_C(r) + V_{ex}(r) + V_{Cor}(r | b)], \quad (2.20)$$

Тут $V_C(r)$ - стандартний кулонівський потенціал взаємодії квазічастинки із електронною хмарою,

V_{ex} – одно-частинковий обмінний потенціал (див. далі),

V_{Cor} – одно-частинковий кореляційний потенціал (див. далі),

b – декотрий оптимізаційний параметр, що буде визначений далі згідно із процедурою Glushkov-Ivanov [15] (див. нижче).

Визначимося далі з одно-частинковими обмінним та кореляційним потенціалами. Як показали багаточисельні розрахунки звичайних атомів та іонів (див., напр., [1]) ефективним підходом для урахування цих ефектів є метод функціоналу густини. Зокрема, в теорії Kohn-Sham у наближенні локальної густини обмінний потенціал пов'язаний із обмінною енергією і є функціоналом електронної густини [31]:

$$V_{ex}[\rho(r), r] = \frac{\delta E_{ex}[\rho_e(r)]}{\delta \rho_e(r)} \quad (2.21)$$

де $E_{ex}[\rho_e(r)]$ - обмінна енергія багато електронної системи, яка відповідає од-

норідній густині $\rho_e(r)$.

Для наших цілей зручним буде використання в якості V_{ex} узагальненого обмінного потенціалу Kohn-Sham (нагадаємо, що в оригінальній роботі [31] він введений у нерелятивістській формі), який має вигляд у нерелятивістському наближенні. У випадку введення у гамільтоніан Kohn-Sham повздовжнього векторного потенціалу фотонів можна сконструювати відповідний релятивістський обмінний потенціал [1]:

$$V_{ex}[\rho_e(r_i), r_i] = -(1/\pi)[3\pi^2 \rho_e(r_i)]^{1/3} \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (2.22)$$

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

c – швидкість світла.

Для визначення одно-частинкового кореляційного потенціалу V_{Cor} , ми у подальшому розгляді будемо використовувати відомий узагальнений потенціал Gunnarsson-Lundqvist, який у прийнятій формі вперше введений в атомну спектроскопію адаптува Glushkov et al [1,18b] й який використаний у багатьох роботах із розитку альтернативних атомних методів (див., напр., [37,138,148-153]):

$$V_{cor}^{Rel}[\rho_e(r_i) | b | r_i] = -0.0333 \cdot b \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho_e(r_i)^{1/3}], \quad (2.23)$$

Введений нами у розгляд так званий калібровочний параметр b буде далі визначений на основі відомого методу Glushkov-Ivanov [15].

Далі визначимо оператор збурення ТЗ з нульовим наближенням (2.19)-(2.23). Очевидно, його вигляд буде таким:

$$V_{int}^{DB} = - \sum_i^{N_{tot}} \{V_C(r_i) + V_{ex}^{Rel}(r_i) + V_{Cor}^{Rel}(r_i | b)\} + \sum_{i>j}^{N_{tot}} V_{ee}^{Rel}(r_i r_j) \quad (2.24)$$

Зазначимо, що на відміну від робіт [37,136-138] , присвячених РА, в нашій теорії замість кулонівського потенціалу (метод квантового дефекту) та некулонівського модельного потенціалу використовується неемпіричне наближення функціоналу густини. Авжеж, як й в методі [173], ми також із самого початку враховуємо важливий ефект суттєво некулонівського групування рівнів у важких РА.

Таким чином, з урахуванням визначаємого виразами (2.19)-(2.23) нульового наближення нашої релятивістської ТЗ далі неважко записати відповідну систему релятивістських одно-квазічастинкових рівнянь Дірака для подальшого визначення одно-електронних енергій та «затравочних» релятивістських електронних бі-спінорів. Останній, який, як це прийнято у квантовій електродинаміці, визначається стандартно (див. [1]), у вигляді добутку відповідних (великої та малої) радіальних функцій та стандартного сферичного спінору $\Omega_{jlm}(r)$, де j - повний одно-електронний момент.

Систему релятивістських одно-частинкових релятивістських рівнянь Дірака для великої та малої діраківських компонент в нашій теорії можна записати у наступному вигляді:

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha Z[V_{eN}(Z|r_i) + V_{SCF}(b|r_i)]g - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g, \quad (2.25)$$

$$g' = (\chi - |\chi|)g/r - \alpha Z[V_{eN}(Z|r_i) + V_{SCF}(b|r_i)]f + \alpha ZE_{n\chi}f, \quad (2.26)$$

де $E_{n\chi}$ - одно-електронна енергія.

χ - квантове число Дірака

Відповідні граничні умови для (2.26) визначаються першими членами відомих розкладань функцій у ряд Тейлора і докладно прописані та проаналізовані, напр., в [1,3]. Чисельне розв'язання системи рівнянь (2.26) виконується на

основі стандартної процедури Рунге-Кутта 4-порядку (комп'ютерний атомний код "Superatom").

На кінець, слід розглянути дуже важливе питання щодо розрахунку нормувального множника для функції безперервного спектра. Для цього використаємо відомий прийом Іванова і співр. (див. деталі в [20]).

Справа у тому, що очевидно правильно нормовані функції континууму повинні мати такі асимптотики (з точністю до першого члена розкладання) [1]:

$$\left. \begin{matrix} F \\ G \end{matrix} \right\} \rightarrow (\pi\xi)^{-\frac{1}{2}} \begin{cases} \left(\xi + (\alpha z)^{-2}\right)^{\frac{1}{2}} \text{Sin}(kr + \sigma) \\ \left(\xi - (\alpha z)^{-2}\right)^{\frac{1}{2}} \text{Cos}(kr + \sigma) \end{cases} \quad (2.27)$$

В межах процедури Іванова і співр. (див. деталі в [20,121,122]) шуканий множник визначається як відповідна межа:

$$N = \lim_{r \rightarrow \infty} N(r)$$

$$N^2(r) = \pi\xi \left[F^2 \left[\xi + (\alpha z)^{-2} \right] + G^2 \left[\xi - (\alpha z)^{-2} \right] \right] \quad (2.28a)$$

З метою забезпечення стійкої чисельної процедури і підвищення її ефективності $N^2(r)$ осереднюється по періоду осциляцій $T = \frac{2\pi}{k}$, тобто:

$$N^2(r, T) = \frac{1}{T} \int_0^T dr N^2(r) \quad (2.29)$$

В результаті $N^2(r, T)$ скоріше збігається до стаціонарного значення, чим $N(r)$. При цьому:

$$\lim N^2(r, T) = \lim N^2(r) = N^2. \quad (2.30)$$

Обчислення величини $N^2(r, T)$ далі може бути зведено до чисельного розв'язання достатньо простого диференціального рівняння.

2.3.2 Релятивістська багато-частинкова теорія збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема в теорії рідбергівських атомів: Поправка першого порядку, радіаційна амплітуда, кулонівські і брейтівські інтеграли.

Після формального визначення нульового наближення нашої версії ТЗ і базису релятивістських хвильових функцій нульового наближення подальші обчислення поправки першого порядку та інших неважко провести на основі стандартної техніки, докладно описаної в [1,18] і реалізованої у виді відповідних блоків атомного комплексу “Supratom-ISAN”. Вся різниця полягає у тому, у тому, що в якості релятивістських електронних функцій в нашій теорії беруться розв’язки системи діраківських рівнянь (2.26), а також розвинута нова схема урахування обмінно-кореляційних ефектів та відповідна процедура оптимізації одноквазічастинкового представлення в теорії.

Нагадаємо, що відповідні матричні елементи в першому наближенні релятивістської ТЗ по оператору збурення (2.24) можуть бути представлені у добре відомому вигляді [1,20]:

$$\begin{aligned}
 M_1^{(2)} &= \langle n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 [J] | V_{\text{int}} | n_4 l_4 j_4 \quad n_3 l_3 j_3 [J] \rangle = \\
 &= P_1 P_2 (-1)^{l_1 + j_2 + j_4 + J} [(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)(2j_4 + 1)]^{1/2} \times \\
 &\quad \times \sum_{i,k} \sum_{\lambda} \begin{Bmatrix} j_i j_k J \\ j_2 j_1 \lambda \end{Bmatrix} (\delta_{i,3} \delta_{k,4} + (-1)^J \delta_{i,4} \delta_{k,3}) \cdot (Q_{\lambda}^{\text{Coul}} + Q_{\lambda}^{\text{Breit}}), \quad (2.31)
 \end{aligned}$$

де, як звичайно, $P_1, P_2 \in \{1, 1/2\}$, в залежності від співвідношення між наборами квантових чисел станів 1,2,3,4; Відповідні величини $Q_{\lambda}^{\text{Coul}}$ та $Q_{\lambda}^{\text{Breit}}$ відповідають стандартному розподілу релятивістського міжелектронного потенціалу $V_{ee}^{\text{rel}}(r_{ij})$ (2.15) на кулонівську, тобто: $\cos / \omega / r_{12} / r_{12}$ та брейтівську: $\cos / \omega / r_{12} \alpha_1 \alpha_2 / r_{12}$ частини. За визначенням величина $Q_{\lambda}^{\text{Coul}}$ виражається через комбінації стандартних слетерівського типу радіальних інтегралів R_{λ} (з велики-

ми $f_i=i$ і малими $g_i=\tilde{i}$ компонентами діраківської функції) і відповідно кутових коефіцієнтів S_λ (див. [20], де надано докладний опис відповідних матричних елементів).

Хоча формальні вирази для кулонівської та брейтівської частин добре відомі і неодноразово докладно описувалися в літературі, для подальшого розгляду варто коротко нагадати їх вигляд, напр., згідно [1,15,20],

$$Q_\lambda^{Coul} = \frac{1}{Z} \left\{ R_\lambda(r_1 r_2; r_4 r_3) S_\lambda(1243) + R_\lambda(\tilde{r}_1 \tilde{r}_2; r_4 \tilde{r}_3) S_\lambda(\tilde{1} 24 \tilde{3}) + \right. \\ \left. + R_\lambda(r_1 \tilde{r}_2; \tilde{r}_4 r_3) S_\lambda(1 \tilde{2} \tilde{4} 3) + R_\lambda(\tilde{r}_1 \tilde{r}_2; \tilde{r}_4 \tilde{r}_3) S_\lambda(\tilde{1} \tilde{2} \tilde{4} \tilde{3}) \right\} \quad (2.32a)$$

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

$$Q_\lambda^{Breit} = \frac{1}{Z} \left\{ R_\lambda(r_1 r_2; \tilde{r}_4 \tilde{r}_3) S_\lambda^l(12 \tilde{4} \tilde{3}) + R_\lambda(\tilde{r}_1 \tilde{r}_2; r_4 r_3) S_\lambda^l(\tilde{1} \tilde{2} 43) + \right. \\ \left. + R_l(\tilde{r}_1 r_2; \tilde{r}_4 r_3) S_\lambda^l(\tilde{1} 2 \tilde{4} 3) + R_l(r_1 \tilde{r}_2; r_4 \tilde{r}_3) S_\lambda^l(1 \tilde{2} 4 \tilde{3}) \right\} \quad (2.32в)$$

Кутовий множник в релятивістській комбінації (2.32a) має добре відомий вигляд (див., напр., [1]):

$$S_\lambda(1243) = \{ \lambda l_1 l_3 \} \{ \lambda l_2 l_4 \} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

де комбінація $\{ \lambda l_1 l_3 \}$ означає, що $(\lambda + l_1 + l_3)$ є парне число;

Аналогічно визначаються кутові множники в (2.34в) для брейтівської частини.

При визначенні матричних елементів амплітуд радіаційних переходів, тобто інтегралів типу (2.32), виникне необхідність обчислення уявних частин відповідних кулонівських та брейтівських інтегралів з підстановкою визначе-

них в нашій теорії релятивістських біспінорів типу Дірака-Кона-Шема

Стосовно визначення відповідних радіальних інтегралів у вище наведених формулах, які власне кажучи визначають радіаційні ширини Γ , нагадаємо слідувачи [1,20], що уявна частина оператора (2.15), тобто звичайно може бути розкладена у добре відомий ряд по функціям Бесселя першого роду,

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\widehat{\cos \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}), \quad (2.34)$$

де $(\lambda) = 2\lambda + 1$, λ - взагалі мультипольність, і відповідно для матричного елемента радіаційного переходу (2.11) записати наступне:

$$V_{1243}^{|\omega|} = \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)} \sum_{\lambda, \nu} (-1)^{\nu} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \nu & \end{pmatrix} \{Q_{\lambda}^{Coul} (n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2; n_4 l_4 j_4 n_3 l_3 j_3) + Q_{\lambda}^{Breit} (n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2; n_4 l_4 j_4 n_3 l_3 j_3)\} \quad (2.35)$$

Далі коротко опишемо вигляд радіальних інтегралів в формулах (2.32), зокрема, $R_{\lambda}(r_1 r_2; r_4 r_3)$:

$$\text{Im} R_{\lambda}(r_1 r_2; r_4 r_3) = \frac{\pi(2\lambda+1)}{2} \left(\frac{|\omega_{13}| Z \alpha}{2} \right)^{(2\lambda+1)} |\Gamma(\lambda + 3/2)|^2 T_{\lambda}(13) T_{\lambda}(24), \quad (2.36a)$$

$$T_{\lambda}(13) = \int dr r^{2\lambda+1} Z_{\lambda}^{(1)} f_{n_1 l_1 j_1} f_{n_3 l_3 j_3}, \quad (2.36b)$$

$$Z_{\lambda}^{(1)} = \left[\frac{2}{|\omega_{13}| \alpha Z} \right]^{\lambda+1/2} \frac{J_{\lambda+1/2}(\alpha |\omega_{13}| r)}{r^{\lambda} \Gamma(\lambda + 3/2)}. \quad (2.36b)$$

де Z – заряд ядра,

α - стала тонкої структури,

J - функція Бесселя,

Γ – гамма функція.

Нагадаємо, що інші радіальні інтеграли у формулі (2.32) мають аналогічний (2.36)-(2.38) вигляд, з тією різницею, що з'являються відповідно малі компоненти діраківської функції, й крім того, l_i замінюється на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\alpha_i > 0$ і $l_i + 1$ для $\alpha_i < 0$.

Варто пояснити, що в світлі сказаного й із урахуванням (2.2)-(2.4) та (2.12) ймовірність радіаційного переходу $i-j$ є сума електричної W_λ^E та магнітної W_λ^M , які в нашій теорії виражаються через матричні елементи (2.35), (2.36):

$$W_\lambda^E(ij) \sim [Q_\lambda^{Coul}(ij;ij) + Q_{\lambda,\lambda-1}^{Breit}(ij;ij) + Q_{\lambda,\lambda+1}^{Breit}(ij;ij)], \quad (2.37)$$

$$W_\lambda^M(ij) \sim Q_{\lambda,\lambda}^{Breit}(ij;ij). \quad (2.38)$$

Узагальнення приведених для формул для більш складних, ніж одно-квазічастинкові, атомних систем виконується стандартними засобами атомної спектроскопії.

Дуже корисно прояснити, що переважна більшість зарубіжних досліджень радіаційних характеристик атомів виконує розрахунки слетерівського типу інтегралів в межах амплітудного підходу методом чисельного інтегрування. В нашій теорії при обчисленні радіаційних амплітуд, зокрема, інтегралів типу (2.32) ми використали ефективний метод диференціальних рівнянь Іванова і співр. [1,15-20], який до речі запрограмований у виді відповідного окремого в атомному комплексі "Superatom-ISAN". В рамках цього методу розрахунок радіального інтегралу вида $\text{Im} R_\lambda(n_1 j_1 l_1 \ n_2 j_2 l_2; \ n_4 j_4 l_4 \ n_3 j_3 l_3)$ зводиться до розв'язання такої системи диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} y_1' = -\lambda y_1 / r + R_{n_2 j_2 l_2} R_{n_4 j_4 l_4} Z_\lambda^{(1)}(\omega r) \\ y_2' = -\lambda y_2 / r + R_{n_1 j_1 l_1} R_{n_3 j_3 l_3} Z_\lambda^{(1)}(\omega r) \\ y_3' = \frac{Z^{(2)}(\omega r)}{r} [y_1 R_{n_1 j_1 l_1} R_{n_3 j_3 l_3} + y_2 R_{n_2 j_2 l_2} R_{n_4 j_4 l_4}] \end{cases} \quad (2.39)$$

з відповідними граничними умовами. При цьому, шуканий інтеграл:

$$R_l(n_1 j_1 l_1 \quad n_2 j_2 l_2; \quad n_4 j_4 l_4 \quad n_3 j_3 l_3) = \lim_{r \rightarrow \infty} y_3. \quad (2.40)$$

Слід зазначити, що приведені вище формули для визначення поправки першого порядку ТЗ для енергії релятивістського атому мають загально признаний вигляд (мається на увазі школа Іванова-Іванової і співр.[1,15-20,121-125]), але конкретні чисельні значення відповідних радіальних інтегралів природньо залежать від використовуємих базисів релятивістських діраківських функцій, а останні в свою чергу визначаються нульовим наближенням релятивістської ТЗ, тобто в нашій теорії системою рівнянь (2.17).

Саме в цьому є основна різниця між нульовими наближеннями різноманітних версій релятивістських ТЗ, які застосовуються для опису енергетичних, спектральних, радіаційних характеристик релятивістського атома, і в яких базовим є гамільтоніан типу Дірака-Брейта. Очевидно, різноманітні базиси функцій нульового наближення в подальшому зумовлюють і різні властивості відповідних рядів ТЗ для енергії тощо. В якості важливого коментарю додамо, що досі ми реалізували побудову формалізму релятивістської ТЗ ДБКШ, орієнтуючись на одно-квазічастинкові атомні системи (тобто системи типу лужних атомів або галогенів). Слід зазначити, що узагальнення нашої теорії для РА в полі теплового випромінювання на випадок більш складних атомів, скажемо, дво- або трьох-квазічастинкових систем, не має принципових труднощів, а пов'язано лише із очевидно зростаючими технічними труднощами. Користуючись технікою щодо побудови формалізму ТЗ, викладеною у відомій монографії [1], і стартуючи з наших гамільтоніанів (див. вище) можна сформулювати відповідний формалізм калібровочно-інваріантної релятивістської ТЗ DBKS для багаточастинкових атомних систем. При цьому потрібно мати на увазі, при розрахунку енергетичної матриці в разі, скажемо, трьох-квазічастинкових станів трудомістким завданням буде, у тому числі, обчислення кутових частин матричних елементів, які виникають при інтегруванні по кутовим і підсумовуванні по спіно-

вим змінним. У цьому випадку варто користуватися досить ефективним методом, запропонованим Фано і адаптованим в задачах атомної спектроскопії, зокрема, Івановим і співр. (див., напр., [17-20]).

2.3.3 Релятивістська багато-частинкова теорія збурень Дірака-Брейта-Кона-Шема: Поправки другого та вище порядків, обмінно-кореляційні ефекти.

Послідовне урахування обмінно-кореляційних ефектів при розрахунках, в принципі, будь-яких енергетичних та спектральних характеристик багатоелектронних атомів традиційно є однією з центральних задач квантових систем, атомної спектроскопії. Добре відомо, що без їх кількісно прецизійного урахування адекватний опис шуканих характеристик не є можливим, відповідно напевно чи можна розраховувати й на побудову адекватної кількісної теорії будь-яких радіаційно-іонізаційних процесів в атомах, у тому числі в РА в полі теплового випромінювання, а також при побудові теорії обчислення VBR зсувів частоти переходу в атомних годинниках. Тому, цей аспект уявляється принципово важливим й для нашої теорії РА в VBR полі. Нижче ми приведемо нашу нову фактично гібридну схему урахування основних обмінно-кореляційних ефектів другого та вище порядків ТЗ. Оскільки проблематика опису та обчислення обмінно-кореляційних ефектів дуже добре та багаточисельно описана в сучасній літературі (див., напр., [1,2]), ми обмежимося далі спочатку якісним аналізом класів обмінно-кореляційних поправок, а потім опишемо адаптовані та удосконалені нами алгоритми урахування відповідних класів шуканих ефектів. Нагадаємо, що, як добре відомо із стандартних курсів квантової хімії, відповідні поправки вводяться як різниця між енергією атомної системи, розрахованою в одно-конфігураційному наближенні ХФ (або Дірака-Хартрі, ДФ) та точною нерелятивістською енергією (див., напр., [1,2,]). В класичних багато-конфігураційних теоріях типу ХФ (або Дірака-Хартрі, ДФ) урахування кореляційних поправок другого та вище порядків ТЗ виконується шляхом будування

відповідної багато-конфігураційної хвильової функції системи. При цьому окремо виділяються основні класи кореляційних поправок другого порядку і домінуючих поправок вищих порядків, а саме, мова йде про такі ефекти як екранування кулонівської взаємодії квазічастинок (електронів, вакансій) поляризаційна взаємодія квазічастинок, а також взаємодія квазічастинка-дірка, ітерації масового оператора квазічастинки тощо. Природньо, при розгляді обмінно-кореляційних ефектів дуже зручним є використання техніки фейнманівських діаграм.

