

**О.В. ГЛУШКОВ, О.Ю. ХЕЦЕЛУС, А.А. СВИНАРЕНКО,  
В.Б. ТЕРНОВСЬКИЙ**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ  
БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ ТА АДРОННИХ АТОМНИХ  
СИСТЕМ**

**Монографія**

**за редакцією д.ф.-м.н., проф. Глушкова А.В.**

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**О.В. ГЛУШКОВ, О.Ю. ХЕЦЕЛІУС, А.А. СВИНАРЕНКО,  
В.Б. ТЕРНОВСЬКИЙ**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ  
БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ ТА АДРОННИХ АТОМНИХ  
СИСТЕМ**

Монографія

за редакцією д.ф.-м.н., проф. Глушкова А.В.

Одеса  
Одеський державний екологічний університет  
2022

УДК 539.184

**Релятивістська спектроскопія багатоелектронних та адронних атомних P36 систем:** монографія / О.В. Глушков, О.Ю. Хецеліус, А.А. Свинаренко, В.Б. Терновський; за ред. О.В. Глушкова. Одеса: Одеський державний екологічний університет, 2022. 260 с.

ISBN 978-966-186-250-9

Монографія присвячена викладенню теоретичних основ нової прецизійної релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних адронних атомних систем, основних положень нового формалізму комбінованої релятивістської теорії збурень RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням та узагальненого релятивістського енергетичного підходу, а також викладенню результатів розрахунків енергетичних, радіаційних, спектроскопічних характеристик цілої групи важливих з точки зору багаточисленних аплікацій багатоелектронних та каонних атомів з прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів та радіаційних КЕД поправок.

Монографія буде використовуватись для підготовки здобувачів вищої освіти за спеціальностями 104 «Фізика та астрономія», 113 – Прикладна Математика.

**Relativistic spectroscopy of multielectron and hadronic atomic systems:** monograph / A.V. Glushkov, O.Y. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.B. Ternovsky; edited by A.V. Glushkov. Odesa: Odessa State Environmental University; 2022. 260 p.

The monograph is devoted to the presentation of the theoretical foundations of a new precision relativistic spectroscopy of heavy conventional multielectron and exotic hadron atomic systems, the main provisions of the new formalism of the combined relativistic perturbation theory RMBPT with optimized Dirac-Fock-Breit zero approach, spectroscopic characteristics of a whole group of important from the point of view of numerous applications of multielectron and kaon atoms with precise consideration of relativistic, nuclear effects and radiation KED corrections.

The monograph will be used to prepare the seekers of higher education in the Subject Area of 104 "Physics and Astronomy", 113 - Applied Mathematics.

УДК 539.184

**Відповідальний редактор:**  
д-р фіз.-мат. наук, професор Глушков О.В..

**Рецензенти:**

П.О. Кондратенко, д-р фіз.-мат. наук, професор, Національний авіаційний університет (м. Київ), Заслужений діяч науки і техніки України;  
О.В. Тюрін, д-р фіз.-мат. наук, професор, Одеський національний університет ім. І. Мечникова,  
В.В. Усов, д-р фіз.-мат. наук, професор, Південноукраїнський національний педагогічний університет ім. К. Ушинського

*Рекомендовано до друку рішенням вченої ради Одеського державного екологічного університету Міністерства освіти і науки України (протокол №6 від 30.06.2022 р.)*

ISBN 978-966-186-250-9

© О.В. Глушков, О.Ю. Хецеліус, А.А. Свинаренко,  
В.Б. Терновський, 2022

© Одеський державний екологічний університет, 2023

## ЗМІСТ

Скорочення та умовні позначки, сталі, одиниці.....	7
ВСТУП .....	9
<b>РОЗДІЛ 1</b>	
<b>СУЧАСНІ ПІДХОДИ В ТЕОРЕТИЧНІЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКІЙ СПЕКТРОСКОПІІ ВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ. ОГЛЯД ІСНУЮЧИХ МЕТОДІВ РОЗРАХУНКУ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК АТОМІВ ТА ІОНІВ .....</b>	<b>20</b>
1.1 Загальний огляд теоретичних методів розрахунку спектрів і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів .....	20
1.2 Урахування релятивістських та радіаційних ефектів в розрахунках енергетичних і спектральних характеристик багатоелектронних атомів та іонів .....	26
1.3 Актуальні проблеми сучасної теорії каонних атомних систем та кооперативної бета-ядерної спектроскопії релятивістських атомів .....	38
1.4 Висновки до розділу 1 .....	47
<b>РОЗДІЛ 2</b>	
<b>РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ. НОВИЙ ОПТИМІЗОВАНИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ І СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК .....</b>	<b>50</b>
2.1 Вступ .....	50
2.2 Новий формалізм релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим наближенням та узагальнений енергетичний підхід до розрахунку енергетичних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем .....	52
2.2.1 Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи та оптимізоване одноквазічастинкове наближення Дірака-Фока .....	52
2.2.2 Ядерний потенціал. Поправка на скінченний розмір ядра атома .....	60
2.2.3 Оптимізована версія методу штурмовських розкладень для урахування станів континууму .....	63

2.2.4	Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи. Поправки першого порядку теорії збурень .....	65
2.2.5	Процедура обчислення матричних елементів на хвильових функціях N-квазічастинкових станів. Метод Фано .....	69
2.2.6	Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи. Урахування обмінно-кореляційних поправок ...	72
2.3	Калібрувальна-інваріантна процедура генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в релятивістській теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням .....	76
2.4	Модельний підхід до врахування радіаційних КЕД ефектів в теорії важких атомних систем .....	82
2.5	Висновки до розділу 2 .....	92

### РОЗДІЛ 3

#### ТЕОРЕТИЧНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ

#### ВАЖКИХ І НАДВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ: РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ СПЕКТРІВ, ЕНЕРГЕТИЧНИХ, РАДІАЦІЙНИХ І СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК .....

3.1	Вступ .....	95
3.2	Теоретична спектроскопія іона ртуті $Hg^+$ та важких атомів талію Tl і свинцю Pb .....	96
3.2.1	Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні ртуті $Hg^+$ .....	96
3.2.2	Теоретична релятивістська спектроскопія атома талію Tl .....	99
3.2.3	Рівні енергії надважкого елемента ніхонія ${}_{113}^{278}Nh$ .....	105
3.2.4	Теоретична релятивістська спектроскопія атома свинцю Pb .....	106
3.3	Тестові розрахунки ймовірності радіаційних переходів в спектрі атому європію Eu I .....	109
3.4	Теоретична релятивістська спектроскопія атома ітербію Yb .....	111
3.5	Теоретична релятивістська спектроскопія атома тулія Tm .....	121
3.6	Теоретична спектроскопія атома урану U .....	127
3.7	Висновки до розділу 3 .....	132

<b>РОЗДІЛ 4</b>	
<b>РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ КАОННИХ АТОМІВ З УРАХУВАННЯМ ОБМІННО-КОРЕЛЯЦІЙНИХ, РАДІАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ ТА ЕФЕКТІВ СИЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ</b> .....	
	135
4.1	Вступні зауваження. Огляд експериментальних та теоретичних робіт із спектроскопії каонних атомних систем .....
	135
4.2	Релятивістське рівняння Клейна-Гордона-Фока для каонної атомної системи. Електромагнітні взаємодії .....
	139
4.3	Новий підхід до урахування радіаційних ефектів в спектрах важких каонних атомів .....
	146
4.4	Елементи релятивістської теорії надтонкої структури спектрів каонних атомів .....
	150
4.5	Процедура урахування сильної взаємодії в розрахунках енергетичних параметрів каонних атомів .....
	154
4.6	Результати розрахунків енергетичних та спектроскопічних параметрів каонних атомів .....
	157
4.6.1	Спектр каонного азоту. Надтонка структура та ймовірності радіаційних переходів .....
	157
4.6.2	Спектроскопія важких каонних атомів $^{184}\text{W}$ , $^{207}\text{Pb}$ , $^{238}\text{U}$ : Енергетичні внески радіаційних поправок, поправок за рахунок наявності електронних оболонок .....
	162
4.7	Висновки до розділу 4 .....
	167

<b>РОЗДІЛ 5</b>	
<b>ЕЛЕКТРОННО-<math>\beta</math>-ЯДЕРНА СПЕКТРОСКОПІЯ АТОМНИХ СИСТЕМ: ПІДХІД БАГАТОЧАСТИНКОВОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ ДО РОЗРАХУНКУ ПАРАМЕТРІВ <math>\beta</math>-РОЗПАДУ</b> .....	
	169
5.1	Сучасні концепції фізичної природи ядерного $\beta$ -розпаду .....
	169
5.2	Основні характеристики $\beta$ -розпаду. Класифікація $\beta$ -переходів. Правила відбору .....
	178
5.3	Теоретичний метод. Релятивістська багаточастинкова теорія збурень .....
	192
5.3.1	Визначення ймовірності $\beta$ -розпаду. Дозволені та понад дозволені переходи .....
	192

5.3.2	Комбінована ядерна та релятивістська багаточастинкова теорія збурень .....	195
5.4	Результати розрахунку функції Фермі для $\beta$ -розпаду .....	200
5.4.1	Характеристика ряду дозволених $\beta$ -переходів і результати розрахунку характеристик $\beta$ -розпаду .....	200
5.4.2	Результати розрахунку впливу вибору виду атомного поля на характеристики $\beta$ -розпаду .....	202
5.4.3	Результати розрахунку функції Фермі для $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції .....	204
5.4.4	Результати розрахунку впливу обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях на значення інтегральної функції Фермі .....	207
5.4.5	Результати розрахунку впливу обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях на значення функції Фермі .....	209
5.5	Висновки до розділу 5 .....	212
	<b>ВИСНОВКИ</b> .....	213
	<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b> .....	220

## Скорочення та умовні позначки, сталі, одиниці:

ДКС (DKS) – Дірака-Кона-Шема (Dirac-Kohn-Sham) метод;  
ДФ (DF) – Дірака-Фока (Dirac-Fock) метод;  
КА – Каонні атоми;  
КЕД (QED) – Квантово-електродинамічний (quantum electrodynamics);  
МДФ (MDF) – Мега Дірака-Фока (mega Dirac-Fock) метод;  
МКДФ (MCDF) – Багатоконфігураційне наближення Дірака-Фока;  
МКХФ (MCHF) – Багатоконфігураційне наближення Хартрі-Фока (Hartree-Fock);  
МП – Модельний потенціал (метод);  
ОДФ (ODF) – Оптимізований Дірака-Фока (optimized Dirac-Fock) метод;  
ОК – Обмінно-кореляційні (ефекти);  
РХФ (RHF) – Релятивістський метод Хартрі-Фока (Hartree-Fock);  
ТЗ (PT) – Теорія збурень (perturbation theory);  
ФГ (DF) – Функціонал густини;  
ХФ (HF) – Хартрі-Фока (Hartree-Fock) метод;  
ВФД – Бейтлера-Фано (канал розпаду резонансів);  
НФС – Хартрі-Фок-Слейтер (метод);  
РС – Комплекс програм;  
N-QED – Прецизійна ядерно-квантово-електродинамічна теорія збурень;  
RMBPT – Релятивістська багаточастинкова теорія збурень (relativistic many-body perturbation theory);  
RMBPT-ODF – Комбінований метод калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень та релятивістський енергетичний підхід з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням;  
R-метод (RMBP) – R-матричний метод (метод у наближенні Брейта-Паулі);  
ROD – реорієнтаційного типу (канал розпаду резонансів);  
RPT-NODF – релятивістська багаточастинкова теорія збурень з неоптимізованим Дірака-Фока нульовим наближенням;  
TDRHF – релятивістська теорія Хартрі-Фока, залежна від часу.



**Одиниці.** Всюди, де не зазначено, використані атомні одиниці:  $e = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$  (в цих од.  $c = 137,03597$ ). Атомні довжини, часу, швидкості:  $\hbar^2 / me^2 = 5,291773 \cdot 10^{-11} \text{м}$ ,  $\hbar^3 / me^4 = 2,4189 \cdot 10^{-17} \text{с}$ ,  $e^2 / \hbar = 2,1877 \cdot 10^6 \text{м / с}$ . Атомна од. енергії (а.о.е.)  $me^4 / \hbar^2 = 2Ry = 27,2116 \text{еВ} = 4,3598 \cdot 10^{-18} \text{Дж} = 2,19475 \cdot 10^5 \text{см}^{-1}$  ( $me^4 / 2\hbar^2 = Ry$ - Рідберг). Енергія в кулонівських одиницях (к.о.):  $1 \text{к.о.е.} = Z^2 \text{ а.о.е.}$  ( $Z$  – заряд ядра атома). Релятивістські одиниці:  $\hbar = 1$ ,  $c = 1$ ,  $m = 1$ ,  $e^2 = 1 / 137,03597$ .

**Фундаментальні сталі:**

Швидкість світла  $c = 2,997925 \cdot 10^8 \text{м / с}$ ;

Елементарний заряд  $e = 1,60219 \cdot 10^{-19} \text{Кл}$ ;

Маса електрона  $m = 9,1095 \cdot 10^{-31} \text{кг}$ ;

Постійна Планка  $\hbar = 1,05459 \cdot 10^{-34} \text{Дж}\cdot\text{с}$ ;

Постійна Рідберга  $R_\infty = 1,0973732 \cdot 10^7 \text{м}^{-1}$ ;

Постійна тонкої структури  $\alpha = e^2 / \hbar c$ ,  $1 / \alpha = 137,03597$ ;

Борівський радіус  $\hbar^2 / me^2 = 0,5291773 \text{ \AA}$ .

## ВСТУП

Дослідження енергетичних, радіаційних, спектроскопічних, взагалі структурних властивостей важких нейтральних і сильно іонізованих атомів (так званих багатозарядних іонів) має принципове фундаментальне значення в багатьох областях атомної фізики (теорія атомних спектрів, спектроскопія, теорія спектральних ліній), астрофізики, фізики плазми, фізики лазерів тощо.

Розвиток нових напрямків в галузі атомної оптики і спектроскопії, лазерної фізики та квантової електроніки, таких як прецизійна спектроскопія важких і надважких атомів і багатозарядних іонів, новітні астрофізичні дослідження, імпульсні методи нагріву в експериментах з керованого термоядерного синтезу, створення принципово нових схем лазерів в ВУФ, а також подальше вдосконалення та розвиток нових експериментальних технологій, у тому числі з використанням нових лазерних технологій, прискорювачів й т.і., обумовлює нагальну потребу вирішення актуальних і важливих завдань атомної оптики і лазерної фізики на принципово новому релятивістському рівні теоретичної послідовності і спектроскопічної точності.

В останнє десятиліття активно розвивається релятивістська теоретична спектроскопія важких як звичайних, так й екзотичних атомних систем, так званих релятивістських багатоелектронних та адронних атомів, а також важких багатозарядних іонів, яка охоплює ультрафіолетовий і рентгенівський діапазони спектра.