Слід прояснити, оскільки в нашій теорії оператори (2.9), (2.10) генерують відповідний повний затравочний набір ортонормованих одно-квазічастинкових станів, відповідні кореляційні поправки обчислюються по ТЗ з оператором збурення (2.14). Неважко показати, при такому визначенні базису орбіталей, кореляційні поправки до енергії атомних рівнів першого порядку фактично є відсутніми. Насправді, це було показано ще в піонерських роботах Іванова-Толмачова, а також окремо Kelly (див., напр., [1,17-20]). Обмінні одно-частинкові поправки в певній мірі враховуються у наближенні Кона-Шема [31].

Основними поправками до енергії одно-квазічастинкового атому, таким чином, є обмінно-кореляційні поправки другого порядку [1,140], що описуються класичними фейнманівськими діаграмами, приведеними на рисунку 2.2 (аналогічно 2.1).

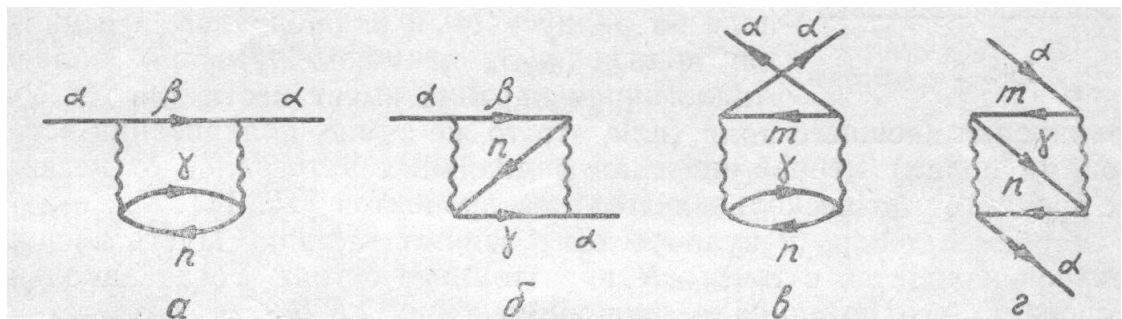


Рисунок 2.2 Обмінно-кореляційні поправки до енергії (α, β, γ — збуджені стани; n, m — стани з атомного остову)

Діаграми вищих порядків ТЗ по оператору (2.14) описують такі ефекти як екранування кулонівської взаємодії квазічастинок (електронів, вакансій) поляризаційна взаємодія квазічастинок, а також взаємодія квазічастинка-дірка, ітерації масового оператора квазічастинки [1,140]. Діаграми, що описують ефект екранування кулонівської взаємодії, наведені на рисунку 2.3.

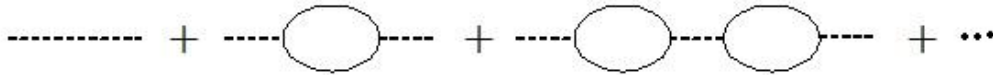


Рисунок 2.3 Клас діаграм, пов'язаний з ефектом екранування кулонівської взаємодії.

Багаточисельні атомні розрахунки показують [1,140], що принаймні у випадку лужних атомів цей клас діаграм є домінуючим, фактично зменшуючи кореляційний внесок, в той час як інші його збільшують. Діаграми класу «взаємодія квазічастинка-дірка» в поляризаційному операторі наведені на рисунку 2.4.



Рисунок 2.4 Діаграми класу «взаємодія квазічастинка-дірка» в поляризаційному операторі.

Як вказувалося у багатьох роботах (див., напр., [1,2,140,152,153]), з фізичної точки зору причина їх появи обумовлена підсумовуванням по віртуальним збудженням електронів атомного остова при обчисленні кореляційного вкладу. Тобто, на мові традиційного багато-конфігураційного розгляду це відповідає необхідності урахування віртуальних збуджень атомного остову.

Зазначимо тут же, що ефекти цього класу є кількісно дуже важливими не тільки при обчисленні енергій станів багатеелектронних атомів, але й в розрахунках відповідних ймовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перерізів збудження та іонізації. Стосовно поляризаційних поправок слід нагада-

ти, що, напр., для лужних елементів звичайно на КЕД мові говорити про поляризаційну взаємодію зовнішньої квазічастинки з віртуальним фотонним вакуумом через поляризуємий остов. Неважко зрозуміти, що ці збудження змінюють самоузгоджений потенціал атомного остова, причому, можна показати, що фактором посилення цього класу діаграм є діагональний кулонівський інтеграл нульової мультипольності. На рисунку 2.5 наведено клас діаграм, пов'язаних із ітераціями масового оператора квазічастинки.

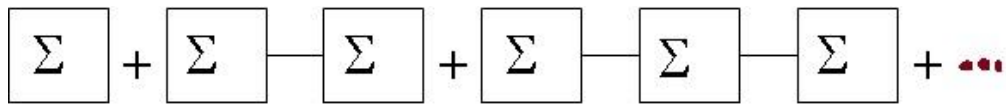


Рисунок 2.5 Клас діаграм, пов'язаних із ітераціями масового оператора квазічастинки.

У стандартному підході масовий оператор зазвичай вводиться таким чином, що середнє значення від нього є кореляційний поправка до енергії виду $\langle \psi | \hat{\Sigma} | \psi \rangle$. У діаграмах, що містять $\hat{\Sigma}$ більше одного разу, присутні проміжні стани. Докладний якісний аналіз шуканого ефекту посилення наданий в роботах Фламбаума і співр., Глушкова та співр. та інших (див., напр., [1,18,140,152]).

У стандартному розгляді ланцюжок екраніровочних діаграм утворює в фейнманівській діаграмній техніці просту геометричну прогресію, підсумовування якої зводиться до обернення матриці. Ітерації взаємодії частинка-дірка і масового оператора зводяться до вирішення відповідних рівнянь.

До прикладу, формальне визначення кореляційної поправки до енергії другого порядку визначається формулами:

$$\delta \varepsilon_a = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \int \int \int \psi^+(r_1) G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) \mathcal{V}(r_1, r_3) \Pi(\omega, r_3, r_4) \times V(r_2, r_4) \psi(r_2) dr_1, dr_2, dr_3, dr_4$$

$$\delta\varepsilon_b = \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{4\pi^2} \iiint \psi + (r_1) G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) Q(r_1, r_3) \times \\ G(\varepsilon + \omega_1 + \omega_2, r_2, r_3) V(r_2, r_4) G(\varepsilon + \omega_2, r_3, r_4) \psi(r_4) dr_1, dr_2, dr_3, dr_4 \quad (2.41)$$

де V - оператор між електронної взаємодії (2.6),

Π - поляризаційний оператор,

G - функція Гріна, яка в принципі в нашій теорії повинна визначатися розв'язками системи рівнянь (2.17); її формальне визначення [140]:

$$G(\varepsilon, r_1, r_2) = \sum_{\gamma} \frac{|\gamma \rangle \langle \gamma|}{\varepsilon - \varepsilon_{\gamma} + i\delta} + \sum_n \frac{|n \rangle \langle n|}{\varepsilon - \varepsilon_n + i\delta}, \delta \rightarrow 0, \quad (2.42)$$

Тут, як звичайно, $|n \rangle$ — заповнені стани остова;

$|\gamma \rangle$ — збуджені стани дискретного спектру та континууму.

Поляризаційний оператор формально визначається наступною інтегральною формулою:

$$\Pi(\omega, r_1, r_2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) G(\varepsilon, r_1, r_2) = i \sum_n \psi_n(r_1) [G(\varepsilon_n + \omega, r_1, r_2) + G(\varepsilon_n - \omega, r_1, r_2)] \psi_n(r_2) \quad (2.43)$$

Далі можна нагадати, що у стандартному розгляді підсумовування нескінченного ланцюжка екраніровочних діаграм зводиться до підсумовування геометричній прогресії, в результаті чого має місце просто перенормування поляризаційного оператора, тобто:

$$\pi(\omega) = \Pi(\omega) [1 + iV\Pi(\omega)]^{-1} \quad (2.44)$$

і відповідно вводиться екранована кулонівська взаємодія $\tilde{V} = V - iV\Pi V$. Докладна процедура урахування поправки за рахунок ітерацій масового оператора викладена, напр., в [1,140].

Переходячи до конкретизації нашої схеми урахування кореляційних ефектів варто нагадати, що на практиці [1,2,18] часто використовують два основних засоби уточнення результатів розрахунку в першому порядку ТВ:

i) перший засіб пов'язаний з розширенням секулярної матриці M (2.4) шляхом введення набору нових збуджених станів; в цьому випадку елементи секулярної матриці розраховуються в першому порядку ТВ;

ii) другий засіб передбачає включення поправок вищих порядків в кожен з матричних елементів, причому розмір секулярної матриці (2.4) при цьому зберігається.

У такому розгляді фактично поправки другого і вище порядків ТЗ враховують накладення додаткових станів в кожному з елементів (2.4).

Ми для урахування багаточастинкових обмінно-поляризаційних ефектів використаємо метод багаточастинкових поляризаційних функціоналів густини [198-200,18b]. Зокрема, обмінно-поляризаційну взаємодію квазічастинок в атомній системі з декількома частинками над остовом заповнених атомних оболонок будемо описувати релятивістським дво-квазічастинковим поляризаційним оператором $V_{pol}^{Rel} V(r_1, r_2 | \theta)$, вперше введеним в роботі Глушкова [18b] і узагальнюючим відповідний нерелятивістський аналог Іванова-Іванової [18a]. Згідно із [18b], релятивістський дво-квазічастинковий оператор $V_{pol}^{Rel} V(r_1, r_2 | \theta)$ містить суму прямого та обмінного поляризаційних членів, а саме:

$$V_{pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) = V_{dir-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) + V_{ex-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta), \quad (2.45)$$

де

$$V_{d-pol}^{Rel}(r_1 r_2) = X \left\{ \int \frac{d\tilde{r} (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{1/3} \theta(\tilde{r})}{|r_1 - \tilde{r}| \cdot |\tilde{r} - r_2|} - \int \frac{d\tilde{r} (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{1/3} \theta(\tilde{r})}{|r_1 - \tilde{r}|} \int \frac{d\tilde{r} (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{1/3} \theta(\tilde{r})}{|\tilde{r} - r_2|} \right\} / \left[\int d\tilde{r} (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{1/3} \theta(\tilde{r}) \right]^{1/3} \quad (2.45a)$$

$$V_{X-pol}^{Rel}(r_1, r_2) = -\frac{X}{2} (0,375)^{1/3} \times \left\{ \frac{[(\rho_c^{(0)}(r_1))^{1/3} \theta(r_1) + (\rho_c^{(0)}(r_2))^{1/3} \theta(r_2)]}{|r_1 - r_2|} - \left(\int d\tilde{r} \cdot (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{1/3} \theta(\tilde{r}) \right)^{-1} \times \right.$$

$$\times \int d\tilde{r} (\rho_c^{(0)}(\tilde{r}))^{-2/3} \theta^{-2}(\tilde{r}) \cdot \left[\frac{(\rho_c^{(0)}(r_1))^{-1/3} \theta^{-1}(r_1)}{|r_1 - \tilde{r}|} + \frac{(\rho_c^{(0)}(r_2))^{-1/3} \theta^{-1}(r_2)}{|\tilde{r} - r_2|} \right] \} \quad (2.45б)$$

з релятивістським фактором:

$$\theta(r) = \left\{ 1 + \left[3\pi^2 \cdot \rho_c^{(0)}(r) \right]^{2/3} / c^2 \right\}^{1/2} \quad (2.45в)$$

та X – чисельний коефіцієнт.

Відомий альтернативний аналог (2.45) – це потенціал Віктора-Лафлін-Тейлора, який має вигляд [165,173]:

$$v_p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{r_{12}} - \frac{\alpha_d}{r_1^2 r_2^2} p_1(\cos\theta_{12}) w_3(r_2/r_0) w_3(r_2/r_0) - \frac{\alpha_d'}{r_1^3 r_2^3} p_2(\cos\theta_{12}) w_4(r_1/r_0) w_4(r_2/r_0) \quad (2.46)$$

(тут p_1 - поліноми Лежандра, $\cos\theta_{12} = \vec{r}_1 \vec{r}_2 / (r_1 r_2)$, α – поляризуємість, w - декотра функція, r_0 – параметричний радіус; тобто для використання цього потенціалу попередньо треба визначати декотрі параметри, зокрема, r_0 , α і т.ін.) і, як підкреслювалося у ряді робіт [125,173] має певні недоліки у порівнянні з (2.45).

Очевидно, неважко зрозуміти, що насправді конкретний чисельний вигляд потенціалів (2.45) залежить від визначення електронної густини атомного остова, тобто в кінцевому результаті визначається видом гамільтоніану нульового наближення ТЗ (2.9), (2.10) і розв'язками системи релятивістських діраківських рівнянь (2.17).

Суттєвою обставиною при використанні в методі розрахунку РА є той факт, що кутові частини матричних елементів операторів (2.45) оператору між електронної взаємодії (2.6) співпадають, тобто фактично при обчисленні як енергій станів, переходів, так й відповідних амплітуд радіаційних переходів ефективно урахування обмінно-поляризаційних поправок зведеться лише до модифікації радіальних інтегралів, що входять у формули для поправки першого порядку ТЗ по між квазічастинковій взаємодії. Це можна показати, розклав-

ши $1/|r - r'|$ по функціям Неймана і використавши теорему про сумування сферичних гармонік [1]. Поляризаційна поправка проявляється лише як поправка до радіальних інтегралів:

$$R_{dir-pol}^{Rel}(12;43) = X \frac{(4\pi^2)^{2/3}}{2\lambda + 1} \left(\int \int \int dr_1 dr_2 dr_3 r_1^2 r_2^2 r_3^3 U_\lambda(r_1 r_3) U_\lambda(r_3 r_2) \tilde{\rho}_1(r_1) \cdot \right.$$

$$\left. \rho_c^{(0)1/3}(r_3) \theta(r_3) \tilde{\rho}_2(r_2) \frac{1}{\langle \rho_c^{(0)1/3} \rangle R} \delta_{\lambda,0} \int \int dr_1 dr' r_1^2 r'^2 \tilde{\rho}_1(r_1) \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \rho_c^{(0)1/3}(r') \theta(r') U_\lambda(r_1 r') \int \int dr_2 dr' r_2^2 r'^2 \tilde{\rho}_2(r_2) \rho_c^{(0)1/3}(r') \theta(r') \right).$$

$$U_\lambda(r_1 r_2, \omega) = \frac{r_{<}^\lambda}{r_{>}^{\lambda+1}} Z_\lambda^{(1)}(\omega r_{<}) Z_\lambda^{(2)}(\omega r_{>}),$$

$$\tilde{\rho}_1(r) = R_1(r) R_3(r), \quad (2.47a)$$

$$\tilde{\rho}_2(r) = R_2(r) R_4(r),$$

$$\langle \rho_c^{(0)1/3} \rangle R = \int dr r^2 \rho_c^{(0)1/3}(r).$$

Для обчислення формул типу (2.46) ми також використовуємо ефективний метод диференціальних рівнянь Іванова і співр., в межах якого обчислення інтегралів виду [15,18-20]:

$$R_\lambda^d = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 r_1^2 r_2^2 r_3^2 \rho_1(r_1) \tilde{u}_\lambda(r_1 r_3) \rho_c^{1/3}(r_3) \tilde{u}_\lambda(r_3 r_2) \rho_2(r_2). \quad (2.47б)$$

зводиться до розв'язання системи диференціальних рівнянь з нульовими граничними умовами, яка докладно описана, напр., в [1].

Повна система рівнянь авжеж включає рівняння для модифікованих функцій Бесселя $Z_\lambda^{(1)}, Z_\lambda^{(2)}$, одночастинкових радіальних функцій. Всі інші радіальні інтеграли, у тому числі, інтеграли першого порядку ТЗ, обчислюються як розв'язки відповідних диференціальних рівнянь. Слід також розуміти, що враховуючи наші визначення основних операторів ТЗ, чисельні значення відповід-

них матричних елементів від операторів (2.24), (2.45) тощо на релятивістських хвильових функціях системи (2.17) будуть відрізнятися від відповідних значень інших самоузгоджених підходів.

Дуже важливо далі пояснити, що з урахуванням функціоналів (2.45) відповідні формули нашої теорії для ймовірностей переходів в РА в полі теплового випромінювання приймуть такий оригінальний вигляд:

$$\tilde{W}_{ij} = \frac{1}{4\pi} \cdot \tilde{V}_{ij}^{|\omega_{ij}|} n_{\omega}, \quad (2.48a)$$

$$\tilde{V}_{ij}^{|\omega_{ij}|} = \langle ij | \sin(i | \omega | r_{ij})(1 - \alpha_i \alpha_j) / r_{ij} + V_{dir-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) + V_{ex-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) | ji \rangle, \quad (2.48b)$$

й аналогічно для величин типу (1.7)-(1.12), (1.17)-(1.22), (1.26)-(1.28).

Один із розповсюджених шляхів урахування внесків діаграм іншого класу, а саме, екраніровочних, існує два принципово різних шляхи. Одних з них – стандартний, пов'язаний із розширенням секулярної матриці, та відповідних базисів орбіталей.

Другий шлях передбачає використання екраніровочних потенціалів. Напр., у відомих роботах Іванова та співр. по релятивістській ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення [18-20], традиційно група екраніровочних кореляційних ефектів враховувалася шляхом введення до гамільтоніану нульового наближення *ab initio* екранувального ефективного потенціалу кулонівського типу. Слід зазначити, що використання найбільш розповсюджених форм таких потенціалів, природньо, дозволяє у декотрій мірі враховувати внески екраніровочних діаграм. Але строго кажучи, така процедура є певно недостатньою, особливо, коли розв'язуються задачі, де максимально повне урахування обмінно-кореляційних ефектів є принципово важливим (напр., обчислення радіаційних та автоіонізаційних ширин для складних багатоелектронних атомів, розрахунок поляризуємостей атомів, штарківських зсувів, зсувів частот переходів атомних годинників за рахунок впливу теплового випромінювання). Таким чином, стає

потрібним розширення базису релятивістських атомних орбіталей, принаймні пов'язаних із віртуальними збудженнями валентних частинок, тому в нашій схемі передбачено в кінцевий бази долучені орбіталі із орбітальним квантовим числом l , як правило, не менше 6). Паралельно з цим є також дуже важлива проблема ефективного урахування станів континууму. Добре відомо, що урахування цих станів є принципово важливим при розрахунках радіаційних та автоіонізаційних характеристик тих же РА, що, очевидно, може істотно ускладнити обчислювальну процедуру. Їх неврахування суттєво знижує точність опису атомних характеристик, в т.ч., радіаційних та автоіонізаційних характеристик.

2.4 Удосконалений метод Дірака-Штурма для урахування станів континууму та процедура оптимізації базисів релятивістських електронних хвильових функцій.

Для розв'язання проблеми коректного урахування станів континууму у подальшому ми використовуємо ефективну процедуру, яка базується на відомому методі Дірака-Штурму. Авжеж, в літературі наводиться декілька реалізованих алгоритмів цього підходу. Для нас природним представляється стартувати з процедури, реалізованої в роботах Глушкова-Свинаренко та ін. (див. напр., [152]), тим більш що вона була розроблена із потенційною можливістю використання саме хвильових функцій Кона-Шема.

Головна ідея метода складається у тому, що простір функцій атомних станів можна «натягнути» на простір штурмівських орбіталей, який є і рахунковим і дискретним. Набір штурмівських орбіталей вводиться зі спеціально заданою асимптотикою, що є принциповим для збіжності спектрального розкладання, включаючи спектральне розкладання функцій Гріна (2.42).

Стосовно нашого класу задач, алгоритм штурмівських розкладів модифікується та виглядає наступним чином. Будемо розглядати для визначеності атом лужного елемента, скажемо, натрій. В штурмівській постановці задачі

виконується пошук власних значень та власних функцій наступного рівняння Дірака з гамільтоніаном (2.9), тобто:

$$[h_{DKS}(x) - \varepsilon]\varphi_v = \lambda_v \rho(x)\varphi_v \quad (2.49a)$$

де
$$\varepsilon = E - \sum_{k=1}^{N-1} \varepsilon_{n_k} \quad (2.49b)$$

Якщо $\varepsilon < 0$, рівняння (2.48) має чисто дискретний спектр власних значень $\lambda_v = \lambda_v(\varepsilon)$. Фігуруючий в (2.48) ваговий оператор звичайно задається у вигляді оператора, який є пропорційним потенціалу в гамільтоніану, скажемо, нульового наближення H_0 . На першому етапі вирішується система релятивістських рівнянь Дірака (2.17) і визначаються діраківські радіальні функції, а також відповідні діагональні параметри Лагранжа $\varepsilon^{4s}, \varepsilon^{3p}, \varepsilon^{3s}$ і т.д. На другому етапі чисельно вирішується система рівнянь, еквівалентна (2.48):

$$(-i\alpha c\nabla + V_{eN}(r) + V_C(r) + \delta_i V_X(r) + V_{Cor}(r|b) - \varepsilon_i)\varphi_i = 0 \quad (2.50)$$

Рівняння (2.50) фактично точно адаптовано до нашої версії ТЗ, й відповідно одно-квазічастинкового оператору. Далі слід мати на увазі [152], що кожній орбіталі реального або штурмівського стану відповідають параметри: ε_i, δ_i (при цьому $\delta_i = 1$ для орбіталей реальних станів). Важливо також підкреслити, що всі орбіталі штурмівського доповнення рівняння (2.48) мають експонентну асимптотику при $r \rightarrow \infty$, яка збігається з асимптотикою останньої орбіталі реального стану у відповідному базисі релятивістських орбіталей реальних станів (який природньо задається в нашому випадку розв'язками системи рівнянь (2.17)). Кількість явно врахованих функцій реальних станів, як зазвичай, визначається емпірично у чисельних розрахунках. Тут слід пам'ятати, що функції явно врахованих реальних станів представляють редуковане спектральне розкладання для функції Гріна (2.42). Залишкова частина при цьому зменшується як

$\exp \exp[-r(-2\varepsilon)^{1/2}]$ при $r \rightarrow \infty$, де ε - власна енергія останнього явно врахованого реального стану. Абсолютно таку ж асимптотику мають всі орбіталі штурмівського доповнення у відповідному базисі. Ця обставина є дуже суттєвою в плані збіжності алгоритму. Також варто заздалегідь додати, що наше рівняння (2.50) містить ваговий оператор (четвертий член), що відрізняє нашу схему, на-пр., від схеми Glushkov-Svinarenko et al [152]; як показали подальші обчислення, саме такий вибір (2.50) є найбільш прийнятним і ефективним для нашого класу задач. Особливо критичне значення це має при для коректного обчислення скалярної і тензорної поляризуємостей атому (1.30).

В заключення підрозділу коротко викладемо основні аспекти принципово нового для сучасних досліджень властивостей РА у полі теплового випромінювання і відповідних прикладних задач алгоритму, який передбачає по будову оптимізованих базисів релятивістських дірак-брейт-кон-шемівських орбіталей, що, як вказувалося вище, одночасно забезпечує й пряму перевірку виконання принципу калібровочної інваріантності при обчисленні радіаційних амплітуд переходів.

Згідно із оригінальною ідеєю (див. [15]), для оптимізації релятивістських електронних біспінорів використаний фундаментальний принцип мінімізації енергетичного функціонала (2.13), що представляє внесок кореляційних діаграм 4 порядку ТЗ, фактично, тобто внесок діаграм, пов'язаний з обміном поздовжніми фотонами в уявну частину енергії системи. Всі фундаментальні та технічні аспекти реалізації формалізму мінімізації калібровочно-неінваріантного функціоналу (2.13) для різноманітних атомних моделей (тобто, вид гамільтоніану нульового наближення, вибір потенціалів атомного поля, конкретизація системи діраківських рівнянь в релятивістських моделях і таке інше) докладно викладені в [1,15].

Тому для завершення побудови нашого підходу в аспекті оптимізації базисів орбіталей достатньо розглянути лише ті питання, що відрізняють наш підхід від оригінального, а також багаточисельних узагальнюючих алгоритмів та

подальших конкретизацій (див.,напр., [36,37,136-138, 141-153] на різних класах власних функцій гамільтоніанів відповідних атомних моделей, що будувались для розв'язання різних класів задач атомної, молекулярної, а також ядерної спектроскопії. Підкреслимо, що переважна більшість шуканих алгоритмів, як й оригінальна версія Глушкова-Іванова [15], реалізовані на класі власних функцій релятивістського гамільтоніану Дірака з модельним потенціалом нульового наближення в емпіричній або неемпіричній формах, а також в наближеннях Дірака-Фока або Дірака-Кона-Шема, причому в останньому випадку в мінімізаційному алгоритмі були задіяні переважно нерелятивістські форми обмінно-кореляційних потенціалів теорії функціоналу густини (див. напр., [31-33]). Найбільш популярним та коректним алгоритмом реалізації методу оптимізації базису релятивістських орбіталей є безпосередня функціональна мінімізація калібровочно-неінваріантного внеску (2.13) [1,3].

В нашому випадку це реалізовано на класі власних функцій гамільтоніану Дірака-Брейта-Кона-Шема з релятивістськими виразами для кон-шемівських обмінно-кореляційних функціоналів. Конкретно відповідний внесок (2.13) в радіаційну ширину може бути виражений через комбінації матричних елементів обмінно-поляризаційного функціоналу (2.45):

$$\text{Im } \Delta E_{pol-c}(i-j|C_d) = F \left\{ \sum \langle |V_{dir-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) + V_{ex-pol}^{Rel}(r_1, r_2 | \theta) \rangle \right\}. \quad (2.51)$$

Далі процедура мінімізації зводиться до ланцюжка варіацій типу $\delta \varphi_c \rightarrow \delta V_{SCF} \rightarrow \delta \{f_i, f_j, g_i, g_j\} \rightarrow \dots$, визначається поправка першого порядку до власних функцій ДБКШ $\{f_i, f_j, g_i, g_j\}$, розв'язків рівнянь ДБКШ, яка визначається відомим біспінором з енергетичним параметром виду [15,20]:

$$F = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \nu_i m_i} \langle n_i \nu_i m_i | V | n_i \nu_i m_i \rangle / (E_{n_i \nu_i m_i} - E) \quad (2.52)$$

компоненти якого задовольняють новій системі рівнянь типу системи Глушкова-Іванова-Іванової, але з іншими визначеннями ключових потенціальних членів, а саме: :

$$\begin{aligned}
 f' / \alpha Z + (1 - \mu) g / \alpha Z r + A_+ f &= \delta V_{SCF} f_{n_i, \mu_i}, \\
 - g' / \alpha Z + (1 + \mu_i) f / \alpha Z r + A_- g &= \delta V_{SCF} g_{n_i, \mu_i},
 \end{aligned}
 \tag{2.53}$$

де в означеннях нашої теорії:

$$\begin{aligned}
 \delta V_{SCF} &\Rightarrow \delta [V_C(r) + V_{ex}(r) + V_{Cor}(r|b)] \\
 A_{\pm} &= V_{SCF}(r) \pm 1/(\alpha Z)^2 - E.
 \end{aligned}
 \tag{2.54}$$

Таким чином, реалізація описаного алгоритму вирішує проблему побудови оптимізованого базису релятивістських електронних хвильових функцій. Додатково варто звернути увагу на ту обставину, що в залежності від величини калібровочно-неінваріантного внеску в радіаційну ширину можна абсолютно охарактеризувати ступінь коректності урахування у методі внеску важливих багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. Такий результат вперше отриманий в теорії РА в полі теплового випромінювання, а також теорії розрахунків ВВР-індукованих зсувів частоти атомного переходу в атомних (оптичних) годинниках (стандартах частоти). Інші технічні деталі чисельної реалізації алгоритму викладені в [1,152,198-200]. Як й вище для чисельного розв'язання системи диференціальних рівнянь діраківського типу використаний метод Рунге-Кутта, четвертого порядку (окрема програма в атомному комплексі “Superatom-ISAN” [191-195]).

2.5 Висновки до розділу 2

Враховуючи все вище сказане, можна констатувати, що в даному розділі розвинутий новий суттєво релятивістський підхід в спектроскопії РА в полі теплового випромінювання теорії до розрахунку енергетичних та спектральних характеристик (радіаційних ширин, швидкостей збудження і іонізації) РА ВВР полем, який базується узагальненій калібровочно-інваріантній версії релятивістського енергетичного підходу Glushkov-Ivanov (S-матричний формалізм Gell-Mann та Low), та «гібридній» версії релятивістської ТЗ Dirac-Breit-Kohn-Sham з

ефективним акуратним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів, які включають ефекти взаємного екранування квазічастинок, обмінно-поляризаційне квазічастинок через поляризуємий багато електронний остов, а також їх взаємодія з остовом через фотонний вакуум, ітераційні поправки до масового оператора квазічастинок, тиск континууму та інші. Урахування обмінно-поляризаційних ефектів виконано на основі використання неемпіричного багато-частинкового поляризаційного функціоналу, екранувальні обмінно-кореляційні ефекти враховувались шляхом розширення базису релятивістських діраківських орбіталей, урахування станів континууму виконано у межах узагальненої ефективної процедури Дірака-Штурма плюс додатково розв'язана проблема перевірки та коректного виконання принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні імовірностей елементарних атомних процесів в РА в VBR полі, що забезпечено також використанням базисів оптимізованих релятивістських орбіталей. Важливий аспект теорії – урахування ефектів суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах. Додатково є можливим застосування нової теорії обчислення не тільки радіаційних властивостей РА в VBR полі, але й розрахунків характеристик РА, які містять у своїх визначеннях суми другого порядку ТЗ із підсумовуванням по безкінечному набору проміжних станів, наприклад, поляризуємості, VBR зсувів частот атомних переходів в атомних годинниках тощо.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ В ПОЛІ ТЕПЛОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

3.1 Вступні зауваження

У цьому підрозділі ми приведемо дані, по-перше, тестових обчислень одно-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій (іонізації), редукованих дипольних матричних елементів (радіаційних амплітуд) для переходів головних серій в спектрах лужних атомів Na, K, Rb, Cs, сил осциляторів $3s-3p, 3p-3d$ переходів в *Na*-подібних іонах *SVI, CIVII*, енергій, імовірностей ряду переходів, у т.ч. E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 квадрупольного переходу $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в іоні Hg^+ тощо у вільному стані, по-друге, обчислень радіаційних амплітуд, ефективного часу життя, швидкостей BBR-іонізації в залежності від головного квантового числа, при різних температурах і т.ін. вказаних атомів у рідбергівських станах у полі теплового випромінювання. З метою аналізу можливостей нової теорії проведено порівняння окремих наших даних для ефективного часу життя, швидкості BBR-іонізації для рідбергівських станів 17,18 P,D та декотрих інших ($T=300K, 500K$), окремих рідбергівських nS, nP, nD станів Rb ($T=300K$) з даними відповідно прецизійних експериментів Gallagher-Cooke (Virginia group), Beterov-Ryabtsev et al (Novosibirsk), Nascimento-Caliri-de Oliveira et al (2006) [41, 42, 61, 54,55]. Наведені дані масових обчислень (частина даних отримана взагалі вперше) ефективного часу життя, швидкості BBR-іонізації для рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів атомів Na, K, Ca^+ , Rb, Cs, Hg^+ в температурному інтервалі 0-600K, у т.ч. $T=300, 500K$), для низки станів проведено порівняння з даними удосконалених квазікласичних обчислень Beterov et al, Glukhov-Ovsiannikov, модельних обчислень Kleppner et al, Theodosiou та ін. [43-62,78], проаналізовані основні фізичні процеси особливості BBR-іонізації рідбергівських атомів.

3.2 Тестові обчислення одно-електронних енергій, дипольних матричних елементів, сил осциляторів радіаційних переходів в лужних атомах у вільному стані

3.2.1 Тестові обчислення одно-електронних енергій в лужних атомах у вільному стані: Na, K, Rb, Cs

В таблицях 3.1-3.4 ми надаємо дані наших обчислень одно-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій (іонізації) лужних атомів Na, K, Rb, Cs, а також з метою порівняння експериментальні і дані альтернативних теоретичних обчислень різноманітними методами, зокрема: CC (coupled cluster) метод, PTRHF – багаточастинкова ТЗ з релятивістським хартрі-фоківським (RHF) наближенням; PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з дірак-фоківським (DF) нульовим наближенням з урахуванням так званих одно-і двічі збуджених конфігурації, QDM – узагальнений метод квантового дефекту з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів, DFM- метод функціонала густини, MP-REA -метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу (дані з робіт: [37,78,79,96,130, 138,161-163]).

Таблиця 3.1

Теоретичні та експериментальні (exp.) 1-електронні $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергії (cm^{-1})
 Na: - теорія – coupled cluster метод (CC); PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF нульовим наближенням і дані нашої теорії ([16,26-29,38])

Na	3s_{1/2}	4s_{1/2}	5s_{1/2}	6s_{1/2}
PTDF ^{SD}	41447.3	15708.8	8248.48	5076.68
CC	41352	15690	-	-
Наша теорія	41448	15710	8249	5077
Exp.	41449.4	15709.4	8248.76	5076.82
Na	3p_{1/2}	4p_{1/2}	5p_{1/2}	6p_{1/2}
PTDF ^{SD}	24493.9	11183.0	6409.31	4153.22
CC	24465	11172	-	-
Наша теорія	24494	11183	6410	4154
Exp.	24493.3	11182.4	6409.06	4153.12

Таблиця 3.2

Теоретичні та експериментальні (exp.) 1-електронні $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергії (cm^{-1}) К: теорія – coupled cluster метод (CC); PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF нульовим наближенням [78,96,161-163] і дані нашої теорії

К	4s_{1/2}	5s_{1/2}	6s_{1/2}	7s_{1/2}
PTDF ^{SD}	34962	13958	7548	4730
CC	35028	13983	-	-
Наша теорія	35005	13984	7556	4733
Exp.	35010	13986	7559	4735
К	4p_{1/2}	5p_{1/2}	6p_{1/2}	7p_{1/2}
PTDF ^{SD}	22023	10304	6008	3938
CC	22016	10306	-	-
Наша теорія	22024	10306	6011	3942
Exp.	22025	10308	6010	3940

Таблиця 3.3

Теоретичні та експериментальні (exp.) 1-електронні $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергії (cm^{-1}) Rb: теорія – coupled cluster метод (CC); PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF нульовим наближенням, QDM – метод квантового дефекту, DFM – метод функціоналу густини, MP-REA -метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу [37,78,79,96,130, 138,161-163] і дані нашої теорії

Rb	5s_{1/2}	6s_{1/2}	7s_{1/2}	8s_{1/2}
CC	33721	13564	-	-
PTDF ^{SD}	33649	13527	7365	4637
QDM	33672	13522	7346	4624
DKS	33684	13539	7372	4639
MP-REA	33684	13548	7368	4640
Наша теорія	33685	13550	7372	4642
Exp.	33691	13557	7380	4644
Rb	5p_{1/2}	6p_{1/2}	7p_{1/2}	8p_{1/2}
CC	21117	9857	-	-
ТЗДФ ^{SD}	21111	9969	5852	3854
DKS	21110	9970	5854	3854
MP-REA	21114	9975	5854	3855
Наша теорія	21113	9973	5855	3856
Exp.	21112	9976	5856	3856

Таблиця 3.4

Теоретичні та експериментальні значення (в cm^{-1}) одно-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій (іонізації) Cs: exp. - [78,79,161-163]), теорія – coupled cluster метод (CC); PTRHF – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням; ТЗДФ^{SD} – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації), MP-REA- метод модельного потенціалу в EA; QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних поправок, метод DKS [37,96,125,138] і наші дані

Cs	6s _{1/2}	7s _{1/2}	8s _{1/2}	9s _{1/2}
CC	31443	12876	-	-
PTDF ^{SD}	31262	12801	7060	4479
PTRHF	31305	12765	-	-
QDM	31284	12798	7054	4471
DFM	31388	12832	7069	4480
MP-REA	31395	12868	7076	4488
Наша теорія	31396	12870	7078	4490
Exp.	31407	12871	7089	4496
Cs	6p _{1/2}	7p _{1/2}	8p _{1/2}	9p _{1/2}
CC	20217	9549	-	-
PTDF ^{SD}	20204	9621	5687	3760
QDM	20196	9613	5674	3749
DFM	20212	9624	5688	3762
MP-REA	20218	9633	5689	3767
Наша теорія	20221	9636	5691	3770
Exp.	20228	9641	5698	3769

Аналізуючи дані щодо одно-електронних енергій слід пам'ятати, що авжеж їх розрахунок, з одного боку, демонструє точність методу, яка природно забезпечується коректністю відповідного гамільтоніану теорії або моделі; з іншого боку, відомо, що цілком добрі по точності дані можуть бути отримані й при використанні не зовсім коректних базисів орбіталей. Як неважко побачити з наданих таблиць, найбільш прецизійні дані дають насамперед метод Safronova et al PTDF^{SD}, coupled cluster метод, MP-REA метод Терновського. В той же час, більш адекватним та коректним критерієм прецизійності тієї чи іншої теорії,

природньо є обчислення залежних від електронної густини властивостей, зокрема, радіаційних амплітуд (тобто ймовірностей переходів або сил осциляторів), оскільки прецизійність їх обчислення на пряму залежить від якості відповідних базисів релятивістських електронних хвильових функцій, коректності урахування обмінно-кореляційних та інших поправок.

3.2.2 Тестові обчислення дипольних матричних елементів, сил осциляторів радіаційних переходів в лужних атомах у вільному стані: Na, K, Rb, Cs та Na-подібних іонах

В таблиці 3.5 ми надаємо дані наших обчислень сил осциляторів для $3s-3p$, $3p-3d$ переходів в Na-подібних іонах *SVI*, *CVII*, а також відповідні експериментальні дані і дані обчислень на основі різних теоретичних підходів, зокрема, методами, зокрема, $1/Z$ розкладання, $1/Z$ розкладання з урахуванням поляризації остова Хартрі-Фок (ХФ), наближення конфігураційної взаємодії, багато-конфігураційний метод Хартрі-Фока, варіаційний метод Хартрі-Фока, кулонівське наближення, полуемпіричний метод модельного потенціалу, різні версії енергетичного підходу із використанням модельного потенціалу Іванова-Іванової, а також Міллеру-Гріну (див. [1,17,161]).

Слід зазначити, що більшість з перелічених методів, дані обчислень якими наведені в таблиці 3.5, розвивалися ще з початку 60-років минулого сторіччя і за теперішнього часу і природньо мають відомі недоліки. Ми наводимо ці дані з метою продемонструвати загальну ефективність розвинутої нами теорії і у подальшому для аналізу даних будемо орієнтуватися на найбільш потужні альтернативні сучасні методи, зокрема, coupled cluster метод, методи багаточастинкова ТЗ з DF нульовим наближенням тощо.

Стосовно даних таблиці 3.5, відзначимо, що, як і слід було очікувати, істотним виявився внесок обмінно-поляризаційних поправок, склавши $\sim 10\%$ величини сили осциляторів.

Таблиця 3.5

Сили осциляторів переходів в *Na*-подібних іонах

Іон	S VI		C1 VII	
	$3s^2S-3p^2P$	$3p^2P-3d^2D$	$3s^2S-3p^2P$	$3p^2P-3d^2D$
Ехр.	0,66±0,02	0,60±0,03	0,604±0,015	0,557±0,003
1/Z розкладання	0,64	0,62	0,641	0,53
Хартрі-Фок (ХФ)	0,694	0,664	0,644	0,591
1/Z розкладання з урахуванням поляризації остова	0,564	0,532	0,538	0,407
Наближення конфігураційної взаємодії	0,646	0,65	-	-
Багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока	0,651	-	0,604	-
Варіаційний метод Хартрі-Фока	0,650	0,64	-	-
Кулонівське наближення	0,658	0,622	0,6135	0,562
Полуемпіричний метод модельного потенціалу	0,692	0,574	-	0,533
Релятивістський метод Хартрі-Фока	0,67	0,663	0,670	0,594
Енергетичний підхід	0,67	0,61	0,61	0,573
Модельний енергетичний підхід	0,662	0,601	0,605	0,561
Наша теорія (без урахування поляризації остову)	0,761	0,690	0,693	0,674
Наша теорія (з урахуванням поляризації остову)	0,661 (A)	0,601 (A)	0,602 (A)	0,559 (A)
	0,661 (B)	0,600 (B)	0,602 (B)	0,558 (B)
	0,660 (C)	0,601 (C)	0,603 (C)	0,559 (C)

Також дуже важливо, що обчислені нами значення сил осциляторів фактично з використанням трьох калібровок фотонного пропагатора (Кулону, Фейнмана, Бабушкіна; дані А,В,С в останньому рядку таблиці 3.5) відмінно узгоджуються один з одним, що свідчить, по перше, про високий ступінь оптимізованої та коректності одно-квазічастинкового представлення, яке генерується у нульовому наближенні нашої теорії й відповідно дуже малу величину калібровочно-неінваріантного внеску; по-друге, на традиційні мові амплітудного квантово-механічного формалізму, величини сил осциляторів, обчислені з використанням операторів переходів у формі «довжини», «швидкості», «прискорення» для генерованого представлення практично збігаються. До речі, це свідчить про високу коректність урахування основних обмінно-кореляційних поправок та безпосередньо виконання принципу калібровочної інваріантності. Отримані нами значення сил осциляторів значно краще інших узгоджуються з прецизійними експериментальними даними.