Загальновідомо, що вивчення структури спектральних ліній таких атомних систем представляє великий інтерес для подальшого розвитку, як безпосередньо атомної та ядерної теорій, так й теорії фундаментальних взаємодій, у тому числі електрослабкої та сильної. Експерименти щодо визначення властивостей розщеплення спектральних ліній, зокрема, вивчення характеристик надтонкої структури, дозволяють уточнити величини ядерних магнітних моментів різних ізотопів і перевірити точність різних обчислювальних моделей, що використовуються для теоретичного опису атомних ядер у важких системах.

Ключову роль тут відіграє революційний прогрес, досягнутий у розвитку сучасних експериментальних методів дослідження спектрів атомів та іонів, зокрема, використання прискорювачів, колайдерів важких

іонів, нових інтенсивних джерел синхротронного випромінювання, застосування нових методів лазерної спектроскопії з різким збільшенням інтенсивності та якості лазерного випромінювання, beam-foil спектроскопія і багато інших.

Очевидно, що фундаментальна прецизійна теорія, що претендує на опис зі спектроскопічною точністю енергетичних і спектральних параметрів важких і надважких атомів та іонів (у т.ч. рівнів енергії, сил осциляторів, параметрів надтонкої структури (НТС) і т.д.), повинна адекватно враховувати весь набір релятивістських, радіаційних (зокрема, власно-енергетичний внесок лембівського зсуву та внесок за рахунок поляризації вакууму, включаючи КЕД поправки вищих порядків квантово-електродинамічної (КЕД) теорії збурень (ТЗ), а також двохпетльові поправки Källén-Sabry порядку  $\alpha^2 (\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha (Z\alpha)^n$ ), ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядра, ефекти Bohr-Weisskopf и Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.), складних обмінно-кореляційних поправок (включаючи поправки в наближенні випадкових фаз, поляризацію остову, екрануючі ефекти, поправки Бракнера, тиск континууму тощо). При цьому більшість стандартних методів теорії, незважаючи на відомий прогрес в їх розвитку, не здатні забезпечити одночасний прецизійний опис всіх перерахованих груп ефектів і поправок.

Дійсно, незважаючи на вжиті в останні три десятиліття численні спроби розвитку прецизійних методів опису спектрів важких атомних систем (метод мега-Dirac-Fock (ДФ=DF), R-матричний метод, relativistic coupled-cluster method, різні версії ТЗ і т.д.; пакети: “SUPERSTRUCTURE”, “Dirac”-package, “Beta-package”, “QED”, “GRASP”, “BERTHA” та ін.), залишається невирішеним цілий комплекс проблем одночасного високоточного врахування вище згаданих ефектів.

Більш того, відсутня інформація про досить велику кількість особливо важких та надважких атомів (а також відповідних багатозарядних іонів) періодичної таблиці Менделєєва, причому особливо кризового характеру набула ситуація, пов'язана з вивченням характеристик надважких елементів по причині відсутності будь-яких надійних даних. Подібний комплекс складних теоретичних проблем спостерігається й в релятивістській спектроскопії важких адронних (зокрема, каонних) багатоелектронних атомів, для більшості з яких в літературі не приводяться надійні спектроскопічні дані.

Окремої серйозної уваги заслуговують безпрецедентні досягнення в останні два десятиліття в області альфа-бета- і гамма-ядерної кооперативної спектроскопії атомних і молекулярних систем, у т.ч. відкриття нових кооперативних ефектів на рівні “ядерна підсистема – електронні оболонки” (обумовлені в т. ч. і приголомшливим прогресом у розвитку та розробці лазерів ВУФ діапазону, разерів і т.д.). Тому істотного значення набуває необхідність одночасного, прецизійного, коректного врахування релятивістських, обмінно-кореляційних (одночастинкових і багаточастинкових), квантово-електродинамічних (КЕД) і ядерних ефектів, а також, зрозуміло, ефектів, обумовлених впливом зовнішніх електромагнітних полів [1-100].

Дана монографія присвячена викладенню теоретичних основ нової прецизійної релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних адронних (каонних) систем з одночасним коректним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів на основі формалізму комбінованої калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу, та розробці нового ефективного релятивістського підходу до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких систем в межах прецизійної кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем.

Особливу увагу в книзі приділено таким групам задач:

-на основі методології апарату КЕД теорії збурень та фейнманівської діаграмної техніки розвинути новий метод комбінованої релятивістської багаточастинкової теорії збурень (ТЗ RMBPT) з оптимізованим Dirac-Fock-Vreit нульовим наближенням (ODF) для послідовного опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних атомних систем з прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів та радіаційних КЕД поправок;

- на основі адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розробити нову калібрувально-інваріантну ab initio версію релятивістського енергетичного підходу з метою подальшої побудови оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів;

- розробити нову калібрувальну-інваріантну версію релятивістського енергетичного підходу до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних характеристик важких релятивістських багатоелектронних атомів (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) з прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів;

- розвинути та адаптувати до розрахунків спектрів важких атомів узагальнену техніку обчислення матричних елементів оператора релятивістської міжелектронної взаємодії з використанням методу диференціальних рівнянь;

- розвинути новий прецизійний підхід до урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів як при обчисленні енергетичних спектрів після діагоналізації секулярної матриці, так й амплітуд, сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів з урахуванням багаточастинкових обмінно-поляризаційних поправок, а також ефективну процедуру урахування станів континууму в межах релятивістська версії методу штурмовських розкладань;

- розвинути послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризацію вакууму тощо на основі методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу;

- з метою апробації нових методів провести розрахунки енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1, E2 переходів в одноразово іонізованому атомі  $\text{Hg}^+$ , енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів в атомі свинцю, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів серії радіаційних E1 переходів в  $\text{Eu I}$ , а також надважкому елементі ніхонія  ${}_{113}^{278}\text{Nh}$ ;

- виконати розрахунки енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, ітербію Yb, тулію Tm, урану  ${}^{92}\text{U}$ ; оцінити внесок ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів на основі формалізму комбінованої калібрувальну-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень;

- розвинути новий релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних характеристик екзотичних багатоелектронних каонних атомних систем на основі релятивістських рівнянь Klein-Gordon-Fock (каон) та Dirac (електронна підсистема) з одночасним урахуванням електромагнітної та сильної каон-ядерної взаємодії;

- виконати розрахунки енергетичних та радіаційних характеристик каонного азоту (тестовий розрахунок), важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану  $^{238}\text{U}$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії;

- розвинути новий ефективний релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких атомних систем та для цілої серії дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів типу  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ , який базується на основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським наближенням; оцінити вплив вибору виду самоузгодженого атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також вплив урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі.

Наукова новизна представлених результатів пов'язана з розвитком нового напрямку у сучасній оптиці та спектроскопії важких атомів, а саме релятивістської теоретичної прецизійної спектроскопії важких звичайних багатоелектронних, а також екзотичних адронних (каонних) систем з одночасним прецизійним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів і полягає у наступному:

1) Вперше розроблено новий ефективний метод комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням для послідовного опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних та каонних атомних систем з послідовним, максимально прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів (включаючи ефекти Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також Bohr-Weisskopf) та радіаційних КЕД поправок (в т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ,

зокрема, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  тощо).

II) Запропоновано нову послідовну калібрувально-інваріантну ab initio версію релятивістського енергетичного підходу на основі адиабатичного формалізму Gell-Mann & Low, по-перше, з подальшою метою побудови оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів на основі принципу мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з дірак-фоківським нульовим наближенням ODF, по-друге, до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних характеристик (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) важких релятивістських багатоелектронних атомів з прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч. поляризаційної міжквазічастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незоромому набору конфігурацій, суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та врахування станів континууму в межах узагальненої релятивістська ODF версії методу штурмовських розкладань.

III) Розвинуто новий прецизійний підхід до урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (як при обчисленні енергетичних спектрів після діагоналізації секулярної матриці, так й амплітуд, сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів з урахуванням багаточастинкових обмінно-поляризаційних поправок), як ефектів другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків в межах нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим ODF нульовим наближенням.

IV) Удосконалено послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризацію вакууму тощо на основі формалізму релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим наближенням ODF з використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges.

V) Встановлено, що у порівнянні зі стандартними неоптимізованими релятивістськими методами Хартрі-Фока (HF) та Дірака-Фока (DF) новий підхід дозволяє отримати більш точні дані як по енергіях так й амплітудам та ймовірностям радіаційних переходів, що підтверджується аналізом отриманих даних для енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних 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 одноразово іонізованому атомі Hg<sup>+</sup>, енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$ , (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) важкого атому свинцю Pb, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p^8P_{9/2,7,2}$  атому європію Eu I.

Показано, що переваги нового підходу обумовлені використанням оптимізованого нульового наближення ODF, досить повним ефективним урахуванням складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів.

Виявлено, що внесок за рахунок поляризації остову досягає 30% від значення сили осцилятора, величина калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційну ширину складає долі проценту на відміну від усіх існуючих методів сучасної атомної спектроскопії, для яких внесок досягає 5-50%. З метою отримання нової інформації для надважкого елемента ніхонія  ${}_{113}^{278}Nh$  вперше виконаний розрахунок спектру низько розташованих рівнів з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних та обмінно-кореляційних поправок.

VI) Отримано нові дані для енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема, конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ ; енергії і сили осциляторів переходів  $6s^2 6p^2 P_{1/2} - 6s^2 nd^2 D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^2 6p^2 P_{1/2} - 6s^2 ns^2 S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ), енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  Yb, сил осциляторів переходів  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2 np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2 nf[5/2]_2$ , причому для деяких рідбергівських резонансів вперше передбачені значення їх енергій та ширин.

В роботі вперше показано, що ключовими факторами, які забезпечують адекватну точність опису спектроскопічних характеристик ітербію Yb, є одночасне прецизійне врахування релятивістських,



радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, а також - використання оптимізованих базисів орбіталей.

VII) Вперше із спектроскопічною точністю виявлено унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії ітербію Yb і тулію Tm, пов'язані з аномально малими ширинами автоіонізаційних та рідбергівських резонансів, *й які можна розглядати як відкриття елементів нової нелінійної некулонівської фізики важких атомних систем.*

VIII) Вперше отримано прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня  $32899.790 \text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5880-5890) \text{ Å}$ ), нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790 \text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137) \text{ Å}$ ), рівня  $32857.449 \text{ см}^{-1}$  ( $5f36d7s8s \ ^7L_5^0$ ) (послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914) \text{ Å}$ ), а також рівня  $33083.3 \text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951) \text{ Å}$ ).

На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість значень енергії в серіях встановлено, що наведена у літературі фактично єдина інформація по вказаним вище рідбергівським серіям  $^{92}\text{U}$  (дані групи Solarz et al. [Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory, University of California]) містить певні неточності, пов'язані із вкрай високою складністю шуканих рідбергівських серій.

IX) Вперше запропоновано та досліджено новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних характеристик важких каонних атомних систем, який базується на релятивістській теорії Klein-Gordon-Fock (каон) й дозволяє послідовно виконати одночасне урахування (кулонівський внесок, радіаційні поправки на основі методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges тощо) електромагнітної взаємодії та сильної каон-ядерної взаємодій з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу.

X) Виконано нові обчислення енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також відповідно ймовірностей вказаних радіаційних переходів, енергії рідбергівських переходів в спектрі важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану

<sup>238</sup>U з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії.

Проведено порівняння експериментальних та альтернативних теоретичних даних (зокрема, отриманих на основі каскадної моделі Fermi-Teller з використанням коду Leon-Seki, послідовних теоретичних Klein-Gordon-Fock методів Indelicato et al., Batty et al., Khetselius et al.), яке вказує на достатньо високу ефективність розвинутого нового релятивістського підходу в теорії важких каонних систем та на необхідність прецизійного урахування перелічених вище груп поправок для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією й дуже складним експериментом.

XI) Вперше в межах прецизійної кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем розвинуто новий релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких систем, який базується на основі нового формалізму калібрувально-інваріантної МВРТ з оптимізованим дірак-фоківським наближенням ODF.

Вперше виявлено, що поправка, пов'язана з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях дискретного та безперервного спектрів, при низькій енергії суттєво перевищує поправку на екранування (відносно до кулонівського поля), однак із зростанням енергії поправка на екранування поступово зрівнюється з обмінним внеском.

Практичне значення представлених у книзі результатів полягає у наступному. Розвинута в роботі релятивістська теоретична прецизійна спектроскопія важких звичайних багатоелектронних, а також екзотичних адронних (каонних) систем забезпечує отримання наборів фундаментальних енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем, знання яких має вирішальне теоретичне й практичне значення для величезної кількості сучасних задач, зокрема, атомної і молекулярної оптики та спектроскопії, астрофізики, фізики термоядерної, астрофізичної, лабораторної плазми, токамака ( $\theta$ -пінча, капілярного розряду), плазмохімії, лазерної фізики і квантової електроніки, розробки нових ефективних схем генерації, включаючи створення разерів, гразерів, а також суміжних галузей фізики, а саме фізики ядра, елементарних частинок, високих енергій, фізики прискорювачів, колайдерів.

З іншого боку, нові дані по спектроскопії важких та надважких звичайних та адронних (каонних) систем дуже важливі в плані теоретичної перевірки нових ефектів на стику традиційної атомної оптики та спектроскопії, а також фізики електрослабких взаємодій, зокрема, пошуку ефектів Нової фізики за межами Стандартної Моделі, з'ясування ролі слабких взаємодій в атомній спектроскопії, вивчення властивостей нового стану речовини, так званої рідбергівської матерії тощо. Отримані в роботі набори енергетичних та радіаційних характеристик мають величезне практичне значення для вирішення задач побудови оптимальних схем лазерного фотоіонізаційного поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів та ядерних ізомерів, зокрема, атомів елементів лантанодів, актиноідів, урану, трансуранових елементів тощо.

Розвинуті в роботі методи безпосередньо призначені для дослідження енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик важких та надважких атомів – елементів періодичної таблиці Менделєєва, інформація про які за теперішнього часу є або не зовсім достовірною або взагалі відсутня.

Більшість представлених у книзі результатів представлялись та обговорювались на таких, переважно міжнародних наукових конференціях, конгресах та школах: International Conference on Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy (Odessa, Ukraine, 2015), International Nuclear Physics Conference (Adelaide, Australia, 2016), 8<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016; Kielce, Poland, 2016), 13<sup>th</sup> SPARC Topical Workshop Jagiellonian University (Kraków, Poland, 2016), 23<sup>rd</sup> International Conference on Spectral Lines Shapes (Torun, Poland, 2016), International Young Scientists (and workshop) Symposium on Optics of Multicharged Ions and New Ionic Technologies (Odessa, Ukraine, 2016), 28<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics (Gauteng, South Africa, 2016), International Conference “Geometry in Odessa-2016” (Odessa, Ukraine, 2016), XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXI; Vancouver, BC, Canada, 2016), 11<sup>th</sup> Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists Munich, Germany, 2017), 29<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics (Paris, France, 2017), International Conference on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics (QSCPM-2018; Odessa, Ukraine, 2018), XXX IUPAP Conference on Computational Physics (Davis, USA, 2018), International

Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS, Dublin, Ireland, 2018), 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems (Torun, Poland, 2018), 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII, Kruger Park, South Africa, 2018), 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2019, Deauville, France, 2019), 15<sup>th</sup> International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications” (Lodz, Poland, 2019), XXIV International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine, 2019 *(здобувач був членом організаційного комітету)*), IV International Conference “Advances in Atomic, Nuclear and Laser Optics and Spectroscopy” (Odessa, Ukraine, 2020), а також на наукових семінарах Інститута математики, фізики та інформатики та Науково-дослідного інституту фізики Одеського національного університету ім. І.І. Мечникова, Державного університету “Одеська політехніка”, Одеського державного екологічного університету (ОДЕКУ), а також Технічного університету Софії (Болгарія), Лодзь та Торунь (Польща), International Centre on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (Odessa), International Centre on Quantum Optics and Laser Physics (Odessa) тощо.

Автори вважають своїм приємним обов’язком висловити глибоку подяку лауреату Нобелівської премії Walther Kohn за цінні поради та корисні обговорення в плані розвитку оптимізованої теорії Dirac-Fock і її порівняння з теорією функціонала густини Walther Kohn на основі рівнянь Dirac-Kohn-Sham, за корисне рецензування важливі коментарі та поради заслуженому діячу науки і техніки України, доктору фізико-математичних наук, професору Петру Олексійовичу Кондратенко (Національний авіаційний університет, м. Київ), доктору фізико-математичних наук, професору Олександрю Валентиновичу Тюріну (Одеський національний університет ім. І. Мечникова), доктору фізико-математичних наук, професору Валентину Валентиновичу Усову (Південноукраїнський національний педагогічний університет ім. К. Ушинського, м. Одеса).

# РОЗДІЛ I

## СУЧАСНІ ПІДХОДИ В ТЕОРЕТИЧНІЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКІЙ СПЕКТРОСКОПІІ ВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ. ОГЛЯД ІСНУЮЧИХ МЕТОДІВ РОЗРАХУНКУ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК АТОМІВ ТА ІОНІВ

### 1.1 Загальний огляд теоретичних методів розрахунку спектрів і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів

До теперішнього часу, з огляду на величезне значення, яке відіграє атомна спектроскопія, була розроблена досить велика кількість різних методів розрахунку енергетичних і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів, з урахуванням в тій чи іншій мірі кореляційних, релятивістських, а також радіаційних (останні особливо важливі для важких атомів та важких іонів високої кратності іонізації) ефектів [1-104]. Існуючі методи досить детально розглянуті в цілому ряді оглядів, монографій [1-250].

До числа найбільш широко використовуваних і досить популярних методів, перш за все, слід віднести метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока (ХФ), Дірака-Фока (ДФ) в одно- і багатоконфігураційному наближенні, відносно новий метод мега-ДФ, методи нерелятивістської та релятивістської теорії збурень (ТЗ) по  $1/Z$  ( $Z$  – заряд ядра атома), ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення, з ХФ або ДФ нульовим наближенням, метод псевдопотенціалу, метод функціонала щільності, наближення випадкових фаз в нерелятивістському та релятивістському варіантах, метод одно- і багатоканального квантового дефекту та ін.

Зрозуміло, що розвиток методів розрахунку одночасно супроводжувався появою відповідних чисельних кодів РС (комплексів програм). В останнє десятиліття серйозним проривом стало створення і використання в багатьох лабораторіях комплексів програм на основі різних версій ДФ, в т.ч. так званого методу мега-ДФ, ДФ-Брейт (пакети- packages “AS”, “Hartree-Fock”, “MCHF” “Dirac”-package, “Beta-package”, “QED”, “FAS”, “GRASP”, “BERTHA”), а також “Superstructure”, “Cowan-ISAN”, “Superatom-ISAN”, Cowan code, Hullac, MCDF, RMBPT та ін.) [1-116, 220-224].

На основі зазначених методів і РС для багатьох атомів та іонів були розраховані енергетичні, радіаційні та спектроскопічні властивості (спектри, енергії рівнів, ймовірності радіаційних переходів, оже-переходів, перерізи збудження, іонізації, зіткнень, ширини радіаційного та автоіонізаційного розпаду, штарківських та зеєманівських резонансів та ін.). Ці розрахунки мали дуже велике значення для вивчення і розуміння спектрів багатьох атомів та іонів, а також різноманітних радіаційних процесів з їх участю.

У той же час, практично всі традиційні методи, включаючи навіть досить просунуті в теоретичному та особливо обчислювальному відношенні методи, незважаючи на визнані переваги, мають ті чи інші недоліки. Особливо їх недосконалість проявляється при виконанні розрахунків характеристик важких і надважких атомів та іонів, атомів в сильних зовнішніх електромагнітних полях, розрахунків спектру високозбуджених, автоіонізаційних станів, що лежать в області континууму, в тому числі, в присутності зовнішніх електричного та лазерного полів і т.д.

Як наслідок, зазначені методи у переважній більшості характеризуються низькою точністю, причому помилка обчислень може перевищувати кілька тисяч зворотних  $\text{см}^{-1}$  [76-124].

Нижче буде наданий загальний огляд та критичний аналіз теоретичних методів розрахунку спектрів і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів, розглянуті сучасні найбільш послідовні та потужні методи та моделі теоретичної атомної спектроскопії, у т.ч. процедури урахування релятивістських, радіаційних, квантово-електродинамічних, обмінно-кореляційних ефектів в розрахунках спектроскопічних властивостей як звичайних важких атомів та іонів, так й так званих екзотичних (адронних, у т.ч. каонних) та бета-розпадних атомних систем

Наприклад, використання для обчислення спектроскопічних характеристик важких звичайних та екзотичних атомних систем таких традиційних методів розрахунку, як метод самоузгодженого поля, квазікласичного наближення, спрощеної ТЗ, може призвести до свідомо невірних результатів.

Зокрема, теоретичні дані можуть відрізнятися від експериментальних у декілька разів (тобто різниця може досягати кілька сотень відсотків)!

Зауважимо, що основними, добре відомими, недоліками методу самоузгодженого поля [1-5, 138] є: а) недостатня точність обчислення матричних елементів операторів фізичних величин, які описують основні властивості атомів; б) недостатньо швидка збіжність відповідних рядів ТЗ.

Згідно з [2-5, 15, 138, 247, 263, 270, 271, 280], при розрахунках складних атомів та іонів, а також рідбергівських та автоіонізаційних станів атомних систем вкрай важливого значення набуває коректне прецизійне урахування таких специфічних обмінно-кореляційних ефектів як швидке “розмазування” вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, ефект суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиск континууму і т.д.

В рамках вище згаданих методів ці ефекти досі не допускають адекватного опису енергетичних і спектроскопічних характеристик. Взагалі, слід пам'ятати, що необхідність акуратного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів в прецизійній теорії багатоелектронних атомів передбачає систематичний розгляд різних класів обмінно-кореляційних поправок та їх послідовне систематичне обчислення з використанням фейнманівської техніки діаграм.

Як вказувалося, напр., в роботах [45-106], некоректне урахування шуканих ефектів фактично призводить до переоцінки ролі колективних кореляційних ефектів в атомній системі. В результаті з'являються помилки в чисельних розрахунках рівнів енергії та інших характеристик і, як наслідок, різко ускладнюється аналіз спектральних закономірностей. Крім цього, серйозні труднощі виникають під час розрахунків атомних спектрів з урахуванням кореляційних ефектів методом накладення конфігурацій, ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах у повному багатоконфігураційному (МК) наближенні Хартрі-Фока (ХФ=HF) або його релятивістському варіанті, а саме, Дірака-Фока (ДФ=DF).

При цьому також виникає проблема, пов'язана з розрахунком великих енергетичних матриць.

Ще одна проблема дослідження спектрів високобуджених рідбергівських станів технічного характеру пов'язана з необхідністю врахування внеску безперервного спектра у відповідні матричні елементи. На можливість використання чисто дискретних функцій з метою врахування неперервного спектра в атомних розрахунках вперше звернув

увагу Фок, в подальших роботах ця ідея була реалізована при розрахунку поправок теорії збурень до станів водневоподібних атомів.

Так званий метод штурмовських розкладань в рамках ХФ, ДФ наближення застосовувався в розрахунках штарківських зсувів, статичної та динамічної поляризованості атомів та іонів [2-5, 15, 138, 247, 274, 275].

Зазначені проблеми суттєво загострюються у випадку проведення розрахунків спектрів важких і надважких атомних систем або таких істотно релятивістських систем, як важкі багатозарядні іони [1-39, 263, 274, 275, 280]. Її головною проблемою тут стає відома із самого початку розвитку квантової механіки атомів та молекул проблема побудови оптимізованого одно-квазічастинкового наближення, яке генерує відповідно оптимальні (оптимізовані) базиси електронних (адронних у випадку адронних атомів) хвильових функцій, або орбіталей.

Використання в традиційних методах базисів, які генеруються в нульовому наближенні методів самоузгодженого поля типу звичайних ХФ, ДФ, спрощених версій методу функціоналу густини (ФГ) та аналогічних, у розрахунках різноманітних констант елементарних електронно-атомних процесів (розсіювання електронів на атомах, процеси зіткнень, спектри автоіонізаційних та рідбергівських станів, процеси фотозбудження, фотоіонізації тощо) часто призводить до відмінностей в результатах в кілька разів.

Як було підкреслено в [21-22], фундаментальна причина цього недоліку пов'язана з обов'язковістю побудови оптимізованого одноквазічастинкового уявлення, в рамках якого генеруються оптимальні максимально чисті базиси векторів станів.

Крім того, для більшості методів, до речі, перерахованих вище, ця проблема стоїть вкрай гостро, оскільки в разі розрахунку спектрів важких атомів з одночасним урахуванням релятивістських, кореляційних, ядерних та, нарешті, радіаційних ефектів, виявляється, що не виконується фундаментальний фізичний принцип калібрувальної інваріантності [1-5, 21-24, 45-106].

Як відомо, згідно із положеннями квантової електродинаміки (КЕД), як єдиної послідовної теорії електромагнітних взаємодій, фізичні характеристики природно не повинні залежати від калібрування потенціалів електромагнітного поля або фотонного пропегатора. Але, як показує багаточисельний досвід атомних розрахунків (див., напр., [1-116]),



при проведенні конкретних розрахунків виявляється, що внески окремих порядків ТЗ фактично залежать від калібрування фотонного пропагатору, причому шукана калібрувальна неінваріантність є наслідком наближеного урахування саме багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, що також свідчить про низьку якість обчислюваних базисів електронних хвильових функцій.

Доречно нагадати класичний приклад прояву порушення принципу калібрувальної інваріантності в атомній спектроскопії, а саме, відомий факт розбіжності значень сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів, радіаційних ширин, розрахованих за формулами “довжини”, “швидкості”, “прискорення” [36, 51-59, 76-104]. Аналогічна картина має місце й для перерізів збудження.

Точність збігу цих величин вважається ключовим показником якості розрахунку і, відповідно, якості генерації базису хвильових функцій нульового наближення. В результаті такі популярні методи атомних розрахунків, як методи самоузгодженого поля ХФ, ДФ, а також досить ефективні в обчислювальному відношенні методи ФГ, та популярні в окремих задачах методи модельного потенціалу (МП) і псевдо-потенціалу (ПП) або дають результати, які мають не зовсім адекватну спектроскопічну точність, або вони взагалі не пристосовані для масових розрахунків атомних констант складних багатоелектронних атомів, іонів, у т.ч. багато зарядних іонів.

Важливо зазначити, що в останні роки отримали суттєвий розвиток дійсно ефективні методи типу мега-ДФ, різні версії релятивістської ТЗ, квантово-електродинамічної (КЕД) ТЗ, однак і вони вимагають виконання акуратного одночасного високоточного врахування всіх груп релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних та радіаційних ефектів, особливо при вивченні характеристик важких атомів та іонів, не говорячи вже про необхідність використання серйозних обчислювальних ресурсів. Цікаво, що навіть у таких просунутих версіях як метод мега-ДФ, або КЕД (=QED) ТЗ також зустрічається проблема генерації оптимізованих базисів релятивістських орбіталей (електронних хвильових функцій) та виконання принципу калібрувальної інваріантності.

Серед ефективних способів подолання вище згаданих складнощів можна зазначити підхід, запропонований в роботах [33-38], який полягає у побудові оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в теорії

релятивістського атома (відповідно, передбачається коректне врахування багаточастинкових кореляційних ефектів).

Інші альтернативні методи та схеми побудови ефективного одноквазічастинкового наближення включають метод натуральних орбіталей Девідсона, підхід Dietz-Heß та інші [2-5, 21-24, 37-40, 107-116]. Підхід Dietz-Heß [24] базується на використанні варіаційно отриманих рівнянь типу ХФ (так звані  $g$ -ХФ рівняння), які можна вважати більш раціональними, ніж у звичайній схемі ХФ, однак про повну або розумну ступінь інваріантності мова не йде.

Інші методики генерації різного ступеня оптимальності базисів електронних хвильових функцій проаналізовані у відомих роботах [1-5]. Напр., у відомому підході Рудзікаса-Каняускаса в рамках амплітудної схеми розрахунку сил осциляторів калібрувальна постійна використана в якості підгінного параметру.

Проте, за винятком відомої теоретичної непослідовності, останній підхід в ряді важливих випадків не забезпечує спектроскопічну точність розрахунку.

Для нас принципово важливою є серія робіт Glushkov-Ivanov-Ivanova [21-22, 25-37], в яких були закладені теоретичні основи одного з найбільш послідовних за теперішнього часу підходів щодо вирішення проблеми побудови оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в теорії релятивістського атома і розвинена нова процедура побудови калібрувально інваріантних базисів релятивістських орбіталей (тобто базисів електронних хвильових функцій).

Шукана процедура заснована на застосуванні фундаментального принципу мінімізації калібрувально-неінваріантного внеску поляризаційних діаграм четвертого порядку КЕД ТЗ в енергію системи. Для її реалізації в [21, 22] використаний апарат КЕД ТЗ та адіабатичний формалізм Гелл-Мана-Лоу.

В той же час у перших оригінальних версіях підходу Glushkov-Ivanov-Ivanova [21, 22] використовувались спрощені процедури оптимізації базисів, зокрема, автори обмежувалися початково лише воднеподібним наближенням при визначенні класу функцій для опису електронної густини в атомі. Далі розроблялися версії підходу Glushkov-Ivanov-Ivanova [3, 21, 222] чисельної генерації оптимальних базисів поза рамками

водневоподібного наближення. Тут слід особо виділити підхід Khetselius [106].

Також корисно згадати й роботи [35, 32], в яких для розв'язання задач з'ясування ефекту лазерного посилення і кінетики заселення рівнів в плазмі Ne-, Ni-подібних іонів використана схема [36] з доповненням базису дискретних станів рівняння Дірака штурмовським доповненням для врахування станів континууму (підхід Ivanov-Ivanova).

У нашій роботі далі використовується послідовна версія релятивістського калібрувально-інваріантного підходу Glushkov-Ivanov-Ivanova, яка найбільш відповідає задачі обчислення енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів з одночасним, прецизійним урахуванням релятивістських, кореляційних, ядерних, КЕД поправок [247-251, 254, 263, 270, 271, 274, 275, 278-280].