В таблиці 3.6 ми надаємо дані наших обчислень (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів головних серій в спектрах атомів Na, K, Cs, Fr, а також відповідні наявні експериментальні (Exp.) дані і дані альтернативних теоретичних обчислень, зокрема: $PTDF^{SD}$ – багаточастинкова ТЗ з DF “0” наближенням (враховані SD конфігурації) by Safronova et al; QDM – узагальнене наближення квантового дефекту з урахуванням обмінно-кореляційних поправок Tkach; PTRHF – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням Dzuba-Flambaum; MP-REA – метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу Ternovsky та ін. (з робіт [37,78,79,96,130, 138,161-163]). Дані нашої теорії відповідають обчисленням редукованих дипольних матричних елементів з використанням двох калібровок фотонного пропагатора (Кулону та Фенману), тобто на традиційній мові амплітудного підходу – формулам «довжини» та «швидкості». Знову звертає на себе увагу безпосередньо виконання принципу калібровочної інваріантності, дуже мала величина калібровочно-неінваріантного внеску і ефективність урахування основних обмінно-кореляційних поправок.

Таблиця 3.6

Експериментальні дані (Ехр.) і дані теоретичних обчислень редукованих дипольних матричних елементів (ат.од.) для радіаційних переходів в спектрах важких лужних атомів Na, K, Rb, Cs: PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF “0” наближенням Safronova etal; PTRHF – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням Dzuba-Flambaum; MP-REA – метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу Ternovsky etal; QDM – узагальнене наближення квантового дефекту Tkach etal [37,78,79,96,130, 138,161-163]; наша теорія

Атом	Na	Na	K	K
Перехід	$3p_{1/2}-3s_{1/2}$	$3p_{3/2}-3s_{1/2}$	$4p_{1/2}-4s_{1/2}$	$4p_{3/2}-4s_{1/2}$
Ехр.	3.5246 (23)	4.9838 (34)	4.102 (5)	5.800 (8)
PTRHF	4.209	5.810	4.296	6.257
PTDF ^{SD}	3.531	4.994	4.098	5.794
Наша теорія	3.521 3.523	4.980 4.982	4.099 4.101	5.796 5.798
Атом	Rb	Rb	Cs	Cs
Перехід	$5p_{1/2}-5s_{1/2}$	$5p_{3/2}-5s_{1/2}$	$6p_{1/2}-6s_{1/2}$	$6p_{3/2}-6s_{1/2}$
Ехр.	4.231(3)	5.977(4)	4.4890(6)	6.3238(7)
PTRHF	4.209	5.810	4.296	6.257
PTDF ^{SD}	4.221	5.956	4.478	6.298
QDM	4.032	5.720	4.282	5.936
MP-REA	4.230	5.974	4.488	6.322
Наша теорія	4.232 4.234	5.976 5.979	4.490 4.492	6.324 6.325

Примітка: Na ($3p_{1/2}-3s_{1/2}$: 3.49; $3p_{3/2}-3s_{1/2}$: 4.95 (КЕД-ТЗ);

K ($4p_{1/2}-4s_{1/2}$: 3.97; $4p_{3/2}-4s_{1/2}$: 5.76 (КЕД-ТЗ);

Rb ($5p_{1/2}-5s_{1/2}$: 4.23; $5p_{3/2}-5s_{1/2}$: 5.97 (КЕД-ТЗ));

Cs ($6p_{1/2}-6s_{1/2}$: 4.48; $6p_{3/2}-6s_{1/2}$: 6.32 (КЕД-ТЗ) [141].

3.2.3 Обчислення енергій та ймовірностей радіаційних переходів у іоні Hg^+

В цьому підрозділі ми надаємо дані обчислень енергій та ймовірностей радіаційних переходів (сил осциляторів), зокрема, E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 квадрупольного переходу $5d^9 6s^2 (D_{5/2}, D_{3/2})- 5d^{10}6s (S_{1/2})$ в одноразово іонізованому атомі Hg^+ . Слід зазначити цей іон характеризується, по-перше, недостатньо добрим рівнем вивчення спектральних характеристик, по-друге, є дуже цікавим з точки зору необхідності коректного урахування як релятивістських так й кореляційних поправок, оскільки переходи проходять в досить сильному полі ядра із зарядом $Z=80$ [1,36,137,161,162,166]. В межах нашого формалізму ТЗ вказані вище стани звичайно інтерпретуються як одно- і трьох-квазічастинкові стани електронів ($6s$) (вакансії $5d^{-1}$) над остовом заповнених електронних оболонок $5d^{10}6s^2$. В таблицях 3.7-3.9 ми наводимо дані нашої теорії, а також експериментальні дані (Moore, NBS) та дані альтернативних теоретичних обчислень енергій та ймовірностей дипольних E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 квадрупольного переходу $5d^9 6s^2 (D_{5/2}, D_{3/2})- 5d^{10}6s (S_{1/2})$ в Hg^+ : HF - хартрі-фоківські дані, DF – дірак-фоківські дані, DF (exp.) – дірак-фоківські дані отримані з використанням експериментальних довжин переходів, RPT-MP – дані релятивістської ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення ([29,126,142,146]). Аналіз наведених в табл.3.7,3.8 даних свідчить про те, що, по-перше, стандартні методи HF, DF в одно-конфігураційному варіанті дають дуже високу похибку при обчисленні енергій та ймовірностей радіаційних переходів, причому при використанні в дірак-фоківській схемі експериментальних довжин переходів точність обчислень суттєво зростає, оскільки очевидно, використання емпіричних даних дозволяє провести ефективно врахувати частину дуже важливих з кількісної точки зору кореляційних поправок. В нашій теорії послідовно виконано ефективно акуратне урахування основних обмінно-кореляційних ефектів, які включають ефекти взаємного екранування частинок,

Таблиця 3.7

Енергії переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в іоні Hg^+ (в Ry): HF - хартрі-фоківські дані, DF – дірак-фоківські дані, DF (exp.) – дірак-фоківські (з використанням експериментальних довжин переходів), RPT-MP – дані релятивістської ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення, Our-наша теорія ([29,126,142,146])

Метод	E_{6s}	$7P_{1/2}-6S_{1/2}$	$7P_{3/2}-6S_{1/2}$	$7P_{1/2}-7S_{1/2}$	$7P_{3/2}-7S_{1/2}$	$D_{3/2}-S_{1/2}$	$D_{5/2}-S_{1/2}$
Exp.	-1.378	0.987	1.020	0.115	0.148	0.461	0.324
HF	-1.07	0.721	0.721	0.095	0.095	0.863	0.863
DF	-1.277	0.904	0.922	0.109	0.127	0.608	0.460
RPT-MP	-1.377	0.986	1.019	0.114	0.147	0.462	0.325
Our	-1.378	0.987	1.020	0.115	0.148	0.462	0.324

Таблиця 3.8.

Ймовірності E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ в Hg^+ (в s^{-1}): HF - хартрі-фоківські дані, DF – дірак-фоківські дані, DF (exp.) – дірак-фоківські (з використанням експериментальних довжин переходів), RPT-MP – дані релятивістської ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення, Our-наша теорія ([29,126,142,146]); Exp. – Moore, NBS (Washington)

Метод	$7P_{3/2}-6S_{1/2}$	$7P_{1/2}-6S_{1/2}$	$7P_{3/2}-7S_{1/2}$	$7P_{1/2}-7S_{1/2}$	$D_{3/2}-S_{1/2}^*$	$D_{5/2}-S_{1/2}^*$
Exp.	$1.53 \cdot 10^8$	$2.35 \cdot 10^7$	$1.44 \cdot 10^8$	$6.37 \cdot 10^7$	53.5 ± 2.0	11.6 ± 0.4
HF	$4.75 \cdot 10^6$	$4.75 \cdot 10^6$	$3.65 \cdot 10^7$	$3.65 \cdot 10^7$	1360	1360
DF	$8.45 \cdot 10^7$	$1.67 \cdot 10^7$	$6.89 \cdot 10^7$	$4.71 \cdot 10^7$	257.0	77.4
DF (E_{exp})	$1.17 \cdot 10^8$	$2.04 \cdot 10^7$	$1.10 \cdot 10^8$	$5.52 \cdot 10^7$	63.9	13.3
RPT-MP	$1.49 \cdot 10^8$	$2.31 \cdot 10^7$	$1.41 \cdot 10^8$	$6.33 \cdot 10^7$	54.53	11.84
Our	$1.51 \cdot 10^8$	$2.33 \cdot 10^7$	$1.43 \cdot 10^8$	$6.35 \cdot 10^7$	53.84	11.72

Примітка: $*5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$;

обмінно-поляризаційне квазічастинок через поляризуемий багато електронний остов, а також їх взаємодія з остовом через фотонний вакуум, ітераційні поправки до масового оператора частинок, тиск континууму та інші. Це, в результаті, забезпечує достатньо добре узгодження теорії і експерименту.

3.3 Результати обчислення ефективних часів життя, швидкостей BBR іонізації для РА лужних та інших атомів та іонів у полі теплового випромінювання

3.3.1 Результати обчислення величин дипольних матричних елементів, ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрі атому натрію

В таблиці 3.9 ми наводимо наші теоретичні дані, а також експериментальні дані Gallakher-Cooke (Virgdnia group) і оцінки Gounand для ефективного часу життя рідбергівських станів 17p, 18p в спектрі атому Na [41,42].

Таблиця 3.9

Наші теоретичні дані, оцінки Gounand та експериментальні дані Gallakher-Cookt (Virgdnia group) для ефективного часу життя (μs) рідбергівських станів 17p, 18p в спектрі атому Na ($T=300\text{K}$)

State	Exp. data Gallakher- Cooke	Data by Gounand	Теор. дані Gallakher- Cooke	Наша теорія
17p	$11.4 \begin{smallmatrix} +5.6 \\ -1.4 \end{smallmatrix}$	48.4	15.5	16.8
18p	$13.9 \begin{smallmatrix} +8.8 \\ -2.9 \end{smallmatrix}$	58.4	17.9	18.5

Прим: Gallakher T.,Cooke W.,Phys.Rev.Lett. 42, 835 (1979); Gounand F, J.Phys. (Paris),40,457 (1979).

Далі на рис.3.1 ми наводимо наші теоретичні дані (переривчасті лінії), а також експериментальні дані (трикутники, квадратики) Gallakher-Cooke (Virgdnia group) [41,42] для залежності ефективного часу життя (μs) від ефективного квантового числа для рідбергівських станів nS, nD рідбергівських станів в спектрі атому Na ($T=300$). Експериментальні дані для ns станів обозначені трикутниками, nd станів - квадратиками.

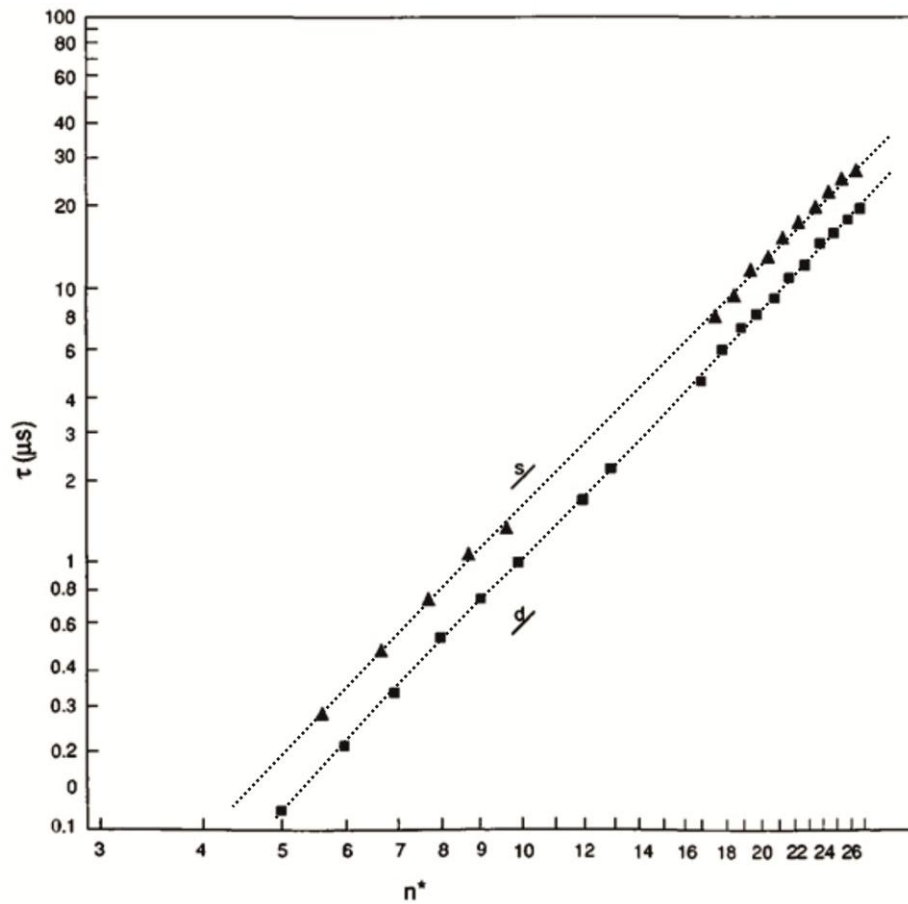


Рисунок 3.1 Залежність ефективного часу життя від n^* для рідбергівських станів nS , nD атому Na ($T=30,400\text{K}$).

При цьому для станів з n нижче 15 ці експериментальні дані отримані за допомогою флюоресцентної техніки при температурі 400К. Часи життя станів з n більш ніж 15 вимірені за допомогою методу польової іонізації для $T=30\text{K}$. Порівняння наших даних з наведеними на рис.1.3 експериментальними результатами демонструє дуже добру згоду цих даних, причому для nS та nD станів згода краще, ніж для nP станів.

Далі на рисунку 3.2 ми наводимо дані для часу життя nS , nP , nD станів атомів Na , K , Rb : кола - експериментальні дані (Gallagher-Cooke); безперервна лінія – теорія (кулонівське наближення; Gallagher-Cooke) без урахування теплового VBR впливу, точкова лінія – теорія (кулонівське наближення; Gallagher-Cooke), але з урахуванням VBR впливу [41,42]; жирна переривчата лінія – дані нашої теорії з урахуванням VBR впливу.

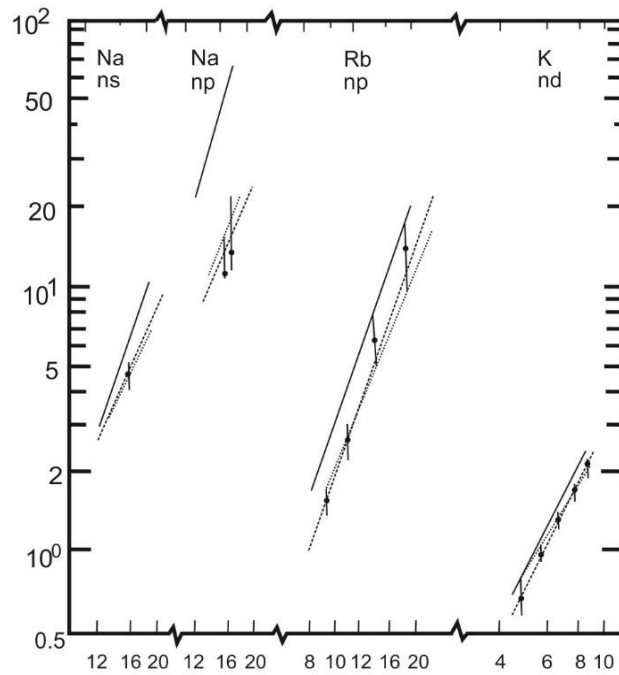


Рисунок 3.2 Дані для часу життя nS , nP , nD станів атомів Na, K, Rb: кола - експериментальні дані (Gallakher-Cooke); безперервна лінія – теорія (кулонівське наближення; Gallakher-Cooke) без урахування BBR впливу, точкова лінія – теж саме, але з урахуванням BBR впливу; переривчата лінія – дані нашої теорії у урахуванням BBR впливу

Варто звернути увагу на той факт, що згідно із експериментом ефективні часи життя p станів для натрію драматично сильно зменшуються під впливом BBR випромінювання (див. також табл. 3.10)., причому для p станів ефект значно сильніше, чим для S , D станів.

У таблиці 3.10 наведені результати порівняння експериментальних даних (E1 - експеримент групи Kleppner et al, 1982 [42]; E2 - експеримент групи Burkhardt et al [44]) з даними теоретичного обчислення швидкостей іонізації PA натрію в станах (17,18D, 18P) при температурах 300K, 500K; теоретичні дані відповідають таким теоретичним моделям: T1 – модель Глухова-Овсяннікова, яка базується на нерелятивістській теорії модельного потенціалу Simons-Fues) [56-59]; T2- модельна теорія Lehman (Th2) [45], квазікласична модель Dyachkov-Pankratov (Th3) [46]; T3- удосконалена квазікласична модель

Beterov etal [50-55]; T4 -моделі Tkach etal, що базуються на методі квантового дефекту і модельному потенціалі [36,37] та T6- наша теорія.

Таблиця 3.10

Теоретичні та експериментальні значення швидкості (10^3 c^{-1}) BBR - іонізації натрію з рідбергівських станів: E1- Kleppner etal; E2- Burkhardt etal; T1 - нерелятивистская теория МП Simons-Fues; T2- теорія Lehman; T3- квазікласична модель Dyachkov-Pankratov; T4- удосконалена квазікласична модель Beterov etal; T5 -моделі Tkach etal, що базуються на методі квантового дефекту і модельному потенціалі; T6- наша теорія.

T	nL	E1	E2	T1	T2	T3	T4	T5a	Th5b
300	17D	1.0	-	1.08	0.95	0.9	1.15	1.05 1.02	0.99
500	18P	-	5.7	4.18	-	-	-	5.34	5.53

Аналізуючи результати обчислення теоретичного обчислення швидкостей іонізації РА натрію в станах (17,18D, 18P) при температурах 300К, 500К варто звернути на увагу на те, що, по-перше, дані різноманітних моделей знаходяться у фізично реалістичній згоді один з одним ($T=300\text{K}$) й, в тому числі, з даними експериментів. По-друге, хоча квазікласичні моделі, а також моделі, що базуються на методах квантового дефекту та модельного потенціалу в принципі розроблені виключно на випадок лужних елементів й дають насправді цілком адекватні результати, тем не менш, ми вважаємо, що дані більш послідовних квантових методів є більш адекватними (до речі, останні забезпечують краще узгодження з експериментом. Очевидно, при дослідження натрію досить суттєве значення мають якість релятивістських базисів, коректне урахування обмінно-поляризаційних поправок і т.ін.

Далі на рисунку 3.3 ми наводимо дані теоретичного обчислення на основі нашої теорії температурної залежності швидкостей іонізації РА натрію в стані 17D (переривчаста лінія), дані модельного розрахунку Kleppner etal в межах кулонівського наближення і відповідні експериментальні дані Kleppner etal [43].

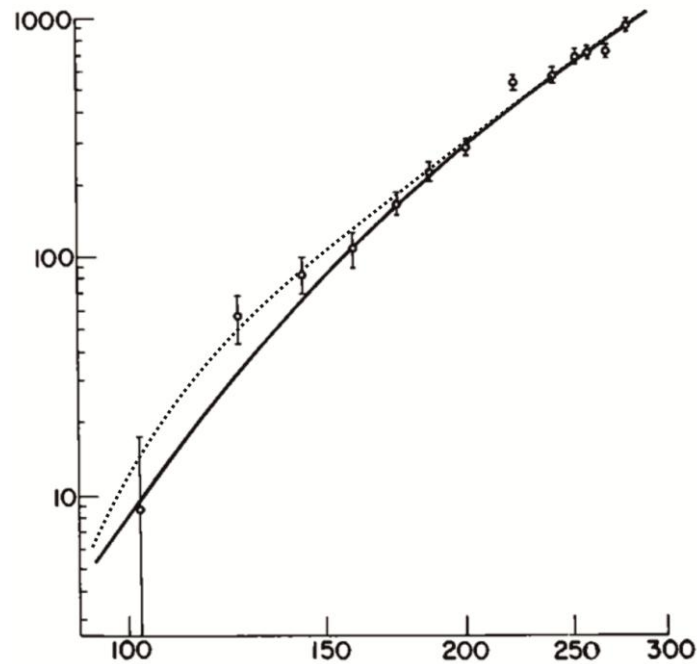


Рисунок 3.3 Дані теоретичного обчислення в межах нашої теорії температурної залежності швидкостей іонізації РА натрію в стані 17D (переривчаста лінія), дані модельного розрахунку Kleppner et al в межах кулонівського наближення (безперервна лінія) та експериментальні дані гр. Kleppner et al (1982). Spencer W.P., Vaidyanathan A., Kleppner D, Ducas T. Phys. Rev. A. 26, 1490 (1982);

Аналіз даних на рисунку 3.3 показує, що при температурах вище 150K дані нашої теорії і кулонівської моделі Kleppner et al дуже близькі друг до другу і достатньо добре узгоджуються з експериментальними вимірюваннями, але при температурі нижче 150K має деяке відхилення кулонівської моделі від даних експерименту. У цьому сенсі наша теорія дає більш адекватні результати.