Треба визнати, що в розрахунках спектрів важких і надважких атомних систем проблема коректного одночасного врахування релятивістських, радіаційних, а також ядерних й кореляційних ефектів набуває виняткового значення.

Далі розглянемо деякі важливі для нас тенденції у розвитку квантово-механічних підходів щодо якісного та кількісного урахування релятивістських, радіаційних (тобто квантово-електродинамічних), а також обмінно-кореляційних (або обмінно-поляризаційних) поправок при розрахунку енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик багатоелектронних систем.

Досить детальні огляди шуканої проблеми виконані в роботах [1-15, 45-106, 274, 275].

## **1.2 Урахування релятивістських та радіаційних ефектів в розрахунках енергетичних і спектральних характеристик багатоелектронних атомів та іонів**

В традиційній нерелятивістській квантовій механіці атомів для нерелятивістської частини енергії [129, 133] традиційно використовують ряд ТЗ по  $1/Z$  у такому вигляді:

$$E^N = E_0 Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2 + \Delta E_3 / Z, \quad (1.1)$$

де  $Z$  – заряд атомного ядра,  $E_0, \Delta E_1, \Delta E_2, \Delta E_3, \dots$  – чисельні коефіцієнти, що розраховуються з використанням базису електронних функцій в тому чи іншому методі. З урахуванням релятивістських ефектів відповідне повне розкладання для енергії має вигляд:

$$E^N + E_{rel}^s = E_0 Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2 + \Delta E_3 / Z + \left( \alpha^2 / 4 \right) \left[ E_0^r Z^4 + \Delta E_1^r Z^3 \right]. \quad (1.2)$$

Очевидно й зрозуміло, що базовим рівнянням для теоретичного опису спектрів атомних систем звичайно є рівняння Дірака, яке враховує релятивістські поправки нижчого порядку по сталій тонкої структури. Релятивістські поправки в рамках оператора Брейта зазвичай можуть бути розділені на кілька частин:

$$\langle H_B \rangle = E_{rel}^s + E_{rel}^p + E_{rel}^d. \quad (1.3)$$

У (1.3а) член  $E_{rel}^s$  визначає зсув усього терма як цілого, а саме:

$$E_{rel}^s = \left( \alpha^2 / 4 \right) \left( E_0^r Z^4 + \Delta E_1^r Z^3 \right). \quad (1.4)$$

Доданок  $E_{rel}^p$  визначає розщеплення терма, нарешті, останній член визначає змішування термів за рахунок спіно-орбітальної взаємодії.

Останній в (1.3) член визначає змішування термів за рахунок спіно-орбітальної взаємодії. З урахуванням саме цих трьох членів в більшості робіт виконувалися теоретичні оцінки релятивістських поправок, зокрема, на основі методу ТЗ по параметру  $1 / Z$  або в рамках нерелятивістської ТЗ по міжелектронній взаємодії.

Релятивістські поправки для невзаємодіючих електронів можна оцінити, наприклад, на основі, відомої формули Зоммерфельда. Так, для 1s-, 2s-, 2p-електронів можна записати: 1s-, 2s-, 2p-електронів можна записати:

$$\alpha^2 \varepsilon_{1s_{1/2}} = \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2} - 1;$$

$$\alpha^2 \varepsilon_{2s_{1/2}} = \sqrt{1/2 + (1/2)\sqrt{1 - \alpha^2 Z^2}} - 1;$$

$$\alpha^2 \varepsilon_{2p_{3/2}} = \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2/4} - 1. \quad (1.5)$$

У наближенні Паулі в конкретних розрахунках зазвичай обмежуються двома членами розкладання (1.3). Для наступних членів можна записати [5]:

$$\Delta E_p(1s) \approx Z^2 (\alpha Z)^4 \left[ \frac{1}{16} + \frac{5}{128} (\alpha Z)^2 + \frac{7}{256} (\alpha Z)^4 + \frac{21}{1024} (\alpha Z)^6 \right];$$

$$\Delta E_p(2s) = \Delta E_p(2p_{1/2}) \cong Z^2 (\alpha Z)^4 \left[ \frac{21}{1024} + \frac{429}{32768} (\alpha Z)^2 + \right. \\ \left. + \frac{2431}{262144} (\alpha Z)^4 + \frac{9043}{599187} (\alpha Z)^6 \right];$$

$$\Delta E_p(2p_{3/2}) \cong Z^2 (\alpha Z)^4 \left[ \frac{1}{1024} + \frac{5}{32768} (\alpha Z)^2 + \right. \\ \left. + \frac{7}{262144} (\alpha Z)^4 + \frac{1}{199729} (\alpha Z)^6 \right]. \quad (1.6)$$

Саме ці формули використовувалися при розрахунку  $\Delta E_p$  методом ТЗ по параметру  $1/Z$  (див., напр., [1-5, 124]).

Згідно [1-5, 129-133, 274, 275], корисно оцінювати внесок того чи іншого ефекту в енергію атомної системи, пам'ятаючи порядок величини (див. нижче табл. 1.1), що визначається такими сталими як заряд і маса ядра ( $Z, M$ ) та стала тонкої структури  $\alpha$ .

Теорія обчислення радіаційних поправок до енергії рівнів в атомних системах має досить довгу історію розвитку і перші роботи відносяться ще до 50-х, 70-х років минулого сторіччя.

Згадаємо, що перші експериментальні вказівки на розбіжність рівнів

енергії  $2s_{1/2}$  і  $2p_{1/2}$  в спектрі атому водню з'явилися в 30-х роках минулого сторіччя, й далі Лемб та Резерфорд однозначно показали, що рівень енергії  $2s_{1/2}$  дійсно зміщений відносно рівня  $2p_{1/2}$  на  $\sim 1000$  МГц.

Це відкриття, а також перші модельні розрахунки Бете послужили поштовхом до розвитку саме КЕД (напр., [41-44, 60, 61, 247-251, 341-343, 355-360, 392]). Серед перших теоретичних підходів слід вказати відомі модельні розрахунки Кролла і Лемба різниці водневих рівнів  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$  в першому незникаючому наближенні ТЗ, роботи Вайскопфа і Френча й багато інших.

Таблиця 1.1 – Фізичні ефекти, що дають внесок в загальну енергію і порядки їх величини

Величина внеску	Порядок величини
Нерелятивістська енергія	$Z^2$
Мас-поляризаційна поправка	$Z^2 \mu / M$
Релятивістські брейтівські поправки	$Z^4 \alpha^2$
Релятивістська поправка на віддачу	$Z^4 \alpha^2 \mu / M$
Лембівський зсув	$Z^4 \alpha^3 \ln \alpha$
Вищі КЕД поправки, у т.ч. поправки Källén-Sabry та Wichmann-Kroll	$\alpha^2 (\alpha Z) - \alpha (Z\alpha)^n$

Зауважимо, що в спектроскопії важких атомів та іонів урахування радіаційних поправок грає принципово важливу роль. Корисно пам'ятати, що фізичною причиною радіаційного КЕД ефекту, зокрема лембівського зсуву, є квантові флуктуації вакууму електромагнітного та електрон-позитронного полів, які змінюють потенційну енергію взаємодії електрона з ядром в атомній системі. Відомо [341, 355, 392], що так звані нульові коливання електромагнітного поля напруженості  $E$

$$E = \sum_{k, \mu} E_{k, \mu} \exp(-i\omega_k t), \quad (1.7)$$

де  $k$  та  $\mu$  – відповідно хвильовий вектор та поляризація фотона, викликають тремтіння електрона із середнім значенням квадрата амплітуди:

$$\delta r^2 = \sum_{k\mu} (e/m)^2 (E_{k,\mu}^2 / \omega_k^4) \approx (2\alpha / \pi)(\hbar / mc)^2 \ln(Z\alpha)^{-2}, \quad (1.8)$$

де  $m$  – маса електрона.

Шукане тремтіння далі веде до змінення відповідного потенціалу взаємодії, а саме виникає поправка:

$$\delta V = (1/6)\delta r^2 \partial^2 V / \partial r^2 \quad (1.9)$$

і відповідно зсув рівня енергії у спектрі атому визначається виразом [124, 341, 355, 392]:

$$\delta E = (1/6)\delta r^2 \langle \partial^2 V / \partial r^2 \rangle = (2\pi/3)\delta r^2 Z e^2 w, \quad (1.10)$$

де  $w$  – ймовірність знаходження електрона в точці  $r=0$ , а символ  $\langle \dots \rangle$  відповідає квантовому усередненню за станом електрона

Іншим радіаційним ефектом [124] є поляризація вакууму навколо точкового заряду ядра через віртуальне народження та анігіляцію електрон-позитронних пар. Цей ефект призводить до спотворення кулонівського потенціалу, збільшуючи ефективний заряд ядра на відстанях порядку комптонівської довжини хвилі електрона  $\hbar / mc$  і далі відповідно виникає негативна поправка до енергії рівня.

Поляризаційний зсув енергетичних рівнів в спектрі атомної системи зазвичай розглядається у наближенні потенціалу Uehling-Serber (див., напр. [1-3, 60, 61, 124, 340, 354, 388]).

Але у більшості випадків сучасні розрахунки поправки на поляризацію вакууму обмежені, як правило, першим членом розкладання по параметру – стала тонкої структури  $\alpha$  (див., напр., [1-5]).

Шукане значення радіаційної поправки, обумовленої ефектом поляризації вакууму, як правило, представляється у вигляді матричного елемента поляризаційного потенціалу Uehling-Serber  $VH_p$ , який записується у вигляді суми [1-3, 124]:

$$VH = VH_1 + VH_3 + \dots \quad (1.11)$$

Кожна складова в (1.11) включає “n” польових вставок в електронну петлю поляризаційної діаграми другого порядку; кожний доданок зазвичай обчислюється за допомогою розкладання по параметру  $\alpha Z$ . Шукані розрахунки показують для водневоподібних іонів, що при заряді ядра  $Z > 80$  всі провідні члени цього розкладання аж до  $\sim (\alpha Z)^7$  дають внесок приблизно однакового порядку, й в результаті в великій мірі компенсують один одного. Фактично, у багатьох випадках урахування вищих порядків розкладання по  $\alpha Z$  в (1.11) приводить тільки до втрати точності розрахунку. Це досить переконливо показано, наприклад, для основного стану водневоподібного іона при  $Z \approx 40$  [124, 340].

Перший член в (1.11) повністю враховує три перших доданки точного розкладання, а також з достатньою в світлі вимог сьогодення точністю – решту внеску. Відомо, що кулонівські поправки вищих порядків до цього наближення не перевищують 10% навіть для так званого критичного значення заряду ядра [1-3, 124]. Треба зазначити, що перший член в (1.11) відомий також, як потенціал Uehling-Serber. Шуканий потенціал для точкового ядра зазвичай записується в наступному стандартному вигляді (див., напр. [1-3, 60, 61, 124, 340, 354, 388]):

$$U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi r} \int_1^{\infty} dt \exp(-2rt/\alpha Z) \left(1 + 1/2t^2\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} \equiv -\frac{2\alpha}{3\pi r} C(g), \quad (1.12)$$

$$g = \frac{r}{\alpha Z}. \quad (1.13)$$

В [1-3] для розрахунку водневоподібних іонів була запропонована досить ефективна процедура перевизначення вкладу потенціалу Uehling-Serber шляхом додаткового врахування членів розкладання по параметру  $r/\alpha Z$ . Більш проста модель наближення Uehling-Serber реалізована [340, 354] також в розрахунках H-подібних іонів.

Слід зазначити, що моделі, розвинуті в [340, 354], використовувалась багатьма дослідниками у розрахунках як легких так й важких атомів.



Більш ефективна методика розрахунку ефекту поляризації вакууму базується [60, 61] на використанні наближення Uehling-Serber та модельних функцій для апроксимації точного потенціалу Uehling-Serber (квадратура (1.12)) з високою аналітичної точністю.

В (1.11) перший доданок добре описаний в [124], два інших були отримані в роботах Іванова і співр. [60, 61]. З обчислювальної точки зору функцію  $C(g)$  особливо зручно апроксимувати спрощеною аналітичною формулою в універсальній обчислювальній програмі. Для її визначення в [60, 61] (див. також інші аналогічні модельні представлення в [3, 138]) використовуються асимптотики функції  $C(g)$  в двох граничних випадках:

$$C(g) \rightarrow \tilde{C}_1(g) = \ln(g/2) + 1.410548 - 1.037845g \quad (1.14)$$

$$g \rightarrow 0$$

$$C(g) \rightarrow \tilde{C}_2(g) = -1.8800 \exp(-g) / g^{3/2} \quad (1.15)$$

$$g \rightarrow \infty$$

У формулі (1.12) урахування двох граничних виразів для функції  $C(g)$  можна зробити наступним чином [3, 60, 61, 138]:

$$\tilde{C}(g) = \tilde{C}_1(g)\tilde{C}_2(g) / (\tilde{C}_1(g) + \tilde{C}_2(g)) \quad (1.16)$$

Для основного стану водневоподібного іона значення помилки, що виникає при використанні наближення (1.11)-(1.16), не перевищує 2-5% загального поляризаційного зсуву в широкому інтервалі зміни заряду ядра  $Z=10-170$ . Основна частина шуканої помилки пов'язана з похибкою у визначенні  $\tilde{C}_2(g)$  в (1.16).

Добре відомо, що характерною відстанню, на якій присутній ефект поляризації вакууму, є комптонівська довжина хвилі електрона:

$$\lambda_C^e = \hbar / m_e c = 386.16 \text{ фм.}$$

В звичайних атомах радіус борівської орбіти електрона  $r_0 = \hbar^2 / Zme^2$  як правило, набагато більше комптонівської довжини

$\hbar / mc$ , внаслідок чого зазначена поправка виявляється значно меншою, ніж внесок власно-енергетичної діаграми.

В той же самий час у так званих екзотичних (адронних) атомних системах має місце зовсім інше співвідношення між внеском за рахунок поляризації вакууму та власно-енергетичною частиною лембівського зсуву, яке, безсумнівно, пов'язано із наявністю сильно взаємодіючої частинки, зокрема, напр., каону або піону і т.і.

До теперішнього часу було виконано величезну кількість розрахунків радіаційних поправок до енергії рівнів, перш за все атома водню, а також водневоподібних іонів, напр., [1-3, 41-44, 60, 61, 138, 247-251, 341-343, 354-360, 388]. Також досягнуто значний прогрес в експериментальних дослідженнях і вимірі лембівського зсуву в водневоподібних іонах.

У той же час, послідовність і точність різних методик залежить від багатьох аспектів, як фундаментальних, так і чисто обчислювальних. Важливо акцентувати увагу на те, що у більшості робіт аналітичні та чисельні методи розрахунку лембівського зсуву істотно спираються на розкладання по фізичним параметрам  $1 / Z$ ,  $\alpha Z$ ,  $ZR / \alpha$  ( $Z$  – заряд ядра,  $\alpha$  – постійна тонкої структури,  $R$  – радіус ядра).