Далі на рисунку 3.4 ми наводимо експериментальні та теоретичні дані щодо загальної швидкості VBR-індукованої іонізації для рідбергівських (a) nS станів and та (b) nD станів атому натрію ($T=300K$): Експеримент (кола та квадратики); Теорія: удосконалена квазікласична модель Veterov et al (безперервна лінія, New J. Phys. 11, 013502 (2009) [55,56]; наша теорія (переривчаста лінія) Зазначимо, що для визначення додаткових величин W_R, W_{mix} використані визначення [55].

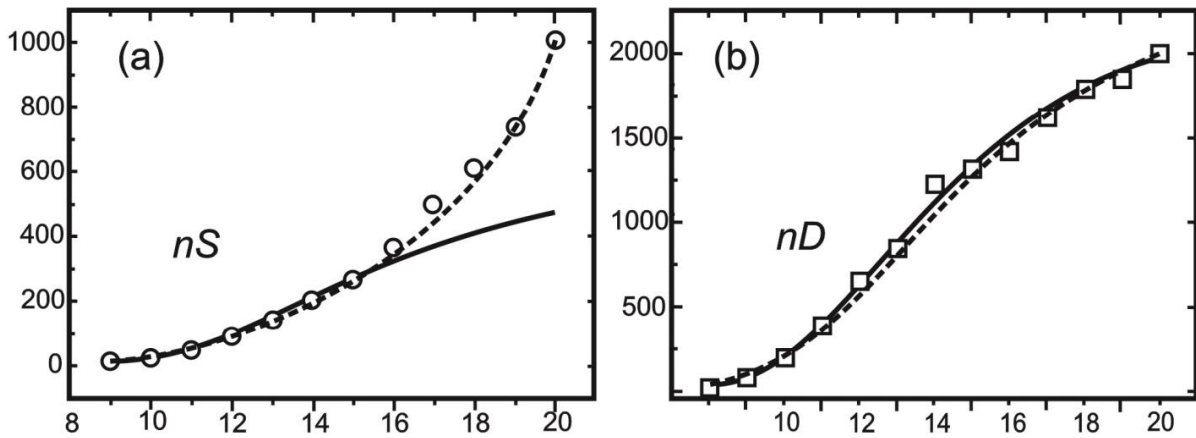


Рисунок 3.4 Загальна швидкість VBR-індукованої іонізації для рідбергівських (а) nS станів та (б) nD станів атому натрію ($T=300K$): Експеримент (кола та квадратики); Теорія: удосконалена квазікласична модель Vetterov et al (безперервна лінія, *New J. Phys.* 11, 013502 (2009);); наша теорія (переривчаста лінія)

Аналіз даних наведених на рис.3.4 показує, що, по-перше, обидві теорії досить добре описують експериментальні дані для nS станів та nD станів атому натрію з n до 15, але далі спостерігається досить суттєве відхилення даних квазікласичного обчислення від експерименту. Найбільш адекватне пояснення цього важливого факту надали Vetterov et al у своїх досить потужних роботах [55,56], пов'язавши відхилення квазікласичної теорії від експерименту надто важливим значенням обмінно-кореляційних поправок, зокрема, для nS станів.

Фактично для nS станів виникає певна аномалія, оскільки орбітали для шуканих станів достатньо глибоко проникають в атомний остов, що викликає досить сильну взаємодію з ним. Додатковим фактором є відома обставина, а саме, квантові дефекти для цих станів є досить великими, в той час як для nD станів атому натрію картина принципово інша. В нашій теорії шукані ефекти враховані досить ретельно й коректно, у зв'язку з чим теорія дає результати у добрій згоді з шуканим експериментом. В таблиці 3.11 ми наводимо наші теоретичні дані щодо ефективного часу життя при різних температурах $T=300, 600K$ для різноманітних nS, nP, nD (значення квантова числа досить великі) рідбергівських станів в спектрі атому Na.

Таблиця 3.11

Наші теоретичні дані для ефективного часу життя (нс) для різноманітних nS , nP , nD рідбергівських станів в спектрі атому Na для різних $T=300, 600K$

n	$T= 300 K$		$T= 600 K$	
	$P_{1/2}$	$D_{3/2}$	$P_{1/2}$	$D_{3/2}$
L_j	$P_{3/2}$	$D_{5/2}$	$P_{3/2}$	$D_{5/2}$
30	136.3	23.1	25.9	14.11
	135.6	23.3	25.8	14.12
40	264.4	53.9	46.2	28.60
	263.8	54.1	46.1	28.61
50	435.9	100.9	72.7	48.22
	433.7	100.1	72.6	48.32
60	653.2	168.7	105.0	73.36
	659.9	168.9	104.9	73.38
70	912.9	258.8	142.9	103.8
	909.5	258.9	142.7	103.9
80	1219.2	373.3	186.9	140.0
	1216.0	373.5	186.8	140.1

На закінчення цього підрозділу ми також коротко наведемо результати аналізу часових рядів (а) залежностей населеності рівнів $18s$, $17p$ та вище лежачих рівнів Na після дії лазерного імпульсу, а також (б) залежностей населеності рівня $18p$ та вище лежачих рівнів Na в атомних VBR-експериментах Gallagher-Cooke [41,42]. Така постановка уявляється за теперішнього часу дуже актуальною і мотивована, по-перше, у зв'язку із інтенсивними дослідженнями нового в стандартній оптиці та спектроскопії феномену квантового (оптичного) хаосу, і в т.ч., можливого прояву ефектів квантового хаосу в спектральній динаміці іонізації рідбергівських атомів в мікрохвильовому полі, по-друге, в роботах, зокрема, з нашою участю було розроблено удосконалений хаос-динамічний підхід до чисельного дослідження характеристик хаосу в квантових, в т.ч., рідбер-

гівських системах, який серед всього іншого включає низку методів нелінійного аналізу і теорії систем та хаосу, зокрема, таких як метод мультифракталів та вейвлет-аналіз, алгоритми на основі автокореляційних функцій та середньої взаємної інформації, методи кореляційного інтегралу та хибних найближчих сусідів, аналіз на основі топологічних, динамічних інваріантів, зокрема, показників Ляпунова, ентропії Колмогорова та інші (підхід реалізовано як комп'ютерний код "Geomath") [138,184,206-208]. Дослідження часових рядів на основі методів [138,184,206-208] показало у випадку (b) залежностей, в принципі, очевидну відсутність будь-яких елементів хаосу. У випадку (a) залежностей, ситуація значніше ускладнилася. Аналіз відповідних рядів (з часовим інтервалом 2 нс; число точок 4800; повний часовий інтервал 9,6 мкс), оцінка топологічних інваріантів, зокрема, кореляційної розмірності ($d_2=1.4$), показників Ляпунова λ_α ($\lambda_1=+0.113$, $\lambda_2=-0.0001$), ентропії Колмогорова ($K_{\text{entr}}=0.113$) тощо показують, що елементи слабого хаосу, цілком можливо, можуть спостерігатися в поведінці розглянутих характеристик, зазначимо, у повній аналогії із поведінкою відповідних поляризаційних (населеностей) залежностей для двоатомних молекул в мікрохвильовому полі. Тем не менш, для більш надійного висновку потрібно мати більш докладні та довгі, на відміну від [42в], часові ряди відповідних часових залежностей населеності рівнів РА.

3.3.2 Результати обчислення величин ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрах калію та калій-подібного іону кальцію

В таблицях 3.12 та 3.13 ми наводимо теоретичні та експериментальні дані для часу життя групи станів нейтрального калію: Експериментальні дані (Ехр.; D. Hart, J. Atkinson, J. Phys. В **19**, 43 _1986) і дані теоретичних обчислень: DF, $PTDF^{SD}$ – багаточастинкова ТЗ з DF "0" наближенням Safronova et al, модельні обчислення QA-MP: Hart-Atkinson та Theodosiou [62,77,96,97], а результати наших обчислень.

Таблиця 3.12

Теоретичні та експериментальні дані часу життя (нс) для групи nS, nP станів в спектрі атому калію (див. текст)

Рівень	DF	PTDF ^{SDc}	QA-MP	Our	Exp.
5s _{1/2}	40.3	42.5	42.5	41.9	-
6s _{1/2}	78.2	81.4	88	87.4	88±2
7s _{1/2}	143.4	148.8	158	156.2	155±6
8s _{1/2}	241.6	250.7	264	248.6	238±4
9s _{1/2}	379.3	393.6	414	392.8	384±14
10s _{1/2}	563.2	584.7	614	581.9	575±26
11s _{1/2}	797.4	828.9	872	825.5	783±50
12s _{1/2}	982.0	1034.6	1191	1124.6	1148±42
4p _{1/2}	21.7	26.8	26.8	27.1	26.69±0.05
4p _{3/2}	21.5	26.5	26.5	26.7	26.34±0.05
5p _{1/2}	116.2	137.1	127.1	137.4	137.6±1.3
5p _{3/2}	113.6	133.9	124.0	135.1	134±2
6p _{1/2}	295.0	340.7	321.7	342.6	344±3
6p _{3/2}	287.7	332.0	312.8	334.5	333±3
7p _{1/2}	589.3	648.6	619.8	627.9	623±6
7p _{3/2}	573.9	632.0	601.8	602.6	592±8
8p _{1/2}	1037.5	1077.2	1020.2	1033.6	
8p _{3/2}	1009.2	1050.2	1010.5	1024.1	
9p _{1/2}	1675.7	1652.0	1607.5	1618.5	
9p _{3/2}	1628.3	1611.2	1561.3	1572.3	
10p _{1/2}	2538.9	2397.6	2345.8	2355.8	
10p _{3/2}	2464.8	2338.9	2279.4	2290.1	
11p _{1/2}	3610.4	3293.8	3267.5	3278.4	
11p _{3/2}	3501.0	3212.9	3173.4	3183.9	
12p _{1/2}	4323.6	3791.2	4402.9	4355.2	
12p _{3/2}	4178.8	3691.7	4279.78	42.28.9	

Таблиця 3.13

Теоретичні та експериментальні дані часу життя (нс) для групи nD станів в спектрі атому калію (див. текст)

Рівень	DF	PTDFSDc	QA-MP	Our	Exp.
3d _{3/2}	35.7	41.9	39	39.8	42±3
3d _{5/2}	36.2	42.5	45.8	45.9	
4d _{3/2}	218.7	289.4	285.9	287.4	
4d _{5/2}	223.9	293.9	291.2	290.8	
5d _{3/2}	732.7	653.1	579	575.9	572±14
5d _{5/2}	751.5	650.8		572.4	
6d _{3/2}	1567.9	925.7	1085	831.2	807±20
6d _{5/2}	1597.2	913.7		820.6	
7d _{3/2}	2605.3	1231.9	1403	1213.1	1201±26
7d _{5/2}	2633.1	1212.7		1194.6	
8d _{3/2}	3820.2	1627.0	1742	1612.5	1533±80
8d _{5/2}	3838.0	1600.3		2592.4	
9d _{3/2}	5239.7	2127.1	2151	2105.3	2000±140
9d _{5/2}	5242.7	2091.7		2074.6	
10d _{3/2}	6491.1	2586.3	2808	2401.9	2268±146
10d _{5/2}	6474.6	2542.8		2360.5	

Примітка: Експ.-модель: D. Hart, J. Atkinson, J. Phys. B **19**, 43 (1986);

Модельні обч.: C. Theodosiou, Phys. Rev. A **30**, 2881 (1984);

PTDF – M.Safronova-U.Safronova, Phys.Rev.A.**78**, 052504 (2008)

Аналіз результатів таблиць 3.12,3.13 показує, по-перше, що урахування релятивістських та кореляційних поправок, й зокрема, обмінно-поляризаційних, має суттєве значення для точності обчислення відповідних часів життя, по-друге, урахування впливу теплового випромінювання зменшує значення часу життя. В цілому, результати нашої теорії знаходяться у фізично реалістичній згоді із даними експерименту. В таблицях 3.14 та 3.15 ми наводимо теоретичні та експериментальні дані для часу життя групи станів одноразово іонізованого

атому кальцію: Експериментальні дані (Exp.; D. Hart, J. Atkinson, J. Phys. В 19, 43 _1986) і дані теоретичних обчислень: DF, PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF “0” наближенням Safronova etal; модельні обчислення QA-MP: Hart-Atkinson та Theodosiou [62,77,96,97], а результати наших обчислень.

Таблиця 3.14

Теоретичні та експериментальні дані часу життя (нс) для групи nD станів в спектрі іону кальцію (див. текст)

Рівень	MP**	QDM**	PTDF ^{SDc}	QA-MP*	Our	Exp.
5s _{1/2}	2.85	4.50	3.91	4.15	4.19	4.3(4)
6s _{1/2}	4.98	7.25	6.39	6.77	6.80	
7s _{1/2}	8.60	12.0	10.63	11.26	11.29	
4p _{1/2}	6.62	6.54	6.88	6.98	7.03	7.098(20)
4p _{3/2}	6.62	6.54	6.69	6.93	6.95	6.924(19)
5p _{1/2}	29.3	32.8	35.4	36.20	36.22	
5p _{3/2}	29.3	32.8	34.8	35.25	36.27	
6p _{1/2}	85.2	91.0	89.0	100.25	94.57	
6p _{3/2}	85.2	91.0	90.0	99.67	95.52	
4d _{3/2}	4.09	2.84	2.83	2.87	2.91	2.9(3)
4d _{5/2}	4.09	2.84	2.85	2.89	2.95	3.1(2)
5d _{3/2}	7.00	5.63	6.16	6.15	6.16	4.3(2)
5d _{5/2}	7.00	5.63	6.21	6.20	6.22	
4f _{3/2}	1.43	4.18	3.55	3.89	3.90	
4f _{5/2}	1.43	4.18	3.54	4.90	4.91	

Примітка: *Theodosiou С.Е., Phys.Rev.A.-1989.-Vol.39.-P.4880-4888.

** Glukhov I., Nikitina E., Ovsiannikov V., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49 (2016) 035003;

Висновки до аналізу результатів, наведених у таблиці 3.14, є аналогічними висновкам до даних таблиць 3.12,3.13, як стосовно ролі релятивістських та обмінно-поляризаційних ефектів, так й урахування впливу теплового випромінювання на часи життя.

3.3.3 Результати обчислення величин ефективного часу життя для рідбергівських станів в спектрах атомів рубідію та цезію

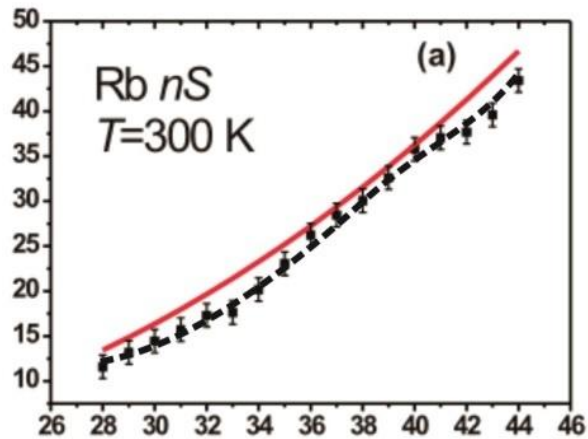
В таблиці 3.15 ми наводимо наші теоретичні дані (Our) значення часів життя (в нс) групи декотрих збуджених станів атому рубідію, а також експериментальні дані та альтернативні теоретичні результати, одержані на основі різних підходів: кулонівське наближення (QA) та MP, і $PTDF^{SD}$ (багаточастинкова T3 з DF^{SD} нульовим наближенням) плюс дані $PTDF^{SDc}$ цього методу з компіляційним внеском; MP-REA – метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу (дані з робіт [37,96,99,138,161-163]). Аналіз даних таблиці 3.15 показує, що погрішність обчислення часу життя різних рівнів в атомі рубідію очевидно залежить від акуратності, послідовності та коректності урахування основних релятивістських та кореляційних поправок, й насамперед, обмінно-поляризаційних. В цілому, результати нашої неемпіричної релятивістської теорії знаходяться у фізично реалістичній згоді із даними експерименту, принаймі значно кращій, ніж декотрі інші альтернативні теоретичні підходи. Це ж стосується й впливу теплового випромінювання зменшує значення часу життя. Також слід звернути увагу на ту обставину, що для P станів роль обмінно-кореляційних поправок є значно більш суттєвою, чим, скажемо для D станів.

Далі наведемо результати обчислення ефективного часу життя рідбергівських станів атому рубідію в залежності від температури теплового випромінювання. На рисунку 3.5 ми наводимо теоретичні дані (переривчаста лінія) щодо залежності величин ефективного часу життя для групи рідбергівських (а) nS, (b) nP та (c) nD станів атому рубідію при температурі $T=300K$), а також експериментальні дані – кола (Nascimento V.A., Caliri L.L., de Oliveira A.L., et al, Phys.Rev.A 74, 054501(2006) [61]) і дані альтернативного теоретичного обчислення на основі удосконаленої квазікласичної моделі Бетерова та інш. – безперервна лінія (Beterov I., Ryabtsev I., Tretyakov D., Phys.Rev. A 79, 052504 (2009) [54]). Нами отримані відповідні значення часів життя рівнів із значеннями головного квантового числа n аж до 100.

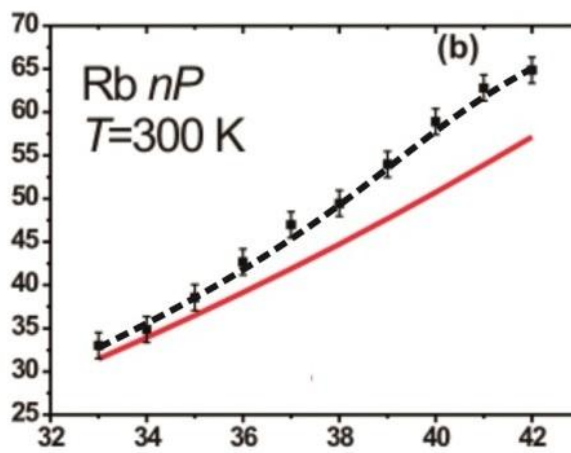
Таблиця 3.15

Наші теоретичні дані (Our) значення часів життя (в нс) групи декотрих збуджених станів атому рубідію, а також експериментальні дані та альтернативні теоретичні результати, одержані на основі різних підходів: кулонівське наближення (QA) та MP, і PTDF^{SD} (багаточастинкова ТЗ з DF^{SD} нульовим наближенням) плюс дані PTDF^{SDc} цього методу з компіляційним внеском; MP-REA – метод модельного потенціалу в межах енергетичного підходу (дані з робіт [37,96,99,138,161-163]).

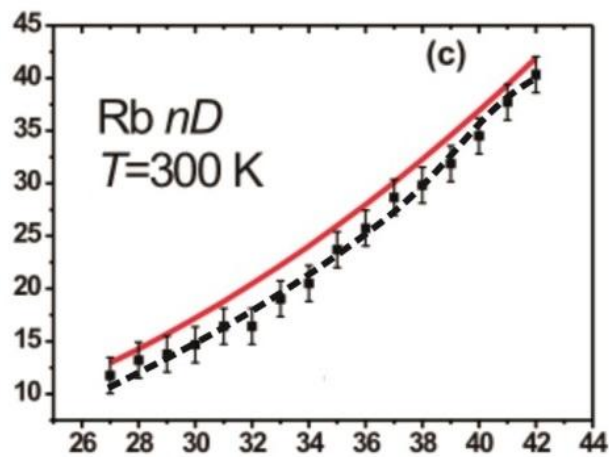
Рівень	QA-MP	PTDF ^{SD}	PT-DF ^{SDc}	MP-EA	Our	Exp.
6s _{1/2}	-	45.4	45.4	45.5	45.5	45.57(17)
7s _{1/2}	-	88.3	88.3	88.1	88.2	88.07(40)
8s _{1/2}	-	161.8	161.9	161.4	161.5	161(3)
9s _{1/2}	266.36	-	271.7	262.1	262.1	253(14)
10s _{1/2}	417.84	-	426	421.3	426.4	430(20)
6p _{1/2}	-	123	122.5	124.1	124.1	125(4)
6p _{3/2}	-	113	112.4	112.1	112.6	112(3)
7p _{1/2}	-	280	277.8	274.3	274.1	272(15)
7p _{3/2}	-	258	255.2	249.0	248.8	246(10)
8p _{1/2}	-	508	501.0	497.4	496.9	
8p _{3/2}	-	471	464.2	456.2	455.1	400(80)
9p _{1/2}	-	-	-	796.4	795.6	
9p _{3/2}	-	-	-	743.6	742.7	665(40)
10p _{1/2}	-	-	-	964.2	963.8	
10p _{3/2}	-	-	-	921,0	920.5	
7d _{3/2}	331.08	-	339.5	336.2	340.5	345(9)
7d _{5/2}	319.57	-	327.0	324.8	328.1	325(22)
8d _{3/2}		-		488.3	490.4	515(30)
8d _{5/2}		-		431.1	432.8	421(25)



(a)



(b)



(c)

Рисунок 3.5 Залежність величини ефективного часу життя для групи рідбергівських (a) nS , (b) nP та (c) nD станів атому рубідію при температурі $T=300$ K: Експериментальні дані Vagnato V et al - кола; Теоретичні дані: безперервна лінія - дані обчислення на основі удосконаленої квазікласичної моделі Бетерова та інш.; переривчаста лінія – дані нашої теорії.