У сучасній теорії лембівського зсуву враховані провідні поправки вищих порядків по константі зв'язку  $\alpha Z$ , поправки другого порядку по  $\alpha$  у власній енергії, аномальному магнітному моменті та поляризації вакууму, а також ефекти, пов'язані з скінченністю маси і радіусом протона. В багатьох дослідженнях урахування радіаційних поправок, зокрема, власної енергетичної частини лембівського зсуву, а також поправки на поляризацію вакууму проводиться без урахування відомих членів типу Källén-Sabry (порядку  $\alpha^2(Z\alpha)$ ) і Wichmann-Kroll (порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ), що, строго кажучи, є неприйнятним для прецизійної теорії, призначеної для вирішення задач релятивістської спектроскопії важких атомних систем, напр., [1-3, 41-44, 60, 61, 138, 247-251, 341-343, 354-360, 388]).

Найбільш відомі теоретичні значення лембівського зсуву для атома водню отримані Мором et al. [340, 354, 388]. У серії робіт [60, 61] Івановим Л.Н. та співр. були проведені чисельні розрахунки різноманітних спектроскопічних характеристик важких і надважких багатозарядних іонів, зокрема, H-подібних іонів, та досліджені їх залежності від розподілу заряду в ядрі. Ще одна ефективна схема була запропонована також в

роботах Іванова Л.Н. та співр. (див. [60, 61], а також [3, 15, 138]). Його основна ідея до визначення та подальшої чисельної оцінки власно-енергетичної частини лембівського зсуву енергетичних рівнів (принаймні для високо лежачих станів) полягає у узагальненні підходу Мора.

За аналогією з ферміонним випадком можна припустити, що існує універсальна функція, що зв'язує власно-енергетичну поправку і релятивістську енергію системи (підхід Іванова-Іванової-Глушкова [21, 27]). Зручним початковим наближенням для такої функції є Н-подібна функція Мора виду [354]:

$$E_{SE}(H|Z, nlj) = 0.027148 \frac{Z^4}{n^3} F(H|Z, nlj), \quad (1.17)$$

де значення  $F$  наводяться для значень:  $Z = 10 - 110$ ,  $nlj = 1s, 2s, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$ .

Для довільного атому з зарядом ядра  $Z$  власно-енергетична частина лембівського зсуву зсув  $E_{nlj}^{SE}(\xi)$  при фіксованих  $nlj$  може бути представлена у вигляді:

$$E_{SE}(Z, nlj) = 0.027148 \frac{\xi^4}{n^3} f(\xi, nlj) (cm^{-1}) \quad (1.17a)$$

Параметр  $\xi = \left(E_{nlj}^{Rel}\right)^{1/4}$  виражається через величину  $E_R = E_{nlj}^{Rel}$

релятивістську частину енергії зв'язку каона в стані  $nlj$ . Функція  $E_{nlj}^{Rel}$  – універсальна в тому сенсі, що не залежить від форми ядра і наявності електронних оболонок в адронному, зокрема, каонному атомі.

Процедура побудови  $E_{nlj}^{SE}(\xi)$  для довільного КА з кінцевим ядром буде складатися з наступних етапів (див. [3, 21, 27, 138]):

- а) розрахунок значень  $E_R$  і  $\xi$  для станів  $nlj$  атома Н (Н-подібних іонів) з точковим ядром;
- б) побудова апроксимуючої функції  $f(\xi, nlj)$  для опорних значень  $Z$ ;
- в) розрахунок  $E_R, \xi$  значень для різних (високо лежачих) станів  $nlj$  КА з кінцевим ядром з зарядом  $Z$ ;

г) розрахунок значень  $E_{SE}$  для шуканих станів за формулою (1.17а).

Очевидно, далі можна ввести якусь апроксимуючу функцію в якості залежності:

$$f(\xi, nlj) = X_0 + X_1/\xi + X_2/\xi^2 + X_3/\xi^3, \quad (1.18)$$

причому параметри  $X_0, X_1, X_2, X_3$  визначити для спеціально обраних чотирьох опорних точок.

В якості затравочного набору опорних даних цілком адекватним є підхід, що використовує результати розрахунків  $E_{SE}$ , виконаних Мором, для Н-подібних іонів з точковим ядром та результати коваріантної регуляризації S-матриці Фейнмана [340, 354, 388].

Для того, щоб розділити енергію стану на нерелятивістську і релятивістську частини і виділити параметр  $\xi$  (див. [3, 21, 27, 138, 247-251, 254]), слід провести повний розрахунок енергії за сформульованою вище схемою з реальним значенням константи тонкої структури  $\alpha \approx 1/137$  та з  $\alpha = 0$ . Це дозволило відокремити значення  $E_R$  та  $\xi$ .

Найкраща інтерполяція досягається в разі, якщо для різних інтервалів заряду ядра  $Z$  КА використовуються всередині лежать опорні точки. В результаті власно-енергетична поправка може бути апроксимована поліномами:

$$E_{nlj}^{SE}(\xi) = \xi^4 (A_{nlj} + B_{nlj}\xi + C_{nlj}\xi^2). \quad (1.19)$$

Параметри  $\xi$  визначаються для різних станів КА, а з їх допомогою по інтерполяційних формулах (1.19) розраховані шукані  $E_{nlj}^{SE}$ .

Важливо також зазначити, що такий підхід до обчислення власно-енергетичної поправки, очевидно, виявиться більш виправданим, принаймні, ніж можливе використання в майбутньому розкладів за параметрами  $\alpha Z, ZR/\alpha$ . Принаймні для важких та надважких атомних систем це є абсолютно очевидним.

Слід підкреслити, що у багатьох роботах авторами робилась спроба вийти за межі розкладення за фізичними параметрами  $1/Z, \alpha Z, ZR/\alpha$ , які

мають вузьку область застосування.

Відомими є роботи груп Джонсона-Саперштейна, Лабзовського, Шабаєва, Фламбацма-Дзюби, Сафронової та інших, напр., [1-3, 41-44, 60, 61, 138, 247-251, 341-343, 354-360, 388].

Процедури, засновані на чисельному розрахунку власної енергетичної частини лембівського зсуву методом релятивістської функції Гріна, а також з використанням розкладання потенціалу для врахування вищих порядків КЕД поправок, були розвинені в [2, 138, 250].

Як відомо, знайти замкнутий вираз для повної функції Гріна  $G_E$  релятивістським методом не вдається, відомі вирази для неї звичайно представляють у вигляді розкладання двох типів, а саме, парціального розкладання по станам електрона з певними значеннями квантових чисел при точному врахуванні релятивістських поправок у всіх порядках  $\alpha Z$ , або розкладання в ряд за ступенями параметра  $\alpha Z$ .

В рамках такого підходу вдалося отримати ряд важливих результатів в релятивістській спектроскопії атомів та іонів, проте є очевидним, що метод розкладання по параметру  $\alpha Z$  має обмежену сферу застосування, яка відповідає малим  $\alpha Z$ , тобто легким атомним системам з малим  $Z$ , в той час як для важких та надважких систем такий підхід не буде коректним.

Слід додати, що використання недостатньо оптимальних базисів релятивістських орбіталей та ряду наближень в численних процедурах в деяких випадках не дозволяє досягти точності розрахунку на рівні похибки експериментальних вимірювань.

Також виникають проблеми при узагальненні у випадку істотно багатоелектронних систем. За теперішнього часу запропоновано багато ефективних моделей обчислення радіаційних поправок в спектрах атомів (напр., [41-44, 60, 61, 247-251, 341-343, 355-360, 392]).

В той же час, навіть найбільш послідовні методи врахування радіаційних поправок в розрахунках спектрів важких атомних систем не дозволяють в достатній мірі отримати повну інформацію для багатьох атомних об'єктів та для їх будь-якого обраного стану. Тому проблема акуратного прецизійного обчислення радіаційних поправок до рівнів енергії багатоелектронних, особливо важких та надважких атомів залишається вкрай актуальною.

Торкаючись проблеми врахування ядерних ефектів у розрахунках спектрів атомних систем, зазначимо, що практично у всіх роботах, напр.,

[41-44, 60, 61, 247-251, 341-343, 355-360, 392], де при розрахунках рівнів енергії враховувались поправки на скінченний розмір ядра, точкове ядро замінювалося скінченним, в якому розподіл заряду моделювався або на основі моделі однорідно зарядженої сфери, або у наближенні Гауса, або на основі моделі Фермі. У подальшому ми більш докладно опишемо шукані підходи щодо врахування ефекту скінченного розміру ядра.

До теперішнього часу найбільш прецизійні розрахунки проведені лише для важких водневоподібних іонів та атомів середини таблиці Менделєєва. У будь-якому випадку проблема коректного врахування поправки на скінченний розмір ядра у випадку важких багатоелектронних атомів (багатозарядних іонів) вимагає подальшого дослідження.

Таким чином, можна констатувати, що основна проблема теоретичної спектроскопії важких атомних систем пов'язана із необхідністю одночасного урахуванням релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних поправок. Як вказувалося вище, для коректного опису обмінно-кореляційних поправок у багатоелектронних важких атомах, як правило, використовуються різні версії багатоконфігураційного методу ДФ, або спрощених ДФ версій із накладенням конфігурацій.

Радіаційні поправки враховуються в основному по ТЗ з використанням розкладань за фізичними параметрами типу  $1/Z$ ,  $\alpha Z$ ,  $ZR/\alpha$ . Принципово важливо підкреслити, що будь-яке з шуканих розкладань за фізичними параметрами  $1/Z$ ,  $\alpha Z$ ,  $ZR/\alpha$  стає некоректним, очевидно, для важких систем з досить великим зарядом ядра.

Але зрозуміло, що сучасні експериментальні дослідження з використанням нових технологій вимагають детального вивчення спектрів важких і надважких атомів та іонів, в тому числі багатозарядних іонів [15].

Для отримання прецизійних даних щодо спектрів важких атомних систем також принципово важливими є послідовне врахування чисто ядерних ефектів, включаючи ефект скінченного розміру ядра, а також урахування просторового розподілу магнітного моменту усередині атомного ядра (ефект Bohr-Weisskopf). Без сумніву, особливої актуальності в цих задачах набуває послідовне врахування геометрії атомного ядра (тобто урахування ядерних поправок, зокрема, на скінченний розмір ядра) та радіаційних ефектів: поляризація вакууму і власний енергетичний зсув рівнів.

Таким чином, основні складнощі релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних атомних систем зводяться до проблеми одночасного високоточного обчислення релятивістських, брейтівських, ядерних, обмінно-кореляційних, радіаційних (КЕД) поправок.

### **1.3 Актуальні проблеми сучасної теорії каонних атомних систем та кооперативної бета-ядерної спектроскопії релятивістських атомів**

Методи теоретичної спектроскопії релятивістських атомних систем можуть бути корисні не тільки при проведенні досліджень енергетичних, радіаційних та спектроскопічних властивостей звичайних багатоелектронних атомних систем, але й у випадку так званих екзотичних, адронних або мюонних систем [301-450].

В нашій роботі особливу увагу приділено дослідженню важких каонних систем та обчисленню спектроскопічних характеристик таких атомів з одночасним урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних, а також кореляційних ефектів.

Слід зазначити, що теорія каонних систем, та взагалі екзотичних адронних атомів, містить практично такі ж проблеми, як й теорія звичайних багатоелектронних атомів, але в той же час мають місце й деякі специфічні труднощі.

Насамперед, вони пов'язані із коректним описом ефектів сильної-адрон (каон або піон) -ядерної взаємодії в таких системах.

Неважко згадати, що поняття екзотичного атому було вперше введено Фермі, Теллером, Уїлером в 1947 р. з метою пояснення експериментів з поглинання негативних мюонів у речовині [340].

В останні два десятиріччя комплекс задач з вивчення каонних атомів (частковий випадок адронних атомів) представляється особливо актуальним, як у світлі відомого прогресу експериментальних досліджень (на мезонних фабриках у лабораторіях LAMPF (США), PSI (Швейцарія), TRIUMF (Канада), ІЯФ (м. Троїцьк, Росія), RIKEN (КЕК, Японія), RAL (Великобританія), DEAR на установці DAΦNE (Італія) та ін.), так і з позиції подальшого суттєвого розвитку релятивістської спектроскопії важких атомних та ядерних систем.

Важливо зазначити, що в останні роки на вказаних вище установках планується досить перспективна програма експериментальних досліджень. Серед запланованих експериментів на установці DAΦNE слід зазначити, наприклад, вимір домішки віртуальних пар квантів в протоні, яка істотно впливає на взаємодію з каонами, також мають дивні кварки в своєму складі. Детальний опис схем експериментів з екзотичними, зокрема, адронними, каонними або піонними атомами дано, напр., в оглядах [354, 355, 401-405, 440, 448].

Типова установка включає проходження зарядженої частинки через моніторний лічильник, встановлений перед мішенню з досліджуваною речовиною. Електричний імпульс, що надходить з цього лічильника, є початком відліку інтервалу часу (часові ворота), протягом якого інші лічильники реєструють час появи (так званий час затримки) вторинних частинок – продуктів реакції, вироблених в мішені вихідною часткою. В результаті визначається тимчасовий спектр продуктів реакції і число подій, що потрапили в даний інтервал часу затримки в залежності від цього часу. Цей спектр містить найважливішу інформацію про процеси, що відбуваються.

У порівнянні з типовими експериментальними установками, більш ефективні експериментальні можливості відкриваються на так званих електронно-позитронних фабриках (Ф- і В-фабрики). Віртуальний фотон, який виникає при анігіляції частинок на зустрічних пучках  $e^+$ ,  $e^-$  (рис. 1.1), перетворюється в короткоживучий векторний мезон, що розпадається по каналу сильної взаємодії на  $K\bar{K}$  - мезони (Ф-фабрика) або  $B\bar{B}$  - мезони (В-фабрика).

Теоретичні підходи, які широко застосовувались щодо вивчення екзотичних атомних систем, описані в [331-335]. Як правило, вони базуються на використанні релятивістського рівняння Клейна-Гордона-Фока та мають на меті розв'язання проблем одночасного врахування релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних, радіаційних поправок, а також складних питань теоретичного визначення зсувів та ширин рівнів енергії в спектрах каонних атомів за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії, використовуючи дані, наприклад, рентгенівської спектроскопії каонних атомів.