Прим: Exp.- Nascimento V.A., Caliri L.L., de Oliveira A.L., et al, Phys.Rev.A **74**, 054501(2006);
Квазікласика: Beterov I., Ryabtsev I., Tretyakov D., Phys.Rev. A **79**, 052504 (2009);

На рисунку 3.6 наведені дані про швидкості BBR іонізації для рідбергівських (a) nS , (b) nD станів атому Rb: безперервні лінії (1) і (3) – дані обчислень в межах удосконаленої квазікласичної моделі Veterov et al (фор-ла 1.16) $T=300,600K$ відповідно; переривчаті лінії (2) і (4) – дані на основі квазікласичної моделі D'yachkov-Pankratov для $T=300,600K$ [54,55,46]; точкові лінії (5) і (6) – дані нашої теорії $T=300,600K$.

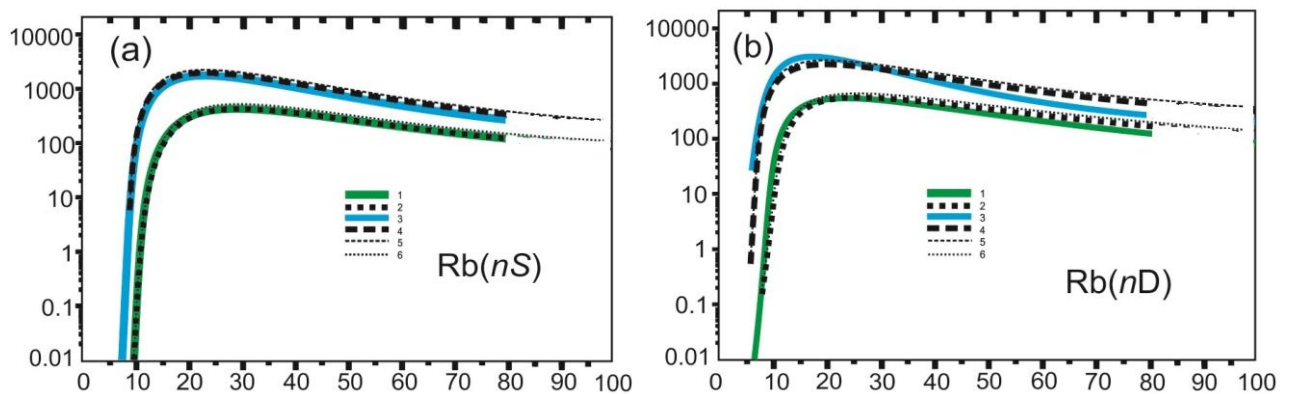


Рисунок 3.6 – Швидкості BBR іонізації для рідбергівських (a) nS , (b) nD станів атому Rb: безперервні лінії (1) і (3) – дані обчислень в межах удосконаленої квазікласичної моделі Veterov et al (фор-ла 1.16) $T=300,600K$ відповідно; переривчаті лінії (2) і (4) – дані на основі квазікласичної моделі D'yachkov-Pankratov для $T=300,600K$; точкові лінії (5) і (6) – дані нашої теорії $T=300,600K$.

Варто також додати, що для температури $T=300$ аналогічні даним рис.3.6 отримані також в інших роботах, напр., [37,49,60,77], де використаний метод квантового дефекту та модельного потенціалу. На кінець, на рисунку 3.7 наведені наші дані про швидкості BBR іонізації для рідбергівських (a) nS , (b) nD станів атому цезію. Відзначимо, що як й у випадку із рубідієм отримані дані знаходяться у досить добрій кореляції із даними квазікласичних обчислень Veterov et al [54,55], маючи, однак, для декотрих станів деякі чисельні відмінності, аналогічні відмінностям рис.3.5. Варто також додати, що дані перелічених

вище робіт по швидкостям іонізації РА в BBR полі приводяться в літературі в переважній

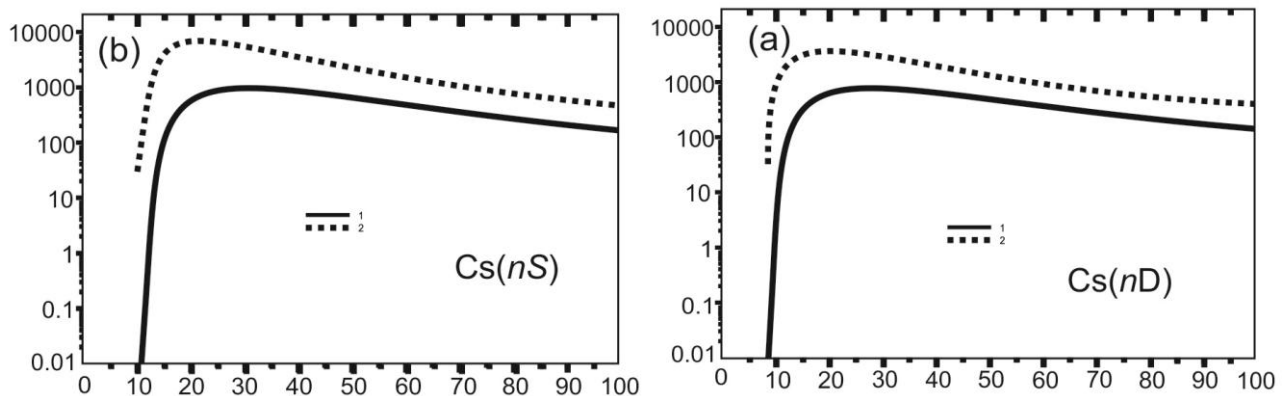


Рисунок 3.7 –Швидкості BBR іонізації для рідбергівських (b) nS , (a) nD станів атому цезію (наші дані): (1), (2) відповідно для $T=300K$ та $T=600K$.

більшості для рідбергівських станів з $n < 40$, за виключенням робіт Veterov et al, де розглядалися рідбергівські стани з n до 80. В нашій роботі вперше отримані відповідні дані і для вище розташованих рідбергівських станів.

Аналізуючи отримані результати доречно зупинитись й на деяких фізичних аспектах явища, зокрема, неважко зрозуміти, що по-перше, чим вище температура тим більше є швидкість іонізації атому під дією BBR випромінювання [55]. Має місце максимум в залежності швидкості від головного квантового числа очевидно, пов'язаний із співвідношенням з порогом іонізації, меншим або рівним максимуму в частотній залежності густини числа теплових фотонів $|E_{nl}| \sim 1.58kT$. Як неважко з'ясувати для $T=300K$ шуканий максимум знаходиться в околі $n \sim 25$ (для різних станів Na, K, Rb, Cs з великими квантовими дефектами), в той час як для $T=600K$, n менше. В цілому аналіз даних наведених на рис.3.5,3.6 показує, що, по-перше, квазікласична і наша квантова теорії досить добре описують експериментальні дані для nS станів та nD станів атому рубідію але в той же час має місце відхилення даних квазікласичного обчислення від експерименту. Як вказано вище, найбільш адекватне пояснення цього важливого факту надали Veterov et al у своїх досить потужних роботах [50-55],

пов'язавши відхилення квазікласичної теорії від експерименту надто важливим значенням обмінно-кореляційних поправок. Добре відомо, що із зростанням заряду ядра у лужних атомах роль поляризаційного ефекту різко зростає. В нашій теорії ці ефекти враховані досить ретельно й коректно, у зв'язку з чим теорія дає результати у добрій згоді з шуканим експериментом.

3.4 Висновки до розділу 3

В даному розділі, ми привели дані тестових обчислень одно-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій (іонізації), редукованих дипольних матричних елементів (радіаційних амплітуд) для переходів головних серій в спектрах лужних атомів Na, K, Rb, Cs, сил осциляторів $3s-3p, 3p-3d$ переходів в *Na*-подібних іонах *SVI*, *CIVII*, енергій, імовірностей ряду переходів, у т.ч. E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 квадрупольного переходу $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в іоні Hg^+ тощо у вільному стані, і головне, дані обчислень радіаційних амплітуд, ефективного часу життя, швидкостей ВВР-іонізації в залежності від головного квантового числа, при різних температурах і т.ін. вказаних атомів у рідбергівських станах у полі теплового випромінювання.

З метою аналізу можливостей нової теорії ми виконали докладне порівняння окремих наших даних для ефективного часу життя, швидкості ВВР-іонізації для окремих рідбергівських nS , nP , nD Na, Rb при $T=300K, 500K$ (одночасно виконаний нами хаос-динамічний аналіз часових залежностей населеності рівнів $18s, 17p$ та вище лежачих рівнів Na в атомних ВВР-експериментах Gallahger-Cooke і оцінка топологічних інваріантів виявили вперше можливу наявність елементів слабого хаосу) тощо з даними відповідно прецизійних експериментів Gallakher-Cookt (Virdginia group), Beterov-Ryabtsev et al (Novosibirsk), Nascimento-Caliri-de Oliveira etal (São Paulo), яке підтвердило досить добре узгодження теорії з даними вказаних, до речі, недавніх досить прецизійних експериментів. Далі, ми навели (у чисельній та графічній формі) дані масових

обчислень (частина даних отримана взагалі вперше) ефективного часу життя, швидкості ВВР-іонізації для рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів атомів Na, K, Ca⁺, Rb, Cs, Hg⁺ в температурному інтервалі 0-600К, у т.ч. T=300,500К), причому для низки станів провели порівняння з даними удосконалених квазікласичних обчислень Beterov et al, Glukhov-Ovsiannikov, модельних обчислень Kleppner et al, Theodosiou та інших; на кінець, ми виявили ключові фізичні особливості ВВР-іонізації рідбергівських атомів та установили основні фактори, які обумовлюють достатньо добре узгодження нової релятивістської теорії з експериментом, і пов'язані, насамперед, з використанням оптимізованих базисів релятивістських орбіталей, виконанням принципу калібровочної інваріантності при обчисленні радіаційних амплітуд (ширин), ефективним акуратним урахуванням основних обмінно-кореляційних ефектів, у тому числі, ефекту поляризації остову та інші.

ВИСНОВКИ

Запропоновані та реалізовані в роботі нові послідовні релятивістські методи обчислення енергетичних та спектральних характеристик релятивістських рідбергівських атомів у полі теплового VBR- випромінювання і одержані на їх основі нові дані для радіаційних амплітуд, ефективних часів життя, швидкостей VBR іонізації закладають основи принципово нового релятивістського підходу у сучасній оптиці та спектроскопії рідбергівських атомів в VBR-полі.

Основні результати роботи полягають у наступному:

1. Вперше в спектроскопії багатоелектронних РА в полі VBR випромінювання розвинутий новий релятивістський *ab initio* підхід до визначення і обчислення енергетичних і спектральних характеристик, який базується на узагальненому релятивістському енергетичному підході (у калібрувальній-інваріантній версії методу Glushkov-Ivanov і S-матричному Gell-Mann-Low формалізмі), новій версії релятивістської ТЗ з гамільтоніаном Dirac-Breit-Kohn-Sham з новою схемою побудови оптимізованого 1-електронного представлення з використанням фундаментального принципу мінімізації калібровочно-неінваріантних ΔE_{inv} внесків у радіаційні ширини рівнів.
2. В межах релятивістської теорії РА в VBR полі вперше розроблені та реалізовані ефективні процедури коректного урахування основних обмінно-кореляцій-них ефектів (взаємного екранування частинок, обмінно-поляризаційна взаємодія квазічастинок через поляризуємий остов, а також їх взаємодія з фотонним вакуумом через остов, ітераційні поправки до масового оператора, некулонівське групування рідбергівських рівнів та ін.), у т.ч., новий підхід до обчислення радіаційних амплітуд (з виконанням принципу калібровочної інваріантності) з введенням у матричні елементи обмінно-поляризаційного оператора, а також узагальнена схема Dirac-Sturm для урахування станів безперервного спектру.

3. На основі нового підходу проведені тестові обчислення низки енергетичних, спектральних параметрів атомів, зокрема, 1-електронних $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$ енергій (іонізації), радіаційних амплітуд для переходів головних серій в спектрах лужних атомів Na, K, Rb, Cs, 3s-3p, 3p-3d переходів в Na-подібних іонах SVI, CIVII енергій, радіаційних амплітуд E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$, E2 переходу $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в іоні Hg^+ та ін. у вільному стані, проведено порівняння отриманих даних з даними з даними альтернативних теорій (багаточастинкової ТЗ з RHF, DF і DF^{SD} нульовим наближеннями), і показано, що для забезпечення адекватної точності опису шуканих параметрів є обов'язковим прецизійне урахування релятивістських, обмінно-кореляційних ефектів ($\Delta E_{ninv} \sim 1\%$).

4. На основі нового підходу виконане обчислення і проведено докладне порівняння величин ефективного часу життя, швидкості VBR-іонізації для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів Na, Rb при $T=300K, 500K$ (одночасно виконаний нами хаос-динамічний аналіз часових залежностей населеності рівнів 18s, 17p та вище лежачих рівнів Na в атомних VBR-експериментах Gallagher-Cooke, оцінка топологічних інваріантів вказали вперше на можливу наявність елементів слабого квантового хаосу) з даними відповідно прецизійних експериментів Gallagher-Cooke (Virginia), Beterov-Ryabtsev et al (Novosibirsk), Nascimento et al (São Paulo), яке демонструє досить добре узгодження нашої теорії з експериментальними; аналіз температурної залежності швидкостей іонізації PA 17D Na і порівняння з модельними даними Kleppner et al, обчисленими на основі кулонівського наближення показує, що при температурах вище 150K дані нашої теорії і кулонівської моделі Kleppner et al дуже близькі один до одного і достатньо добре узгоджуються з експериментальними вимірюваннями, але при температурі нижче 150K має відхилення кулонівської моделі від даних експерименту; наша теорія дає прийнятну згоду з експериментом, що обумовлено урахуванням обмінно-поляризаційних ефектів, ефекту некулонівського групування рідбергівських рівнів тощо.

5. На основі нового підходу отримані прецизійні теоретичні (у переважній більшості вперше) дані для радіаційних амплітуд, ефективного часу життя рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів атомів Na, K, Ca⁺, Rb, Cs, Hg⁺ в широкому температурному інтервалі 0-600K; для низки станів проведено порівняння з даними удосконалених квазікласичних обчислень Veterov et al, Glukhov-Ovsiannikov, модельних обчислень Kleppner et al, Theodosiou та ін., яке свідчить про досить добре узгодження з квазікласичними даними, за винятком ряду виключень; зокрема, для рідбергівських станів з $n=25-45$ спостерігається відхилення квазікласичних даних від експерименту, що пов'язано з неврахуванням суттєвого внеску обмінно-поляризаційних ефектів, які в нашій теорії враховані достатньо коректно. Отримані дані показують фізично обґрунтоване, часом різке, зменшення під впливом VBR випромінювання величин часів життя, причому для р станів ефект значно сильніше, ніж для інших.

6. На основі нового підходу отримані прецизійні теоретичні (для ряду станів вперше) дані для швидкості VBR-іонізації рідбергівських $nS_{1/2}$, $nP_{1/2,3/2}$, $nD_{3/2,5/2}$ ($n=5-100$) станів Na, K, Ca⁺, Rb, Cs в широкому температурному інтервалі 0-600 K; для ряду станів проведено порівняння з даними удосконалених квазікласичних обчислень Veterov et al, та ін., яке свідчить про досить добре узгодження з квазікласичними даними, за винятком групи рідбергівських станів, для яких мають місце відхилення від експерименту, пов'язані з необхідністю акуратного урахування обмінно-кореляційних ефектів; максимум швидкості VBR іонізації знаходиться в околі $n \sim 20-25$ (для різних станів Na, K, Rb, Cs з великими квантовими дефектами) при $T=300K$ й при більших температурах зсувається в сторону менших значень n .

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем/ Глушков А.В.- Одесса: Астропринт, 2008.- 700С.
2. Grant I.P., Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules/ Grant I.P.- Oxford, 2008.-650P.
3. 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.31-54.
4. 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.
5. Басов Н.Г., Оптические стандарты частоты/ Басов Н.Г., Летохов В.С.//Усп.физ наук. (Sov.Phys.Uspekhi).-1969.-Т.11.-С.855-880;
6. Ludlow A.D., Optical atomic clocks/ Ludlow A.D., Boyd M.M., Jun Ye, Peik E., Schmidt P.O.//Rev.Mod.Phys. 2015.-Vol.87-P.637-701.
7. Godun R. M. , Frequency Ratio of Two Optical Clock Transitions in $^{171}\text{Yb}^+$ and Constraints on the Time Variation of Fundamental Constants/ Godun R. M. , Nisbet-Jones P. B. R., Jones J. M., King S. A., Johnson , L. A. M, Margolis H. S., Szymaniec K., Lea S.N., Bongs K., Gill P.//Phys.Rev.Lett.-2014.- Vol.113.-P. 210801.
8. Летохов В.С., Лазерная оптика нейтральных атомных пучков/Летохов В.С., Балыкин В.И.// Усп.физ наук. (Sov.Phys.Uspekhi).-1990.-Vol.33.-P.79-85.
9. Ivanov L.N., Autoionization states of multi-electron atoms/ Ivanov L.N., Letokhov V.S.//Com. Mod. Phys. D. Atom., Mol.Phys.-1985.-Vol.4.-P.169-184;
- 10.Glushkov A.V., Nuclear quantum optics/ Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S.//Preprint ISAN, USSR Academy of Sciences, NAS-3, Moscow (1991).

11. Кондратенко П.О., Фотохімічна дія світла/ Кондратенко П.О.- Київ: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”. - 2005. – 401С.
12. Glushkov A.V., 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.
13. Glushkov A.V., 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: 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.
14. Глушков А.В., Радиационный распад атомных состояний. Обобщенный энергетический подход/ Глушков А.В., Иванов Л.Н., Иванова Е.П.// В кн.: Автоионизационные явления в атомах-М.: Изд-во МГУ.-1986.-С.58-160.
15. Glushkov A.V., Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// *Phys. Lett.A.*-1992.-Vol.170.-P.33-38.
16. Driker M.N., 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;
17. Ivanov L.N., Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra/Ivanov L.N., Ivanova E.P.// *Atom.Data Nucl .Data Tab.*-1979.-Vol.24.-P.95-121;
18. Ivanova E.P., High-order corrections in relativistic perturbation theory with model zero approximation: F- and Ne-like ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E.// *Physica Scripta.*-1985.-V.32,N4.-P.512-524; Glushkov

- A.V., Relativistic polarization potential of a many-electron atom/Glushkov A.V.// Soviet Phys.Journ.-1990.-Vol.33(1).-P.1-8.
- 19.Ivanova E.P., Theoretical study of multicharged ions spectra of F-, Ne- isoelectronic sequences/ Ivanova E.P., Glushkov A.V.// Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer. (USA).-1986.-Vol.36, N2.-P.127-145.
- 20.Ivanov L.N. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths/ Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.//Phys.Rev.A.-1993.-Vol.48.-P.4365-4374; Иванов Л.Н. Метод штурмовских орбиталей в расчетах физических характеристик излучения атомов/ Иванов Л.Н., Иванова Е.П.// ЖЭТФ.-1996.-Т.110.-С.483-498.
- 21.Ivanov L.N. 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;
- 22.Glushkov A.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // Europ.Phys.Journ. ST.-2008.-Vol.160.-P.195-204.
- 23.Glushkov A.V. Spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear effects in multiatomic molecules/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V.// Molec. Physics (UK).-2008.-Vol.106.-N9,10.-P.1257-1260.
- 24.Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле/ Глушков А.В.-Киев: КНТ, 2005.-450С.
- 25.Baldwin G.G. Approaches to the development of gamma ray lasers / Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. // Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742.
- 26.Гольданский В.И. О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер/ В.И. Гольданский, В.С. Летохов //ЖЭТФ.-1974.-Т.67,№2(8).-С. 513-516;
- 27.Иванов Л.Н. Спектр электронно-ядерных гамма переходов ядра в атоме/ Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, // ЖЭТФ.-1987.-Т.93,№2(8).-С.396-402;