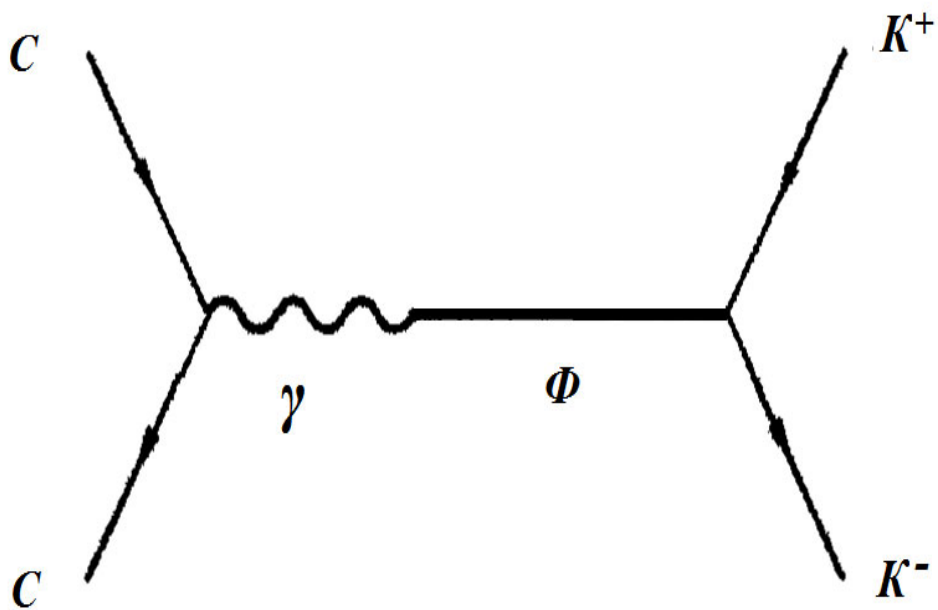


Рисунок 1.1 – Процес, що лежить в основі роботи  $\Phi$ -фабрики

Крім того, значний інтерес щодо дослідження каонних атомів пояснюється тим, що спектроскопічна інформація про них або зовсім відсутня або не є достатньо точною.

Слід зупинитися на деяких важливих теоретичних аспектах фізики адронних (каонних) атомів, пов'язаних із їх участю у каскадних процесах. По-перше, ці питання, а саме, елементарні каскадні процеси в адронних атомах, є вкрай важливими при плануванні та інтерпретації результатів відповідних експериментів з екзотичними атомними системами, в яких досліджується низькоенергетична взаємодія адронів (лептонів) з ядрами. З фізичної точки зору найбільш вагомим каскадними процесами в екзотичних атомних системах є добре відомі в класичній атомній спектроскопії кулонівські, радіаційні і оже-переходи, штарківське змішування, а також деякі суттєво ядерні або молекулярні процеси, такі як ядерне захоплення частинок у збуджених станах екзотичних атомів і деякі іон-молекулярні реакції (див. рис. 1.2).

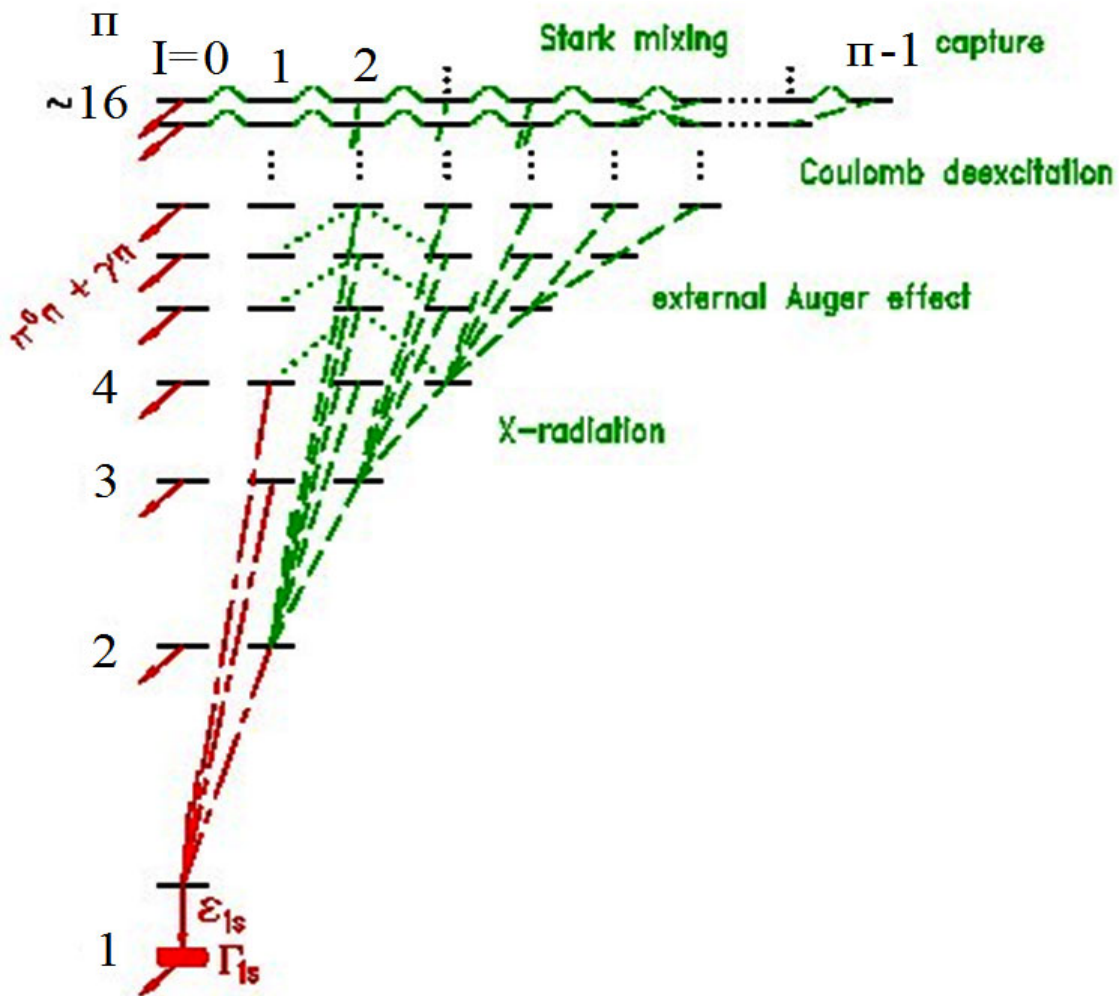


Рисунок 1.2 - Схема елементарних каскадних процесів у типовому каонному атомі

Найбільш детально опрацьовано питання з кінетикою каскадних процесів в екзотичних атомах легких ізотопів типу водню, дейтерію, але в останні десятиріччя значна увага приділяється й важким атомним системам. Відповідні експерименти виконані у лабораторіях LAMPF (США), PSI (Швейцарія), RIKEN (КЕК, Японія), DEAR на установці DAΦNE (Італія). Для інших елементів йдеться, як правило, тільки про якість модельних оцінок. Детальний огляд фізичних аспектів і моделей розрахунку динаміки каскадних процесів надано, напр., в [401-410].

До найбільш типових, як вказувалося вище, каскадних процесів відносяться:

оже-переходи

$$(pX)_{nl} + H \rightarrow (pX)_{n'l'} + H^+ + e, \quad (1.20a)$$

кулонівські переходи

$$(pX)_{nl} + H \rightarrow (pX)_{n'l'} + H, \quad (1.20б)$$

радіаційні переходи

$$(pX)_{nl} \rightarrow (pX)_{n'l'} + \gamma. \quad (1.20в)$$

Слід зазначити, що каскадні процеси є суттєвими для малих та середніх значень головного квантового числа, де вони є домінуючими.

Комплекс основних проблем теоретичної спектроскопії важких екзотичних адронних (зокрема, каонних, а саме такі системи вивчаються нами) атомних систем також пов'язаний із необхідністю одночасного та прецизійного урахування релятивістських, радіаційних, ядерних (у тому числі ефектів сильної взаємодії), а також міжчастинкових обмінно-кореляційних (поляризаційних) ефектів.

Все сказане вище у сенсі проблематики досліджень аналогічно стосується й відносно нового, достатньо перспективного напрямку у сучасній комбінованій атомно-ядерній спектроскопії, пов'язаного із дослідженням характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем (ядер) з використанням поєднаних релятивістських ядерних моделей та релятивістських методів сучасної квантової теорії атомів та іонів з коректним одночасним та прецизійним урахуванням релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних, радіаційних поправок тощо.

Основи цього нового напрямку, а саме кооперативної лазерної бета-гамма-ядерної спектроскопії атомних та молекулярних систем у сучасній оптиці та спектроскопії були закладені в роботах [16-21, 23, 27, 102, 210, 247-251, 367, 438, 440] й докладно викладені у відомих монографіях та оглядах [2-5, 138, 280].

Аналогічний висновок дійсний й для кооперативної лазерної адрон-гамма-ядерної спектроскопії.

Слід зазначити, що точність обчислень характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем у комбінованій атомно-ядерній спектроскопії пов'язана саме з урахуванням перелічених ефектів.

Фундаментальна прецизійна теорія, що претендує на опис зі спектроскопічною точністю енергетичних і спектральних параметрів важких і надважких атомів та іонів, характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем повинна адекватно враховувати весь набір релятивістських, радіаційних (зокрема, власно-енергетичний внесок лембівського зсуву та внесок за рахунок поляризації вакууму, включаючи КЕД поправки вищих порядків квантово-електродинамічної (КЕД) теорії збурень (ТЗ), а також двохпетльові поправки Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ), ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядра, ефекти Bohr-Weisskopf та Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.), складних обмінно-кореляційних поправок (включаючи поправки в наближенні випадкових фаз, поляризацію остову, екрануючі ефекти, поправки Бракнера, тиск континууму тощо).

Як й у випадку класичної спектроскопії звичайних атомних систем, більшість стандартних методів теорії, незважаючи на істотний прогрес в їх розвитку, не здатні забезпечити одночасний прецизійний опис всіх перерахованих груп ефектів і поправок для важких і надважких атомів та іонів.

Дійсно, серед сучасних методів, які застосовуються до опису атомно-ядерних систем, включаючи розрахунок характеристик  $\beta$ -розпаду, слід зазначити досить широку групу методів (та відповідно РС комплексів) розрахунку, в тій чи іншій мірі враховуючих кореляційні, релятивістські та ядерні ефекти (див. [43-106]).

Зокрема, мова йде про такі методи як метод самоузгодженого поля Хартри-Фока (ХФ, HF), метод самоузгодженого поля HF із залежними від густини силами (метод функціонала густини), метод DF в одно- і багато-конфігураційному наближенні, релятивістське наближення випадкових фаз та інші. Фактично всі вони базуються на наближенні самоузгодженого поля і моделі незалежних квазічастинок (див., напр., [1-5, 401-430]).

Переваги і недоліки (див. вище) вказаних методів добре відомі. Так недоліки різних перерахованих версій метода самоузгодженого поля можуть проявлятися, наприклад, в задачах розрахунку параметрів деяких

дозволенних бета-переходів. Фактично тут мова йде про наступне (див. докладніше [2, 3, 138, 247]):

а) невиконання принципу калібрувальної інваріантності для сгенерованих в методах відповідних базисів хвильових функцій;

б) недостатню точність для матричних операторів фізичних величин, включаючи оператори, що відповідають за надтонке розщеплення і різнотипні розпади;

в) не досить швидка збіжність відповідних рядів ТЗ і, зокрема, недостатня точність обчислення спектрів власних значень і базисів власних функцій відповідних гамільтоніанів.

Як вказувалося вище, в цьому питанні важливого значення набуває коректне урахування таких специфічних ефектів кореляції як “швидке розмазування” вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, тиск континуума тощо [3].

Вказані вище проблеми стають практично дуже серйозною перешкодою при проведенні розрахунків характеристик суттєво релятивістських, важких і надважких систем. Суттєво знижує послідовність теорії розрахунку характеристик бета-розпаду й знижує відповідну точність обчислень невиконання принципу калібрувальної інваріантності. На практиці ця обставина, як правило проявляється в тому, що використання в загально відомих підходах (метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока (ХФ, HF), метод самоузгодженого поля HF з залежними від густини силами (метод функціонала густини), метод DF в одно- і багато- конфігураційному наближенні, релятивістське наближення випадкових фаз та інші) базисів орбіталей, які генеруються в нульовому наближенні, призводить до різниці в результатах в декілька разів при розрахунках енергетичних параметрів систем, включаючи характеристики різних каналів розпаду (див. [1-5, 247, 254, 411-415]).

Калібрувальна неінваріантність виникає у перелічених методах як наслідок наближеного урахування багаточастинкових ефектів. Класичний приклад – відомий факт неспівпадіння значень сил осциляторів радіаційних переходів, розрахованих з використанням формул “довжини” і “швидкості” (див. [13, 410]). Якість генерації базиса релятивістських хвильових функцій нульового наближення може бути виражена через показник кількісного оцінювання співпадіння цих величин, який вважається головним критерієм якості розрахунку. Наприклад, різниця між

значеннями, розрахованими в рамках стандартного амплітудного підходу по формі “довжини” і формі “швидкості”, може досягати 50%.

В нашій роботі зазначена вище проблеми буде ефективно вирішена на основі адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low. Далі буде викладена нова послідовна калібрувальньо-інваріантна ab initio версія релятивістського енергетичного підходу з метою подальшої побудови оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів на основі принципу мінімізації калібрувальньо-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з дірак-фоківським нульовим наближенням ODF, та прецизійного опису ймовірностей радіаційних переходів та розпадів для важких релятивістських багатоелектронних атомів з прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів.

Друга група серйозних проблем пов’язана з необхідністю обов’язкового урахування в розрахунках обмінних та ядерних ефектів, пов’язаних не тільки з урахуванням скінченного розміру ядра, але й ефектами вищих порядків (явне урахування внеску ядерних остов-поляризаційних ефектів тощо). У цьому напрямку особливий інтерес стосовно цієї групи задач викликає прецизійне визначення впливу хімічного оточення повільної атомної системи на відповідні характеристики (ймовірності розпаду, функція Фермі, інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду)  $\beta$ -переходів, точність обчислення функції Фермі для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції, вплив вибору виду атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також вплив урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функцій Фермі та інтегральних функцій Фермі.

В багатьох випадках для розрахунку форми  $\beta$ -спектра і періоду піврозпаду в якості основи використовуються таблиці [401-405] функції Фермі та інтегральної функції Фермі.

В серії відомих праць (див., напр., [247, 411-420]) були докладно викладені й проаналізовані результати розрахунків характеристик бета-розпаду для ряду атомних систем з використанням нерелятивістського методу самоузгодженого поля ХФ або його спрощеної версії – методу

Хартрі-Фока-Слейтера, в якому урахування обмінних ефектів зазвичай виконується за допомогою введення спеціального локального потенціалу, що залежить від густини-потенціалу Слейтера.

У вказаних роботах також використана спрощена процедура урахування ефекту скінченного розміру ядра у вигляді поправки до кулонівських розрахунків, а для урахування екранування застосовувались додаткові таблиці, обчислені на основі атомного потенціалу Хьюльтена (див., напр., [247, 411-420]). У більшості робіт в розрахунках характеристик імовірностей та процесів використовувався метод обчислення релятивістських атомних полів з наближеним урахуванням обміну за Хартрі-Фоком-Слейтером ( $XFC_{\text{рел}}$ ; з урахуванням релятивістських ефектів за ТЗ) або за Діраком-Фоком-Слейтером (ДФС), так і з повним, без будь-якої апроксимації, урахуванням обміну за методом ДФ (див., напр., [247, 411-420]). Як правило, в шуканих методах передбачена можливість обчислення хвильових функцій неперервного спектра як в полі  $XFC_{\text{рел}}$ , так і в полі ДФ з повним урахуванням обміну неперервного спектра електрону, що вивчається, з усіма електронами атома.

Хоча в цих методах досягнуто певної мінімізації вище перерахованих недоліків, принаймні в розрахунках бета-розпадів, проте суттєво покращити ці методи з метою забезпечення достатньо високої точності розрахунку різних характеристик атомно-ядерних систем, включаючи, характеристики бета-розпаду, не вдалося.

Щодо існуючих проблем, які не були вирішені, мова може йти про неповне урахування міжчастинкових кореляцій (включаючи внесок так званих ядерних остов-поляризаційних ефектів, індукованих валентними протонами ядра), а також неповне виконання принципу калібровочної інваріантності і, відповідно, недостатню коректність хвильових функцій тощо.

Важливо зазначити, що в останні роки отримали суттєвий розвиток дійсно ефективні методи типу мега-ДФ, різні версії релятивістської ТЗ, КЕД ТЗ, однак і вони вимагають виконання акуратного одночасного високоточного врахування всіх груп релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних та радіаційних ефектів, особливо при вивченні характеристик важких атомів та іонів, не говорячи вже про необхідність використання серйозних обчислювальних ресурсів.

## 1.4 Висновки до розділу 1

Резюмуючи вище сказане, видається можливим сформулювати кілька тематично пов'язаних фундаментальних задач в прецизійній теорії релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних адронних атомів та іонів:

а) розробка і практичне застосування релятивістського підходу до кількісного опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів (про більшість яких відсутня будь-яка спектроскопічна інформація) з прецизійним та одночасним урахуванням (це принципово важливо) всієї сукупності релятивістських, ядерних ефектів, включаючи ефекти Bohr-Weisskopf та Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також радіаційних КЕД поправок, у т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ, КЕД поправки вищих порядків;

б) розвиток послідовної калібрувально-інваріантної ab initio методики генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в прецизійній теорії опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів на основі принципу мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ;

в) розробка процедур ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів при проведенні розрахунків характеристик релятивістських багатоелектронних атомів (енергій, ймовірностей переходів, сил осциляторів), включаючи ефекти вищих порядків ТЗ (всіх поправок другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків, у т.ч. екранування кулонівської взаємодії, взаємодії “частинка-діра” та ітерацій масового оператора, ефекту некулоновості остова важких атомних систем, тиску континууму і т.д.);

г) проведення точних обчислень радіаційних КЕД поправок до рівнів енергії конкретних важких атомних систем, зокрема, поправок за рахунок урахування власного енергетичного внеску лембівського зсуву та ефекту поляризації вакууму (включаючи КЕД поправки вищих порядків КЕД ТЗ, у т.ч. двопетльової поправки Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(Z\alpha)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ );



д) проведення розрахунків енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1, E2 переходів в одноразово іонізованому атомі  $Hg^+$ , енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів в атомі свинцю, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів серії радіаційних E1 переходів в Eu I, а також надважкому елементі ніхонія  ${}_{113}^{278}Nh$  з метою апробації нових методів, які представляють теоретичний та практичний інтерес;

е) проведення розрахунків енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, ітербію Yb, тулію Tm, урану  ${}^{92}U$  тощо з подальшою оцінкою ступеню урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (що представляє величезний теоретичний та практичний інтерес), у т.ч. поляризаційної міжквaziчастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незоромому набору конфігурацій, суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та врахування станів континууму; визначення внеску за рахунок поляризації остову у значення сили осцилятора, а також величину калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційну ширину;

є) застосування розробленого формалізму опису енергетичних та спектроскопічних характеристик атомних систем до таких актуальних класів задач, як релятивістська спектроскопія каонних атомних систем, теоретичне визначення зсувів та ширин рівнів енергії в спектрах каонних атомів за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії, дослідження характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем (ядер) з використанням поєднаних релятивістських ядерних моделей та розвинутого релятивістського методу в спектроскопії атомів з коректним одночасним урахуванням релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних, радіаційних поправок тощо; виконання розрахунків енергетичних та радіаційних характеристик каонного азоту (тестовий розрахунок), важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  ${}^{184}W$ , свинцю  ${}^{207}Pb$  та урану  ${}^{238}U$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії;

ж) оцінювання впливу на характеристики  $\beta$ -розпаду, обумовленого вибором різних визначень функції Фермі, виду атомного поля (при проведенні обчислень ймовірності бета-розпаду, функції Фермі,

інтегральної функції Фермі), а також оцінювання впливу урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функцій Фермі та інтегральних функцій Фермі.

Основні наукові результати, викладені в даному розділі, опубліковано в роботах: [247-251, 254, 263, 270, 271, 274, 275, 278-280].

## РОЗДІЛ 2

# РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ. НОВИЙ ОПТИМІЗОВАНИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ І СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

### 2.1 Вступ

Як було зазначено у першому розділі, фундаментальна теорія важких і надважких атомних систем, що претендує на прецизійний опис широкого набору їх енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик, повинна адекватно враховувати весь набір релятивістських, радіаційних, ядерних ефектів, включаючи поправку на скінченний розмір ядра важкої атомної системи, класи складних обмінно-кореляційних поправок (у тому числі поправки в наближенні випадкових фаз, Бракнера, тиск континууму, тощо) та, зрозуміло, радіаційні або КЕД поправки.

Незважаючи на численні спроби щодо удосконалення прецизійних методів опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик, вжиті за останні три десятиліття (метод мега-Дірак-Фока, різні версії теорії збурень і так далі (див. розділ 1); пакети: “Dirac-package”, “Beta-package”, “QED”, “GRASP”, “BERTHA”, Relac, Cowan code, Hullac, MCDF, RMBPT, FAC та ін. (див. огляд в розділі 1), залишається не вирішеним комплекс проблем одночасного високоточного врахування вище згаданих ефектів. Тим не менш, перераховані методи і коди дозволили отримати величезну кількість корисної інформації про властивості атомної структури і ймовірності переходів атомів та іонів.

У цьому розділі ми викладемо теоретичні основи нового прецизійного підходу в релятивістській спектроскопії важких атомів та іонів, який базується на формалізмі комбінованої релятивістської багаточастинкової теорії збурень (RMBPT) з оптимізованим з метою максимально точного виконання принципу калібрувальної інваріантності стандартним дірак-фоківським нульовим наближенням та з прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних, радіаційних (ефекти поляризації вакууму) і кореляційних ефектів [261, 277, 290, 296, 299, 300].

Як буде показано далі на прикладах розрахунку широкого набору енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик ряду важких

атомів, запропонована група нових методів в теоретичній релятивістській спектроскопії істотно багатоелектронних атомів має досить високу точність та при врахуванні його неемпіричності може розглядатися, як один з найбільш ефективних потужних сучасних неемпіричних релятивістських підходів до опису релятивістських атомів та багатозарядних іонів.

Стартовою основою для розвитку нашого нового підходу до розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем є адіабатичний формалізм Гелл-Мана та Лоу і апарат аб ібітіо ТЗ з використання фейнманівської діаграмної техніки. Як вказано у класичних оглядах [1-5], безумовно, визначення гамільтоніану нульового наближення ТЗ і вимоги щодо врахування ключових фізичних ефектів для прецизійного опису важких атомних систем визначають основні процедури і властивості відповідних рядів ТЗ.

Як завжди [1-4], відомий S-матричний адіабатичний формалізм Гелл-Мана та Лоу призводить до рядів ТЗ по константі зв'язку (в нашому випадку електромагнітної взаємодії) для зсувів  $\Delta E$ . Ряди ТЗ стандартним чином діаграматизуються (з використанням звичайної техніки фейнманівських діаграм). При цьому природно [1-4], що нові наближення в теорії багатоелектронних систем зручно формулювати, як методи підсумовування фейнманівських діаграм певного типу.

В теорії релятивістського атома існує відома методика [1-4], яка пов'язана з діагоналізацією власної матриці  $M$  для розрахунку зсувів енергії  $\Delta E$  станів, причому відповідні матричні елементи комплексні. Методи побудови та методики обчислення відповідних поправок ТЗ із різним рівнем послідовності в рамках КЕД енергетичного формалізму докладно описані в [1-4].

## 2.2 Новий формалізм релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим наближенням та узагальнений енергетичний підхід до розрахунку енергетичних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем

2.2.1 Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи та оптимізоване одноквазічастинкове наближення Дірака-Фока

Як вказано вище, для побудови нового підходу до розрахунку важких атомних систем використані адіабатичний формалізм Гелл-Мана та Лоу і відома техніка побудови формалізму ab initio релятивістської багаточастинкової ТЗ (RMBPT) з використанням стандартної методології фейнманівської діаграматизації. Нагадаємо, що згідно з [1-4], для багатоелектронної атомної системи в релятивістській теорії зсув енергії збудженого стану представляється у стандартному комплексному вигляді як:

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

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

де ймовірність розпаду  $P$  співпадає з повною шириною відповідного енергетичного рівня  $\Gamma$ .

Зрозуміло, що повна ширина  $\Gamma$  включає, як радіаційну, так і автоіонізаційну ширину; при цьому обидві величини формально можуть бути визначені в рамках так званої звичайної амплітудної квантової механіки на основі загальновідомого золотого правила Фермі.

У випадку складних важких атомних систем із наявністю виродження у спектрі, згідно із [1-4], секулярна енергетична матриця  $M$ , що розраховується між усіма станами однієї парності в спектрі релятивістського атома, може бути представлена у вигляді звичайної стандартної суми:

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

де  $k$  – число квазічастинок;

$M^{(0)}$  – внесок вакуумних фейнманівських діаграм,

$M^{(1)}$  – внесок одноквазічастинкових фейнманівських діаграм,

$M^{(2)}$  – внесок двоквазічастинкових фейнманівських діаграм і т.д.

Зазначимо, що, звичайно, член  $M^{(0)}$  у співвідношенні (2.2) є пропорційним одиниці та фактично визначає загальне положення всього спектру, величина  $M^{(1)}$  далі звичайно визначається як сума відповідних одноквазічастинкових (1-QP) енергій.

Відповідно до стандартних положень релятивістської багаточастинкової квантової теорії [1-4], при побудові енергетичної матриці  $M$  використовується адіабатична формула Гелл-Манна та Лоу для  $\Delta E$ .

Зрозуміло, що основна мета теорії полягає в дотриманні теоретичної послідовності та досягненні спектроскопічної точності опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем з відносно швидкою збіжністю відповідних рядів ТЗ та виконанням принципу калібрувальної інваріантності.

Також повинно забезпечуватися максимально повне врахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти вищих порядків ТЗ (всіх поправок другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків, в тому числі, таких, що відповідають так званим поляризаційним поправкам, а також ефектам екранування кулонівської взаємодії, взаємодії “частинка-вакансія” та ітерацій масового оператора тощо) і, зрозуміло, врахування таких специфічних ефектів, таких як ефект швидкого “розмазування” вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, ефект некулоновості остова важких атомних систем, ефект суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиск континууму та інші.

Будемо вважати, що релятивістська важка багатоелектронна атомна система описується рівнянням Дірака з релятивістським гамільтоніаном виду [3]:

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

де  $\alpha$  та  $\beta$  ( $\alpha_i$ ) – матриці Дірака,  $Z$  – заряд ядра атома,  $V(r_{ij})$  – потенціал

міжелектронної взаємодії.

В якості потенціалу  $V(r_{ij})$  ми будемо використовувати релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії [3]:

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}. \quad (2.4)$$

Легко побачити, що даний потенціал враховує релятивістський ефект запізнювання і магнітну (Брейтівську) взаємодію, а з фізичної точки зору введений гамільтоніан дозволяє врахувати всі одноелектронні релятивістські поправки (крім радіаційних, що відносяться до типу поправки на лембівський зсув), і двоелектронні поправки – з точністю до членів  $\approx (\alpha Z)^2$ , де  $\alpha$  – стала тонкої структури.

Згідно із [1-4], далі можна визначити стани атомної системи з однією або декількома валентними електронами (квазічастинками) у вигляді вторинного квантування функції:

$$a_\alpha^+ \Psi_0, \quad a_\alpha \Psi_0 (-1)^{j_\alpha - m_\alpha}, \quad (2.5)$$

де  $a_\alpha^+$ ,  $a_\alpha$  – оператори народження та знищення електрона в стані  $\alpha = n_\alpha l_\alpha j_\alpha m_\alpha$ .

Тоді двохлаквічастинкові стани визначаються наступним звичайним чином:

$$\sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta^+ \Phi_0, \quad \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha\beta} a_\alpha a_\beta \Phi_0, \quad \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta \Phi_0. \quad (2.6)$$

У (2.6) функції  $C_{\alpha\beta}$  включають відомі коефіцієнти Клебша-Гордана, генеалогічні коефіцієнти, фазовий множник і т.д.

Нарешті, для випадку трьохквічастинкових станів маємо:

$$\sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\gamma^+ \Psi_0, \quad \sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a_\alpha a_\beta a_\gamma \Psi_0, \quad \sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a_\alpha^+ a_\beta a_\gamma \Psi_0. \quad (2.7)$$

У випадку наявності ефектів виродження (тобто, припустимо, що, напр.,  $E_0$  – вироджене власне значення для гамільтоніана нульового наближення), якщо функції, що відповідають цьому виродженому рівню, визначити як  $\Psi_\alpha, \Psi_\beta, \Psi_\gamma$ , а решту – латинськими  $\Psi_n, \Psi_m$ , тоді, згідно із [1-4], відповідний ряд релятивістської ТЗ РМВРТ може бути побудований з використанням адіабатичної формули Гелл-Мана та Лоу:

$$\Psi_\gamma = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \left( [S_\alpha(0, -\infty) \Psi_\gamma] / \langle \Psi_\gamma | S_\alpha(0, \infty) | \Psi_\gamma \rangle \right),$$

$$S_\alpha(0, -\infty) = \sum_n \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \cdot V(t_1) \cdot \dots \cdot V(t_n) \cdot e^{\alpha(t_1 + \dots + t_n)} \cdot (-1)^n, \quad (2.8)$$

$$V(t) = e^{iH_0 t} \cdot V \cdot e^{-iH_0 t}.$$

І далі, згідно з [3], вираз (2.8) запишемо у вигляді:

$$\Psi_\gamma = \Psi_\gamma + \sum_{\lambda \neq \gamma} \Phi_\lambda C_{\lambda\gamma} + \sum_n \Phi_n C_{n\gamma},$$

$$C_{\lambda\gamma} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi_\lambda | S_\alpha(0, -\infty) | \Psi_\gamma \rangle}{\langle \Psi_\gamma | S_\alpha(0, -\infty) | \Psi_\gamma \rangle}, \quad (2.9)$$

$$C_{n\gamma} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi_n | S_\alpha(0, -\infty) | \Psi_\gamma \rangle}{\langle \Psi_\gamma | S_\alpha(0, -\infty) | \Psi_\gamma \rangle}.$$

Розкладання чисельника і знаменника в (2.9) в ряд за потенціалом взаємодії дозволяє отримати:

$$C_{\lambda\gamma} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_i K_\alpha^{(i)}, \quad K_\alpha^{(0)} = \left( S_\alpha^{(0)} \right)_{\lambda\gamma}, \quad (2.10a)$$



$$K_{\alpha}^{(n)} = \left( S_{\alpha}^{(n)} \right)_{\lambda\gamma} - \sum_{p=0}^n \left( S_{\alpha}^{(n-p)} \right)_{\gamma\gamma} \cdot K_{\alpha}^{(p)}, \quad (2.10б)$$

$$\left( S_{\alpha}^{(k)} \right)_{\lambda_1\lambda_2} = \left\langle \Psi_{\lambda_1} \left| (-1)^k \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{k-1}} dt_k \cdot V(t_1) \cdot \dots \cdot V(t_k) \cdot e^{\alpha(t_1 + \dots + t_k)} \right| \Psi_{\lambda_2} \right\rangle. \quad (2.10в)$$

Фінальні вирази для поправок до функції стану атомної системи визначаються через добуток матричних елементів від окремих операторів  $V$  і енергетичних знаменників [1].