28. Glushkov A.V. Nuclear quantum optics/ Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S // Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Acad. Sci.(ISAN), AS N4, 1991.-16P.
29. Ali Nadeem Ali, Photoionization from the 5p $2P_{3/2}$ state of rubidium/ Nadeem Ali, Haq S.U.//Phys. Rev. A.-2011.-Vol.83.-P.063404 (8p.); Piotrowicz M., Measurement of the electric dipole moments for transitions to rubidium Rydberg states via Autler-Townes splitting/ Piotrowicz M., MacCormick C., Kowalczyk A., Bergamini S., Beterov I., Yakshina E.A. // arXiv:1103.0109v2 [quant-ph] 14 Mar 2011.
30. Marinescu M., Two-photon excitation of the $5/2$ D states of rubidium/ Marinescu M., Florescu V. and Dalgarno A. //Phys.Rev.A.-1994.-Vol.49(2).-P.2714-2718.
31. Kohn W., Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas/ Kohn W., Sham S.//Phys. Rev.A.-1965.-Vol.137.-P.1697-1710.
32. Глушков А.В., Универсальный квазичастичный энергетический функционал в теории функционала плотности для релятивистского атома/ Глушков А.В.// Опт.Спектр.-1989.-Т.66.-С.31-38; Новый подход в теоретическом определении потенциалов ионизации молекул на основе метода функций Грина/Глушков А.В.// Журн. Физ. химии.-1992.-Т.66,№10.-С.2671-2677.
33. Gidopoulos N.I., Fundamentals of Electron Density, Density Matrix and Density Functional Theory in Atoms, Molecules, Solid State. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics/ Gidopoulos N.I.; Wilson, S. (Eds.).-2004.-Vol.14.-P.1-244.
34. Das M.P., Self-consistent relativistic density-functional theory: Application to neutral U atom and some ions of Li isoelectronic sequence/ Das M.P., Ramana M.V., Rajagopal A.K.//Phys.Rev.A.-1980.-Vol 22.-P.9-13.
35. Глушков А.В. Квазичастичный подход в теории функционала плотности при конечных температурах и динамика эффективного бозе-конденсата/Глушков А.В.// Укр. Физ. журн.- 1993.-Т.38,№8.-С.152-157.
36. Svinarenko A.A., 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.T153-P.01437 (5p.).
- 37.Tkach T.B., Optimized relativistic model potential method and quantum defect approximation in theory of radiative transitions in spectra of multicharged ions/ Tkach T.B.// *Photoelectronics*.- 2012.-Vol.21.-P.14-17.
- 38.Smoot G.F., Detection of Anisotropy in the Cosmic Blackbody Radiation/ Smoot G.F., Gorenstein M.V., Muller R.A.// *Phys. Rev. Lett.*-1977.-Vol.39.-P.898–901.
- 39.Killian T.C., Creation of an ultracold neutral plasma/Killian T.C., Kulin S., Bergeson S.D., Orozco L.A., Orzel C., Rolston S.L.//*Phys. Rev. Lett.*-1999.-Vol. 83.-P.4776–4779.
- 40.Li W., Evolution dynamics of a dense frozen Rydberg gas to plasma/ Li W., Noel M.W., Robinson M.P., Tanner P.J., Gallagher T.F.//*Phys. Rev. A*.-2004.-Vol.70.- P.042713 (10pp.).
- 41.Gallagher T. F., Rydberg atoms./ Gallagher T. F.//*Cambridge Univ.*-1994.-358P.; *Rydberg States of Atoms and Molecules*, Eds. R. F. Stebbings and F.B.Dunning.- Cambridge.-1994.-530P.
- 42.Gallagher T.F., Interactions of Blackbody Radiation with Atoms/ Gallagher T.F., Cooke W.E.//*Phys. Rev. Lett.*-1979.-Vol.42.-P.835–840; Radiative lifetimes of s and d states of potassium/ Gallagher T.F., Cooke W.E.//*Phys.Rev.A*.-1979.- Vol.20.-P.670-680; Effects of blackbody radiation on highly excited atoms/ Gallagher T.F., Cooke W.E.//*Phys.Rev.A*.-1980.-Vol.21.-P.588-598.
- 43.Spencer W.P., Photoionization by blackbody radiation / Spencer W.P., Vaidyanathan A., Kleppner D., Ducas T.//*Phys.Rev.A*.-1982.-Vol.26.-P.1490–1493.
- 44.Burkhardt C.E., Ionization of Rydberg atoms/ Burkhardt C.E., Corey R.L., Garver W.P., Leventhal J.J., Allergini M., Moi L. //*Phys. Rev. A*.-1986.-Vol.34.-P.80–86.
- 45.Lehman G. W., Rate of ionization of H and Na Rydberg atoms by black-body radiation /Lehman G. W.// *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*-1983.-Vol.16.-P.2145-2156.

46. D'yachkov L.G., On the use of the semiclassical approximation for the calculation of oscillator strengths and photoionization cross sections/ D'yachkov L.G., Pankratov P.M.// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-1994.-Vol. 27.-P.461-472.
47. Гореславский С. П., Вероятности радиационных переходов между высоковольтно возбужденными атомными состояниями/ Гореславский С. П., Делоне Н. Б., Крайнов В. П.// *ЖЭТФ*. 1982.-Т.82, вып.6.-С. 1789–1796.
48. Hoogenraad J. H., Rydberg atoms in far-infrared radiation fields I. Dipole matrix elements of H, Li, Rb/ Hoogenraad J. H., Noordam L. D. // *Phys. Rev. A* -1998.-Vol.57.-P. 4533–4545.
49. Miculis K., Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms: II. Theory for nS , nP and nD states with $n = 5-25$ / Miculis K., Beterov I.I., Bezuglov N.N., Ryabtsev I.I., Tretyakov D.B., Ryabtsev I.I., Tretyakov D.B., Klucharev A.N.// *J. of Phys. B: Atom. Mol. and Opt. Phys.*- 2005.-Vol.38,N11.- P.1811-1822.
50. I. I. Ryabtsev, Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms I. Experiment for nS and nD atoms with $n=8-20$, arXiv:physics/ I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov, N. N. Bezuglov², K. Miculis³, A. Ekers//0501088v1 [physics.atom-ph] 18 Jan 2005;
51. Beterov I., Cooper minima in the transitions from low-excited and Rydberg states of alkali-metal atoms/ Beterov I., Mansell C., Yakshina E. et al//arXiv: 1207.3626v1 [phys.atom-ph] 16 Jul 2012.
52. Ryabtsev I.I., Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms: I. Experiment for nS and nD atoms with $n = 8-20$ / Ryabtsev I.I., Tretyakov D.B., Beterov I.I., Bezuglov N.N., Miculis K., Ekers A.,//*J. of Phys. B: Atom. Mol. and Opt. Phys.*- 2005.-Vol.38,N2.-P.379-386.
53. Beterov I.I., Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms III. Experiment and theory for nS and nD states with $n = 8-20$ in crossed atomic beams/ Beterov I.I., Tretyakov D.B., Ryabtsev I.I., Bezuglov N.N., Miculis K., Ekers A., Klucharev A.N.// *J. of Phys. B: Atom. Mol. and Opt. Phys.*- 2005.-Vol.38,N24.- P.4349-4363.

54. Beterov I.I., Quasiclassical calculations of blackbody-radiation-induced depopulation rates and effective lifetimes of Rydberg nS , nP , and nD alkali-metal atoms with $n \sim 80$ / Beterov I.I., Ryabtsev I.I., Tretyakov D.B., Entin V.M.// *Phys. Rev.A.*-2009.-Vol.79.-P. 052504.
55. Beterov I.I., Ionization of Rydberg atoms by blackbody radiation/ Beterov I.I., Tretyakov D.B., Ryabtsev I.I., Entin V.M., Ekers A., Bezuglov N.N.// *New Journ. of Phys.*2009-Vol.11.-P.013052.
56. Glukhov I., Thermal photoionization of Rydberg states in He and alkali-metal atoms/Glukhov I., Ovsianikov V.//*J.Phys.B:At.Mol.Phys.*-2009.-Vol.42.-P.075001.
57. Glukhov I.L., Natural widths and blackbody radiation induced shift and broadening of Rydberg levels in magnesium ions/ Glukhov I.L., Mokhnenko S.N., Nikitina E.A., Ovsianikov V.D. // *Eur. Phys. J. D.*-2015.-Vol.69.-P.1-15.
58. Glukhov I.L., Blackbody-radiation-induced shifts and the broadening of Rydberg states in the ions of group IIa elements/ Glukhov I.L., Nikitina E.A., Ovsianikov V.D. // *J. of Phys. B: Atom. Mol. and Opt. Phys.*- 2016.-Vol.49,N3.-P.035003.
59. Glukhov I.L., Blackbody-Radiation-Induced Decay and Excitation of Rydberg States in Sodium/ Glukhov I.L., Ovsianikov V.D.// *Acta.Phys.Pol.*-2009.-Vol.116(4).-P.528-531.
60. Farley J.W., Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium, alkali-metal atoms/Farley J.W., Wing W.H.//*Phys.Rev.A.*-1981.-Vol.23.-P.2397-2410.
61. Nascimento V.A., Measurement of the lifetimes of S and D states below $n=31$ using cold Rydberg gas/ Nascimento V.A., Caliri L.L., de Oliveira A.L., Bagnato V.S. , Marcassa L.G.//*Phys.Rev.A.*-2006.-Vol.74.-P.054501.
62. Hart D., Atkinson J., Lifetimes of some excited S and D states of potassium// *J.Phys.B.;Atom.Mol.Opt.Phys.*-1986.-Vol.19.-P.43-50.

63. Wenhui Li, Dipole-Dipole Excitation and Ionization in an Ultracold Gas of Rydberg Atoms/ Wenhui Li, P.L. Tanner, and T. F. Gallagher//Phys. Rev. Lett.-2005.-Vol. 94.-P. 173001
64. M. Viteau, Rydberg Excitations in Bose-Einstein Condensates in Quasi-One-Dimensional Potentials and Optical Lattices/ M. Viteau, M. G. Bason, J. Radogostowicz, N. Malossi, D. Ciampini, O. Morsch, E. Arimondo //Phys. Rev. Lett.-2011.-Vol.107.-P. 060402
65. E. J. Galvez, Blackbody-radiation-induced resonances between Rydberg-Stark states of Na/ E. J. Galvez, C. W. MacGregor, B. Chaudhuri, S. Gupta, //Phys. Rev.A.-1997.-Vol.55.-P. 3002-3006.
66. A. Walz-Flannigan, L-changing collisions in cold rydberg gases/ A. Walz-Flannigan, D. Feldbaum, S. K. Dutta, J. R. Guest, G. Raithel // icpeac3: Rinton, October 24, 2001.-P.1-12.
67. M. Viteau, Rydberg excitation of a Bose-Einstein condensate / M. Viteau, M. G. Bason, J. Radogostowicz, N. Malossi, O. Morsch, D. Ciampini, and E. Arimondo//arXiv:1203.1261v1 [physics.atom-ph] 6 Mar 2012.
68. Hildebrandt G.F., Ionization of xenon atoms in selected high Rydberg states by collision with CH_3I , C_7F_{14} , C_6F_6 , and CH_3Br / Hildebrandt G.F., Kellert F.G., Dunning F.B., Smith K.A., Stebbings R F.//J. Chem. Phys.-1978.-Vol.68.-P.1349-1358.
69. Xiaoxu Lu, Rydberg atom spectroscopy enabled by blackbody radiation ionization/ Xiaoxu Lu, Yuan Sun, Metcalf H.//Phys. Rev. A.-2011.-Vol.84.-P.033402
70. Zimmerman M. 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.
71. Zhao J., Measurement of Polarizability of Cesium nD State in Magneto-Optical Trap/J.Zhao, H.Zhang, Z. Feng, X.Zhu, L.Zhang, C.Li, S.Jia//J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 034303 (7P.).

72. van Wijngaarden W.A., Lifetimes and polarizabilities of low lying S,P, D states of francium/ van Wijngaarden W.A., Xia J.// *Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer.*-1999.-Vol.61, N4.-P.557-561;
73. Huang S., Sun Q., Calculation of the Rydberg Energy Levels for Francium Atom/ Huang S., Sun Q. // *Phys.Res.Internat.*-2010.-Vol.33.-P. 203497 (5P.).
74. Weber K. H., Accurate energies of nS, nP, nD, nF and nG levels of neutral cesium/ Weber K. H., Sansonetti C. J. // *Phys.Rev.A.*-1987.-Vol. 35.-P.4650–4660.
75. Weiss A.W., Hartree-Fock line strengths for lithium, sodium and copper isoelectronic sequences/ Weiss A.W.// *J.Quant. Spectr.Rad.Tr.*-1977.- Vol.18.-P.481-491.
76. D. Feldbaum, Spectroscopy of Rydberg Atoms in Non-Neutral Cold Plasmas/ D. Feldbaum, N. V. Morrow, S. K. Dutta, G. Raithel// *Non-Neutral Plasma Physics IV*, ed. F. Andereg et al. (AIP).-2002.-CP606.-P.89-95.
77. Zhi-Gang Feng, Lifetime measurement of ultracold caesium Rydberg states/ Zhi-Gang Feng, Lin-Jie Zhang, Jian-Ming Zhao, Chang-Yong Li and Suo-Tang Jia// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2009.-Vol.42.-P.145303 (5P.);
78. Theodosiou C.E., Lifetimes of alkali-metal—atom Rydberg states/ Theodosiou C.E.// *Phys. Rev. A.*-1984.-Vol.30.-P.2881-2888; Accurate calculation of the 4p lifetimes of Ca⁺//*Phys.Rev.A.*-1989.-Vol.39.-P.4880-4888.
79. Rafac R., Precision lifetime measurements of 6p²P_{1/2,3/2} states in atomic cesium / Rafac R., Tanner C., Livingston A., et al//*Phys.Rev.A.*-1994.-Vol.50.-P.R1976-R1979;
80. Dupret K. Resonances in the Diamagnetic Rydberg Spectrum: Order and Chaos/ Dupret K., Zakrzewski J., Delande D.// *Europhys.Lett.*-1995.-V.31(5).-P.251-256.
81. Cheng T. 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.

82. Wang D. 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.
83. Fielding H. 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.
84. Buchleitner A. Secular motion of the three-dimensional Rydberg states in a microwave field/ Buchleitner A., Delande D.// *Phys.Rev.A*.-1997.-Vol.55.-P.1585-1598.
85. Krug A., Microwave ionization alkali-metal Rydberg states in a realistic numerical experiment/ Krug A., Buchleitner A.// *Phys. Rev. A*.-2002.-Vol.66.-P.053416 (10p.).
86. Koch P.M. Observation of resonances in microwave-stimulated Multiphoton excitation and ionization of highly excited hydrogen atoms/ Koch P.M., Bayfield J.E., Gardner L.D.// *Phys.Rev.Lett.* 1977.-Vol.39.-P.76-80.
87. Gallagher T. F. 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.
88. Gallagher T. F. Classical subharmonic resonances in microwave ionization of lithium Rydberg atoms/ Gallagher T. F., Noel M. W., Griffith M. W. // *Phys. Rev. A*.-2000.-Vol.62.-P.063401-063412.
89. Gallagher T. F. 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.
90. Gallagher T. F. 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.
91. Walther H. From coherent to noise-induced microwave ionization of Rydberg atoms/ Walther H., Benson O., Buchleitner A., Raithel G., Arndt M., Mantegna R.// *Phys.Rev.A*-1995.-Vol.51.-P.4862-4876.

92. Вальтер Г., Одноатомный мазер и другие эксперименты квантовой электродинамики резонатора/ Вальтер Г//УФН. -1996.-Т.166.-С.777-793.
93. Бетеров И. М., Спонтанное и вынужденное излучение ридберговского атома в резонаторе / Бетеров И. М., Лернер П. Б. //УФН. -1989.-Т.139.-С.665-684.
94. Берка Ф. Атомы в астрофизике/ Под ред. Ф.Берка, И. Эйснера, Д. Хаммера И. Персиваль.- М.: Мир.-1986.-340С.
95. Окс Е.А. Спектроскопия плазмы с квазимонохроматическими электрическими полями/ Е.А. Окс. - М.: Энергоатомиздат.-1990.-240С
96. Safronova U.I., Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms/ Safronova U.I., Johnson W., Derevianko A.// Phys.Rev.A.-1999.-Vol.60.-P.4476-4486.
97. Safronova U.I., High-accuracy calculation of energies, lifetimes, hyperfine constants, multipole polarizabilities, and blackbody radiation shift in 39K /Safronova U.I., Safronova M.S.//Phys. Rev. A.-2008.-Vol.78.-P.052504.
98. Safronova M.S., Blackbody radiation shift, multipole polarizabilities, oscillator strengths, lifetimes, hyperfine constants, and excitation energies in Ca^+ / Safronova M.S., Safronova U.I.//Phys. Rev. A.-2011.-Vol.83.-P.012503
99. Safronova M.S., Critically evaluated theoretical energies, lifetimes, hyperfine constants, and multipole polarizabilities in ^{87}Rb / Safronova M.S., Safronova U.I.// Phys.Rev.A.-2011.-Vol.83.-P.052508;
100. Simmons M., Blackbody radiation shift, multipole polarizabilities, oscillator strengths, lifetimes, hyperfine constants, and excitation energies in Hg^+ / Simmons M., Safronova U.I., Safronova M.S. //Phys. Rev. A.-2011.-Vol.84.-P.052510.
101. Safronova U.I., Third-order relativistic many-body calculations of energies, transition rates, hyperfine constants, and blackbody radiation shift in $^{171}\text{Yb}^+$ /Safronova U.I., Safronova M.S. //Phys. Rev. A.-2009.-Vol.79.-P.022512.
102. Safronova M.S., Ytterbium in Quantum Gases and Atomic Clocks: van der-Waals Interactions and Blackbody Shifts/ Safronova M.S., S. G. Porsev, C.W. Clark //Phys. Rev. Lett.-2012.-Vol.109.-P.230802.

103. Dzuba V.A., Atomic properties of superheavy elements No, Lr, and Rf /Dzuba V.A., Safronova M.S., Safronova U.I.//Phys.Rev.A.-2014.-Vol.90.-P.012504.
104. Safronova M.S., , State-insensitive bichromatic optical trapping/ Safronova M.S., , Williams C.J., Clark C.W., //Phys. Rev. A.-2004.-Vol. 69.-P. 022509 (5p.).
105. Mitroy J., Theory and applications of atomic and ionic polarizabilities/ Mitroy J., Safronova M.S., Clark C.W.//arXiv:1004.3567v1 [physics.atom-ph] 20 Apr 2010.
106. M. S. Safronova, Precision Calculation of Blackbody Radiation Shifts for Optical Frequency Metrology/ M. S. Safronova, M. G. Kozlov, and Charles W. Clark //Phys. Rev. Lett.-2011.-Vol.107.-P.143006 (B+, Al+, and In+)
107. Safronova U.I., Relativistic many-body calculation of energies, transition rates, lifetimes, and multipole polarizabilities in Cs-like La III /Safronova U.I., Safronova M.S.//Phys. Rev. A.-2014.-Vol.89.-P.052515.
108. M. S. Safronova, Blackbody-radiation shift in the Sr optical atomic clock/ M. S. Safronova, S. G. Porsev, U. I. Safronova, M. G. Kozlov and C. W. Clark // Phys.Rev.A.-2013.-Vol.87.-P.012509.
109. Porsev S.G., Multipolar theory of blackbody radiation shift of atomic energy levels and its implications for optical lattice clocks/ Porsev S.G., Derevianko A.//Phys. Rev. A.-2006.-Vol.74.-P.020502(R)
110. Middelmann T., High Accuracy Correction of Blackbody Radiation Shift in an Optical Lattice Clock/ Middelmann T., Falke S., Lisdat C., Sterr U.//Phys. Rev. Lett.-2012.-Vol.109.-P.263004.
111. Marinescu M., Radiative transitions and van der Waals coefficients for francium / Marinescu M., Vrinceanu D., Sadeghpour H.P. // Phys. Rev. A.-1998.-Vol.58.-R4259-4262;
112. Kunisz M.D., Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths/ Kunisz M.D.// Acta Phys.Pol.-1982.-Vol.A62.-P.285-296.

113. Gounand F., Calculation of radial matrix elements and Radiative lifetimes for highly excited states of alkali atoms using the Coulomb approximation/Gounand F. //Journ. de Phys.-1979.-Vol.40.-P.457-460.
114. Lindgard A., Transition probabilities for the alkali isoelectronic sequences: LiI, NaI, KI, RbI, CsI, FrI/ Lindgard A., Nielsen S.E.//Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.-1977.-Vol.19.-P.533-633.
115. J. Migdalek, Relativistic oscillator strengths for the Cs isoelectronic sequence and collapse of f and d orbitals /J. Migdalek, M. Wyrozumska//J. Quant.e Spectr. and Rad. Transfer.-1987.-Vol.37(67).-P.581-589.
116. Kornev A. Rydberg spectra of atoms and positive ions in the Thomas-Fermi model / Kornev A., Zon B.//J.Phys.B:At.Mol.Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.4027-4034.
117. Ландау Л.Д. Квантовая механика/ Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. -М.: Наука, 1977.-700С.;
118. Базь А.И., Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике./ Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. -М.: Наука, 1971.-238С.
119. Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода/ В.С. Лисица //УФН.-1987.-Т. 153(3).-С.379-422.
120. Harmin D.A. Theory of the non-hydrogenic Stark Effect/ Harmin D.A.// Phys.Rev.Lett.-1982.-Vol.49,N2.-P.128-131.
121. Glushkov A.V. DC strong - field Stark effect: New consistent quantum-mechanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N//J.Phys.B: At.Mol.Opt. Phys.-1993.-Vol.26.-P.L379-386;
122. Глушков А.В. Отрицательные ионы инертных газов/Глушков А.В.//JETP Lett.-1992.-Vol.55.-P.97-100.
123. Glushkov A.V. DC Strong Field Stark effect: consistent quantum mechanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//Preprint N92-1-AS.-Institute of Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-13p.;

124. Glushkov A.V. A broadening of the thulium atom autoionization resonances in a weak electric field/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// Preprint N92-2-AS.- Institute of Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-6p.
125. Glushkov A.V., Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β -Decay parameters/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L.// 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.
126. Glushkov A.V., 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.
127. Dunning F.B. Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields/ Dunning F.B., Mestayer J.J., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdorfer J.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.022001.-22p.
128. Grutter M. 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.
129. Seaton M.J., Quantum defect theory/ Seaton M.J.//Rep. Prog. Phys.-1983.-Vol.46.-P.167-258.
130. Stein M., Pseudo-potential approach to the relativistic treatment of alkali atoms/Stein M.//J.Phys.B.: At.Mol.Opt.Phys.-1993.-Vol.26.-P.2087-2097.
131. Reiher G., Atomic oscillator-strength distributions in spectral series of Li isoelec-tronic sequence/ Reiher G., Martin G., Wiese W.//Phys. Rev. A.-1976.-Vol.13.-P.699-714;

132. Martin I., Quantum defect orbitals and the Dirac second-order equation/ Martin I., Karwowski J.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1991.-Vol.24.-P.1539-1544.
133. Зилитис В.А., Теоретическое определение сил осцилляторов для главных серий литиеподобных ионов/Зилитис В.А//Опт. Спектр.-1983-Т.55.-С.215-218
134. Zilitis V.A., Determination of Rydberg D and F energy levels of Cs-like ions by method of interpolation of relativistic quantum defects/Zilitis V.A.//Opt. Spectr.-2012.-Vol.113.-P.231-234.
135. Глушков А.В. Релятивистский расчет и экстраполяция сил осцилляторов в Fr-подобных ионах методом модельного потенциала / Глушков А.В. // Оптика и Спектроскопия.-1991.-Т.70,N5.-С.952-955.
136. Ternovsky V.B., 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 (6p.).
137. Ternovsky V.B., 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.-N23.-P.91-95.
138. Терновський В.Б. Спектроскопія важких рідбергівських атомів та релятивістський квантовий хаос: Дис...канд.фіз.-мат.наук.: 01.04.05/ В.Б.Терновський/Одеський держ.екологічний університет.-Одеса, 2015.-15-С.
139. Froese Fischer C., Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences/ Froese Fischer C., Tachiev G.// Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.-2004.-Vol.87.-P.1–184;
140. Dzuba V.A., Polarizabilities and parity nonconservation in the Cs atom and limits on the deviation from the standard electroweak mode/ Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P.//Phys.Rev.A.-1997-Vol.56.-P.R4357-4360; Multi-body perturbation theory and precise calculation parity non-conservation effect in cae-

- sium/ Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P.//Soviet Phys.Journ.-1990.-Vol.33(8).-P108-120.
141. Glushkov A.V., New laser-electron nuclear effects in the nuclear γ transition spectra in atomic and molecular systems/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer)*.-2008.-Vol.18.-P. 221-234.
142. Glushkov A.V. 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.134.-P.305001 (6p).
143. Khetselius O.Yu. Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products/ Khetselius O.Yu. // *Physica Scripta*.-2009.-Vol.134.-P. 305090-1-7.
144. Buyadzhi V.V., Laser multiphoton spectroscopy of atom embedded in Debye plasmas: multiphoton resonances and transitions / Buyadzhi V.V. // *Photoelectronics*.-2015.-Vol.24.-P.128-133
145. Ignatenko A.V., Microwave ionization of lithium rydberg atoms and Wannier-Mott exciton: Regular and stochastic features/ Ignatenko A.V.// *Photoelectronics*.-2006.-N15.-P.108-111.
146. Svinarenko A.A., Spectroscopy of autoionization states in spectra of helium, barium and lead atoms: New spectral data and chaos effect / Svinarenko A.A.// *Photoelectronics*.-2013.-Vol.22.-P.31-36.
147. Buchanov V.V. Laser separation of Silicon Isotopes by the AVLIS Technology/ Buchanov V.V., Kazaryan M.A., Kalugin M.M., Prokhorov A.M.// *Atomic and Molecular Pulsed Lasers*.-Tomsk: SO RAN, 2001.-P.72.
148. Буяджи В.В., Релятивістська теорія багатофотонних резонансів в атомних спектрах.— Дис. канд.фіз.-мат.наук.: 01.04.05/ Буяджи В.В./Одеський держ. екологічний університет.-Одеса, 2015.-125С.

149. Khetselius O.Yu., Relativistic Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure Parameters for Some Heavy-Element Isotopes/ Khetselius O.Yu.// Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109.- N14.-P. 3330-3335.
150. Glushkov A.V., 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;
151. Glushkov A.V. 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.
152. Глушков А.В., Спектроскопия автоионизационных состояний тяжелых атомов и многозарядных ионов: численные модели/ Глушков А.В., Хецелиус О.Ю., Свинаренко А.А., Буюджи В.В.-Одесса: ОГЭКУ, 2015.-210С.
153. Глушков А.В., Хецелиус О.Ю., Дубровская Ю.В., Терновский В.Б., 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.
154. 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/ Desclaux J.P.// J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.-1983.-Vol.16, N2.- P.L323-328.
155. Dietz K., Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics/ Dietz K., Heß B.A. // Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.- P.682-688.
156. Gell-Mann M., Bound states in quantum field theory/ Gell-Mann M., Low F.//Phys.Rev.-1951.-Vol.84.-P.350-356.

157. Браун М.А., Релятивистская теория тяжелого атома/ Браун М.А., Дмитриев Ю.Ю., Лабзовский Л.Н.//ЖЭТФ.-1969.-Т.57, №6.-С.2189-2198; Браун М.А., Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И. Релятивистская теория атома/ М.А. Браун, А.Д. Гурчумелия, У.И. Сафронова.-М.: Наука, 1984.- 268С.
158. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в конечных тяжелых Ферми-системах/О.Ю.Хецелиус.-Одесса: Экология.-2011. - 450С.
159. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/ В.С. Летохов.-М.:Наука.-1993.-408С.
160. NIST atomic spectra database (version 3.1.3; 2009), <http://physics.nist.gov/asd3>; Corlis C. Energy levels of iron/ Corlis C., Sugar J.//J.Phys.Ch.Ref.Dat.-1982.-Vol.11.-P. 135-241.
161. Martin G., NIST Spectra Database, version 2.0 / Martin G.//NIST.-Washington.-2004; (<http://physics.nist.gov/asd>);
162. Moore C., NBS Spectra Database / Moore C.// NBS.-Washington.-1987.
163. Grance M., Revised energy levels for neutral atoms and ions/ Grance M. // Atomic Data.-1973.-Vol.5.-P.185-220.
164. Martin G., Tables of critically evaluated oscillator strengths for lithium isoelectronic sequence/Martin G., Wiese W.//Journ. of Phys. Chem. Ref. Data.-1976.-Vol.5.-P.537-570.
165. Laughlin C. Model potential method/ Laughlin C., Victor G.A. //Adv. Atom. Mol. Phys.-1988- Vol.25.- P.163-194.
166. Островский В.Н., Радиационные переходы во внешних оболочках иона Hg^+ / Островский В.Н., Шейнерман С.А.//Опт. Спектр.-1989.-Vol.67.-P.16-22.
167. Yerokhin V., QED treatment of electron correlation in Li-like ions/ Yerokhin V., Artemyev A., Shabaev V.M.// Phys.Rev.A.-2007.-Vol.75.-P.062501-1-062501-12.
168. Schweizer W., Model potentials for alkali metal atoms and Li-like ions/Schweizer W.,Faßbinder P.,Gonzalez R.//Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.-1999.-Vol.72.-P.33-55.

169. Zhi-Wen W., Calculations of the transition energies and oscillator strengths for Cu^{26+} ion/ Zhi-WenW., Ye Li// Journ. of Atom. Mol. Sci.-2010.-Vol.1.-P.62-67.
170. Lianhua Qu, Theory of oscillator strength of the lithium isoelectronic sequence/ Lianhua Qu, Zhiwen Wang, Baiwen Li//1998 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1998.-Vol.31.-P.3601-3608; Hu M-H, Oscillator strengths for $22\text{S}-n2\text{P}$ transitions of Li isoelectronic sequence from $Z=11-20$ / Hu M-H, Wang Z-W//Chin.Phys.B.-2009.-Vol.18.-P.2244-2254.
171. Mercouris T. Solution of the many-electron many-photon problem for strong fields: Application to Li^- in one and two-colour laser fields/ Mercouris T., Nikolaides C.A.//Phys.Rev.A.-2003.-Vol.67.-P.063403-1-063403-12.
172. Aymar M., Three-step laser spectroscopy and multichannel quantum defect analysis of odd-parity Rydberg states of neutral ytterbium/Aymar M., Champeau R., Delsart C., Robaux O.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1984.-Vol.17.-P.3645-3658.
173. Vidolova-Angelova E. Autoionizing Rydberg states of thulium. Re-orientation decay due to monopole interaction/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1991.-Vol.24.-P.4147-4158.
174. Беков Г.И. Лазерная спектроскопия узких двукратно возбужденных автоионизационных состояний атома иттербия/ Г.И. Беков, Е. Видолова-Ангелова, Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, В. Мишин// ЖЭТФ.- 1981.-Т.80,№3.- С.866-878.
175. Glushkov A.V. Calculation of the spectroscopic characteristics of complex atoms and ions in electric field; the Thulium/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V. // Bound Volume of Paris-Meudon Observatory (Paris, France).-1996.-P.139-140.
176. Glushkov A.V. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Chernyakova Yu. G., Svinarenko A.V., Khetselius O.Yu.// Nucl. Phys.A.-2004.-Vol. 734.-Pe21-25.
177. Indelicato P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method/ Indelicato P., Desclaux J.P. // Phys.Scripta.-1993.-Vol.46.-P.110-115.

178. Karaçoban B., Energies, Landé Factors, and Lifetimes for Some Excited Levels of Neutral Ytterbium ($Z = 70$)/ Karaçoban B., Özdem L.//Acta Phys.Polonica.A.-2011.-Vol.119.-P.342-353.
179. Jong-hoon Yi, Investigation of even parity autoionizing states of ytterbium atom by two-photon ionization spectroscopy/ Jong-hoon Yi, Park H., Lee J.//J.of Korean Phys.Soc.-2001.-Vol.39.-P.916-920.
180. Glushkov A.V., Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanides atoms/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A.//Physica Scripta (IOP, London).-2013.-Vol.T153-P.01429
181. O.Yu. Khetselius, Relativistic Green's function of the Dirac-Kohn-Sham equation with non-singular potential and complex energy / V.V. Buyadzhi, A.V. Tjurin //Abs. of the International Conference «Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology»-Odessa (Ukraine, August 23-27).- 2015.- P. 62
182. Glushkov A.V., 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., Buyadzhi V.V., Floriko T.A., Shakhman A.N.// 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.
183. Glushkov A.V. 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,N5.-P.936-940.
184. Glushkov A.V., Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P.//In: Coherence and Ultrashort Pulsed Emission, Ed. Duarte F. J. (Intech, Vienna).-2011.-P.159-186.
185. Parpia F.A., Generalized relativistic atomic structure package: GRASP/Parpia F., Froese-Fischer C., Grant I.//Comp.Phys.Commun.-1996.-Vol.94.-P.249-270.

186. Yu. Ralchenko, NIST Atomic Spectra Database (version 4.1), / Yu. Ralchenko, A. Kramida, J. Reader, and the NIST ASD Team //available at <http://physics.nist.gov/asd> (National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2011).
187. 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.
188. Bell, K.L., BERTHA: 4-Component Relativistic Molecular Quantum Mechanics/ Bell K.L., Berrington K., Crothers D., Hibbert A., Taylor K.T.// Supercomputing, Collision Processes, and Application, Series: Physics of Atoms and Molecules (Berlin, Springer).-2002.-P.213–224.
189. Reiher M., New Algorithms of Quantum Chemistry /Reiher M., Heß B.// Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, ed. by J.Grotendorst, John von Neumann Inst. for Computing, Julich, NIC Ser.-2000.-Vol 3.-P.479–505.
190. Jensen H., DIRAC Code, a relativistic ab initio electronic structure program/ Jensen H., Saue T., Visscher L. et al//Release DIRAC04.0.-2004.
191. Ivanov L.N., PC atomic complex ‘Superatom-ISAN’: main possibilities and programs/Ivanov L.N., Ivanova E.P., Glushkov A.V.//Preprint of Institute for Spectroscopy of USSR Acad. Sci., ASN1.-1991.-96P;
192. Glushkov A.V., PC atomic complex ”Superatom-ISAN”:EPPP-code-91/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// Preprint of Institute for Spectroscopy of USSR Acad. Sci.,ASN2.-1991-33P; Glushkov A.V., PC atomic complex ”Superatom-ISAN: Stark”/ Glushkov A.V.//Preprint of Institute for Spectroscopy of USSR Acad. of Sci., ASN3.-1991.-33P.;
193. Glushkov A.V., Advanced EPPP-code-07 of ”Superatom-ISAN”: EPPP-code-91/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A.,”Superatom-ISAN-Nuclei08” //Math.Doc.of the OSEU Math. Dept., Odessa, 2008.-39P.;

194. Khetselius O.Yu., PC atomic complex "Superatom-ISAN: Stark-Gen/ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Svinarenko A.A.//Math. Doc.of the OSEU Math. Dept., Odessa, 2008.-39P.
195. Buyadzhi V.V., PC Program Complex for computing Rydberg atoms characteristics in a free state and electromagnetic field: Blocks "Rydberg-BBR", "Rydberg-RadDecay"/Buyadzhi V.V., Gurskaya M., Smirnov A.V., Zaichko P.A., Ternovsky V.B.//E-preprint of Mathematics Department of the OSENU.-2014.-N MA-03 (48p.).
196. Радциг А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике/А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.- М.: Энергоиздат, 1986.-240С.
197. Glushkov A.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B.- Odessa: OSENU (TEC), 2014.-180P.
198. Zaichko P.A., Relativistic theory of excitation and ionization of heavy alkali rydberg atoms in a black-body radiation field: New data/ Zaichko P.A. // Photoelectronics.-2016.-Vol.25.-P.91-96.
199. Khetselius O.Yu., Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure and Oscillator Strengths Parameters for Some Heavy Elements Atoms and Ions/ Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Smirnov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Florko T.A., Mansarliysky V.// Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer).-2016-Vol.30.-P. 31- 45.
200. Khetselius O.Yu., The hyperfine structure and oscillator strengths parameters for some heavy elements atoms and ions: review of data by relativistic many-body perturbation theory calculation/ Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Mansarliysky V.F., Antoshkina O.A.//Photoelectronics.-2016.-Vol.25.-P.48-55.
201. Ternovsky V.B., 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,N4.-P.19-26.
202. Glushkov A.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.
203. Glushkov A.V., Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of helium: Test and new spectral data/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.V., Smirnov A.V. , Zaichko P.A.//*Photoelectronics (“Copernicus”)*.-2015.-Vol.24.-P.94-102.
204. Svinarenko A.A., Spectroscopy of Rydberg atoms in a Black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization/ vinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Florko T.A., Zaichko P.A., Ponomarenko E.L.// *Journal of Physics: C Series (IOP, London, UK)*.-2014.-Vol.548.-P. 012048 (6p.).
205. Zaichko P.A., Spectroscopy of Rydberg atoms in a Black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization/ Zaichko P.A.,Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu.,Buyadzhi V.V., Kvasikova A.S.//*Photoelectronics*.-2014.-Vol. 23.-P.147-151.
206. Prepelitsa G.P., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// *Sensor Electronics and Microsystems Techn.*-2014.-Vol.11,N4.-P.43-57.
207. Glushkov A.V., 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* Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski (Lodz, Polland).-2013.-Vol.T1.-P.467-477.
208. Glushkov A.V., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method/ Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., Zaichko P.A.// *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems*

- and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering, Ed. J.Balicki.(World Sci. Pub.).-2014.-Vol.21.-P.69-75.
209. Glushkov A.V., Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation of chaotic evolutionary dynamics/ 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, Ed. J.Balicki.(Gdansk, World Sci. Pub.).-2014.-Vol.21.-P.143-150.
210. Glushkov A.V., Sensing interaction dynamics of chaotic systems within a chaos theory and microsystem technology geomath with application to neurophysiological systems/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunuakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V, Brusentseva S.V., Zaichko P.A.// Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2014.-Vol.11,N3.-P.62-69.
211. Глушков А.В., Новые методы теории динамических систем и квантового хаоса/ Глушков А.В., Свиноренко А.А., Препелица Г.П., Терновский В.Б., Буюджи В.В., Заичко В.Б., Смирнов А.В.-Одесса: ОДЕКУ.-2013.-240С.
212. Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A.,Svinarenko A.A., Mansarliysky V.F., Computing of radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced code// Journal of Physics: C Series (IOP, London, UK).-2016.-Vol.800.-P. 012031.
213. Zaichko P.A., Relativistic theory of Rydberg atom in the BBR field: Energy approach/ Zaichko P.A.//Abs. of VIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics.-Spetses (Greece).- 2003.- P.113.
214. Zaichko P.A., Spectroscopy of Rydberg atoms in a black-body radiation field and optical frequency standards/ Zaichko P.A.//Abs. of the XVIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics.-Paraty-Rio de Janeiro (Brasil).- 2013.- P.P20.
215. Ternovsky V.B., Nonlinear optics and dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos/ Ternovsky

- V.B., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Zaichko P.A.//Abs. of the International Conference on Photonica.-Belgrade (Serbia).-2013.-P.64.
216. Prepelitsa G.P., Non-linear analysis of chaotic self-oscillations in backward-wave tube and chaos regime parameters in generation of laser with absorbing cell/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.//Abs. of the XI International Conference on Atomic and Molecular Pulsed Lasers (AMPL-13).-Tomsk (Russia).-2013.-P.D4.
217. Glushkov A.V., Nonlinear Stochastic Dynamics of Quantum and Laser Systems / Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Proc. of the International Conference on Statistical Physics.-Rhodes (Greece).-2014.-P.18.
218. Glushkov A.V., Nonlinear Optics and Dynamics of Quantum and Laser Systems with Elements of a Chaos/ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Brusentseva S.V., Ternovsky V.B.// Abs. of the 21th Central European Workshop on Quantum Optics.-Brussels (Belgium)-2014.- P.94.
219. Glushkov A.V., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method / Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Brusentseva S.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.//Abs. of 13th International Conference on Artificial Intelligence, Knowledge Engineering and Data Bases (AIKED14).-Gdansk (Polland).-2014.-P.P11.
220. Zaichko P.A., Relativistic quantum computing Rydberg atoms in black-body radiation field/ Zaichko P.A., Loboda A.V., Florko T.A., Tkach T.B.//Abs. of the XIX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology.-Taipei (Taiwan).- 2014.-P.77.
221. Khetselius O.Yu., Relativistic theory of excitation and ionization of the heavy Rydberg atoms in a black-body radiation field/ Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Tkach T.B., Florko T.A.//Abs. of the XX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology.-Varna (Bulgaria, September 14-20).- 2015.- P. 92

222. Ziachko P.A., Relativistic theory of excitation and ionization of the rydberg atoms in a black-body radiation field/ Ziachko P.A. //Abs. of International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology”-Odessa (Ukraine).- 2015.- P. 69
223. Zaichko P.A., Dynamic enhancement and chaos elements in theory of a nucleus and electron internal conversion in nuclides/ Zaichko P.A., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Ternovsky V.B.//Abs. of the 3rd European Nuclear Physics Conference.-MartiniPlaza, Groningen (The Netherlands).-2015.-P.108.
224. Zaichko P.A., New relativistic perturbation theory approach to ionization of the multielectron Rydberg atoms in a electromagnetic and black-body radiation field / Ziachko P.A.//Abs. of the International Symposium “Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy”.-Odessa (Ukraine).- 2015.-P.33.
225. Buyadzhi V.V., Computing radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced code/ Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A.//Abs. of the 28th IUPAP Conf. on Computational Physics.-Gauteng (South Africa).-2016.-P.5 (ID-110).
226. Zaichko P.A., Spectroscopy of Rydberg atoms in a black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization/ P. Zaichko, V Buyadzhi, O Khetselius, A Ignatenko, A Svinarenko // Abs. of the 23rd International Conference on Spectral Lines Shapes.-Torun (Polland).-2016.-P.158.
227. Zaichko P.A., Relativistic theory of excitation and ionization of the heavy Rydberg atoms and ions in a black-body radiation field/ Zaichko P.A., Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Florko T.A.//Abs. of the 13th SPARC Topical Workshop Jagiellonian University.-Kraków (Poland).-2016.- P.P03.
228. Glushkov A.V., Advanced relativistic energy approach to calculation of the radiation and auger transition probabilities for multicharged ions/ Glushkov A.V., Zaichko P.A., Khetselius O.Yu., Gurskaya M.Yu., Kulakli T.A.//Abs. of the 8th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016).- Kielce (Polland).-2016.-P.156 (PB02).