Якщо в формулах, зазначених вище, провести інтегрування по  $t_1, t_2, \dots, t_k$ , то можна отримати вирази для  $K_{\alpha}^{(n)}$ , які при  $\alpha \rightarrow 0$  поведуться, як  $\alpha^{-1}$ ,  $\alpha^{-2}$  [3]. Складові члени, які з'являються в теорії, можуть розходитися, однак існують рецепти їх компенсації в кожному порядку розкладання. Більш того, згідно з [3-6], шукана компенсація може бути отримана шляхом підсумовування нескінченних послідовностей з усіх порядків РМВРТ. Слід особливо прокоментувати, що неемпірична оптимізована версія РМВРТ, яка розвивається в даній роботі, фактично є дуже добрим наближенням до повноцінної КЕД ТЗ.

Важливо також підкреслити, що підсумовування в вище наведених виразах має включати весь одноелектронний спектр, у тому числі, позитивний і негативний континуум. Відповідні рецепти дуже добре відпрацьовані у сучасній КЕД. Це має особливе значення у випадку розрахунку спектрів, та, зокрема, енергій рівнів важких як звичайних атомів, так й екзотичних каонних атомів.

Гамільтоніан нульового наближення має такий природній вигляд:

$$H_0 = \sum_i^N h(r_i) + \sum_i^N V_{SCF}(r_i), \quad (2.11)$$

де потенціал  $V_{SCF}(r_i)$  описує самоузгоджене поле в електронній системі.

Залежно від методики визначення цього потенціалу, у розгляд вводяться різні версії формалізму РМВРТ. Зокрема, якщо вибрати в якості самоузгодженого потенціалу модельний або псевдо-потенціал, тоді

виходять відомі в релятивістській спектроскопії методи ТЗ з модельним нульовим наближенням [3, 21, 22, 25-30].

Як правило, для багатоелектронних атомів у такому формалізмі ТЗ використовується один з емпіричних або неемпіричних модельних потенціалів. Добре відомі та користуються популярністю методи ТЗ з нульовим Dirac-Hartree-Fock Slater, Dirac-Kohn-Sham (DKS),  $X_\alpha$ , relativistic Hartree-Fock (RHF), Хартрі-Фок-Слейтер (HFS) і подібними іншими наближеннями.

Принципальним моментом нашого підходу є вибір в якості нульового наближення оптимізованого Dirac-Fock (ODF) потенціалу, причому процедура побудови одноквазічастинкового уявлення базується на принципі побудови оптимізованих атомних базисів з дотриманням принципу калібрувальної інваріантності, зокрема, шляхом мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційні ширини рівнів (відома процедура Glushkov-Ivanov-Ivanova [3, 21, 22]).

Важливо підкреслити, що ця процедура в даному підході реалізована вперше, на відміну від альтернативних підходів у релятивістській спектроскопії важких атомів та іонів [1-3, 45-106], де будувались нульові наближення: неоптимізований (стандартний) Dirac-Hartree-Fock, Dirac-Hartree-Fock-Slater, Dirac-Kohn-Sham,  $X_\alpha$ , relativistic Hartree-Fock, Hartree-Fock-Slater, а також модельні (модельний потенціал, псевдопотенціал і т.і.) методи.

Функцію певного стану атомної системи (ASF) із сумарним кутовим моментом  $J$ , з його  $z$ -проекцією  $M$  і парністю  $p$  приймемо у вигляді:

$$\Psi_s(JM^p) = \sum_m c_m(s) \Phi(\gamma_m JM^p), \quad (2.12a)$$

$$\Phi(\gamma_m JM^p) = \sum_i d_i \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \cdots & \psi_1(N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}, \quad (2.126)$$

де  $c$  – коефіцієнти змішування конфігурації для стану  $s$ ;

$\Phi(\gamma_m JM^p)$  – функції стану певної конфігурації, тобто детермінант Слейтера 4-компонентних діраківських біспінів;

$\psi_i$  – одноелектронні релятивістські хвильові функції.  
Одноелектронна хвильова функція може бути визначена, як

$$\psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \\ iQ_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{-\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad (2.12\text{в})$$

де  $\Omega_{\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi)$  – кутовий 2-компонентний спінор,  $P(r)$  і  $Q(r)$  – це велика і мала радіальні частини хвильової функції відповідно.

Слід зауважити, що в принципі в нульовому наближенні РМВРТ (з дірак-фоківським «0» наближенням) можна розв'язувати як систему нелокальних ДФ радіальних рівнянь, так й використовувати модель локального дірак-фоківського потенціалу, напр., по аналогії з методом [28]:

$$V_{\text{CH}}(r) = V_{\text{нuc}}(r) + \alpha \int_0^\infty dr' \frac{1}{r'} \rho_c(r'),$$

$$\rho_c(r) = \sum_{n_c} (2j_c + 1) [G_c^2(r) + F_c^2(r)], \quad (2.13)$$

Тут перший член описує ядерний потенціал, а другий містить електронну густину умовного остову атомної системи (у наших визначеннях нижче компоненти діраківського спінору  $F=P$ ,  $G=Q$ ).

Радіальні компоненти хвильової функції Дірака  $P(r)$  і  $Q(r)$  задовольняють системі звичайних диференціальних рівнянь:

$$\frac{\partial P}{\partial r} + (1 + \chi) \frac{P}{r} - (\varepsilon + m - V)Q = 0,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial r} + (1 - \chi) \frac{Q}{r} + (\varepsilon - m - V)P = 0, \quad (2.14)$$

де  $\chi$  – квантове число Дірака (постійна тонкої структури  $\alpha=1$ ), а потенціал  $V(r)$  відповідає локальному дірак-фоківському потенціалу.

Неважко зрозуміти, що вигляд радіальних функцій визначається, як завжди (див., напр., [1-3, 274, 275]), потенціалом  $V(r)$  гамільтоніана. У разі конкретної реалізації методу корисно використовувати прийом, пов'язаний з виділенням головної ступеневої залежності в радіальних функціях. Відповідно до [1-3, 274, 275], при великих значеннях  $\chi$  радіальні функції  $F$  та  $G$  швидко змінюються на початку координат:

$$P(r), Q(r) \approx r^{\gamma-1} \quad (2.15)$$

$$\gamma = \sqrt{\chi^2 - \alpha^2 z^2}.$$

Тому зручно виділити головну ступеневу залежність при малих  $r$  (щоб уникнути відомих труднощів при чисельному інтегруванні рівнянь в області  $r \rightarrow 0$  [1, 3, 271]):

$$f = Pr^{1-|\chi|},$$

$$g = Qr^{1-|\chi|}. \quad (2.16)$$

Відповідна система діраківських рівнянь для компонент  $F$  та  $G$  перетвориться наступним чином (в кулонівських одиницях):

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha ZVg - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g,$$

$$g' = (\chi - |\chi|)g/r - \alpha ZVf + \alpha ZE_{n\chi}f, \quad (2.17)$$

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

Як звичайно (див. [1-3, 274, 275]), граничні значення правильних рішень визначаються першими членами розкладання функцій в ряд Тейлора:

$$g = (V(0) - E_{n\chi})r\alpha Z/(2\chi + 1); \quad \text{при } \chi < 0 \quad (2.18a)$$

$$f=1,$$

$$f = (V(0) - E_{n\chi} - 2/\alpha^2 Z^2)\alpha Z; \quad \text{при } \chi > 0 \quad (2.186)$$

$$g = 1.$$

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

Зазначимо, що оскільки в нашому розгляді знаходяться істотно релятивістські системи, весь розрахунок з самого початку буде проводитися в вигляді  $jj$ -схеми зв'язування одноелектронних моментів, а перехід до реальної схеми здійснюється, як правило, шляхом діагоналізації енергетичної матриці.

Оператор збурення в нашій багаточастинковій релятивістській ТЗ умовно прийме вигляд [274, 275]:

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

з відповідним компенсуючим членом

$$- \sum_i^{N_{\text{tot}}} V_{\text{SCF}}(r_i).$$

### 2.2.2 Ядерний потенціал. Поправка на скінченний розмір ядра

Розглянемо далі процедуру визначення ядерного потенціалу в рамках нашої нової теорії збурень з оптимізованим (див нижче) ДФ нульовим наближенням, при цьому головний акцент зробимо на акуратному обліку поправки на скінченний розмір.

Загальновідомо, що найбільш послідовний підхід щодо врахування ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядр, ефекти Bohr-Weisskopf і Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.) складається з вирішення відповідних рівнянь релятивістської моделі середнього поля для атомного ядра, однак в теоретичній атомній спектроскопії прийнято використовувати кілька відомих моделей, які забезпечують

спектроскопічну точність при проведенні розрахунків широкого набору характеристик атомів [1-3, 274, 275]. Зокрема, мова йде про такі моделі розподілу електричного заряду в атомному ядрі, як моделі Гауса і Фермі.

Ми вважаємо, що в нашому класі задач використання гладкої функції розподілу заряду типу Гауса має перевагу у порівнянні, наприклад, з розривною функцією розподілу заряду в ядрі у вигляді однорідно зарядженої кулі.

З іншого боку, наявність відповідного програмного блоку обчислення розподілу Гауса (Фермі) методом диференціальних рівнянь Іванова-Іванової-Глушкова в РС комплексі “Superatom” [202-226] є мотивацією для імплементації в нашу теорію моделі Гауса (Фермі).

Слід підкреслити, що зазначені моделі розподілу заряду в ядрі широко використовувалися при вирішенні різних класів задач сучасної теоретичної фізики звичайних релятивістських атомів та важких багатозарядних іонів, зокрема, при обчисленні енергетичних спектрів, а також в задачах міжатомної фізики, фізики зіткнень, у тому числі, при обчисленні характеристик зіткнень важких іонів із народженням електрон-позитронних пар і т.д. [1-25, 301-310, 401-415].

Згідно, напр., з [3], гаусовий розподіл заряду ядра (з урахуванням умови нормування на одиницю) задається функцією виду:

$$\rho(r|R) = \left(4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi}\right) \exp(-\gamma r^2), \quad (2.20)$$

$$\int_0^{\infty} dr r^2 \rho(r|R) = 1, \quad (2.21)$$

$$\int_0^{\infty} dr r^3 \rho(r|R) = R, \quad (2.22)$$

де  $\gamma = 4\pi/R^2$ ,  $R$  – ефективний радіус ядра.

У стандартних атомних розрахунках, як відомо, для ефективного радіуса використовують формулу виду [60]:

$$R = 1,202 \cdot 10^{-13} Z^{1/3} \text{ см.} \quad (2.23)$$

В моделі Фермі розподіл заряду в ядрі описується функцією  $\rho(r)$  виду [36]:

$$\rho(r) = \rho_0 / \{1 + \exp[(r - c) / a]\}, \quad (2.24)$$

де параметр  $a=0.523$  фм, а параметр  $c$  вибирається таким чином, щоб середньоквадратичний радіус визначався виразом:

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = (0.836 \cdot A^{1/3} + 0.5700) \text{ фм.} \quad (2.25)$$

Зрозуміло, що у разі конкретної реалізації процедури визначення ядерного потенціалу необхідно переходити від точкового ядерного потенціалу до потенціалу скінченно-розмірного ядра. Ми використовуємо добре відому процедуру, яка описана в класичних роботах [2, 138].

Дійсно [138], якщо точкове ядро атома створює певний центральний електричний потенціал  $V(R)$ , то перехід до потенціалу скінченного ядра здійснюється заміною на  $V_{FS}(r|R)$ :

$$V_{FS}(r|R) = V(r) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr' r'^2 V(r') \rho(r'|R). \quad (2.26)$$

У разі конкретно кулонівського потенціалу ядра зі сферично симетричною густиною ядра  $\rho(r|R)$  шукане співвідношення має вигляд [1, 7, 124]:

$$V_{FS}(r|R) = -((1/r) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr' r' \rho(r'|R)). \quad (2.27)$$

Відповідно до відомого методу диференціальних рівнянь Іванова-Іванової, визначення потенціалу (див., напр., [21, 27-30]) з урахуванням скінченного розміру ядра  $V_{FS}(r|R)$  ефективно зводиться до чисельного

вирішення (методом Рунге-Кутта 4-го порядку) системи диференціальних рівнянь виду:

$$V'_{FS}(r, R) = \left(1/r^2\right) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r', R) \equiv \left(1/r^2\right) y(r, R), \quad (2.28)$$

$$y'(r, R) = r^2 \rho(r, R), \quad (2.29)$$

$$\rho'(r, R) = -8\gamma^{5/2} r / \sqrt{\pi} \exp(-\gamma r^2) = -2\gamma r \rho(r, R) = -\frac{8r}{\pi r^2} \rho(r, R) \quad (2.30)$$

з граничними умовами:

$$V_{nucl}(0, R) = -4/(\pi r), \quad (2.31)$$

$$y(0, R) = 0, \quad (2.32)$$

$$\rho(0, R) = 4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi} = 32/R^3. \quad (2.33)$$

Аналогічна система диференціальних рівнянь може бути записана також у разі застосування моделі Фермі.

Важливо зазначити, що на противагу відомим методикам [45-64] в рамках нашої теорії блок визначення ядерного потенціалу імплементований в оптимізоване нульове наближення ДФ (ODF).

### 2.2.3 Оптимізована версія методу штурмовських розкладень для урахування станів континууму

Даний підрозділ присвячений короткому опису адаптації відомої методики побудови штурмовських розкладень для врахування станів безперервного спектру в нашій оптимізованій теорії ODF. Урахування станів континууму є принципово важливим для будь-якої теорії, яка претендує на прецизійний опис спектрів і спектральних характеристик багатоелектронних релятивістських атомів.



Новизна нашої методики побудови штурмовських розкладень для врахування станів безперервного спектра полягає, перш за все, в тому, що вона вперше реалізована для узагальнених рівнянь типу ODF.

Нагадаємо згідно з [3], серед прикладів ефективного використання методу штурмовських розкладень в різних завданнях атомної і молекулярної фізики слід зазначити роботи Іванова та співр., Груздева та співр., Dalgarno et al., Buchachenko et al., Glushkov et al. тощо. [1-5, 34].

Основні ідеї методики побудови штурмовських розкладень детально описані в літературі (див., напр., [1-5, 34]), тому нижче ми обмежимося тільки ключовими моментами та елементами новизни, які мають відношення до нашого підходу. У нульовому наближенні відповідне рівняння  $ODF = ODF$  можна записати в наступному загальному вигляді:

$$[h_{ODF}(x) - \varepsilon_n]u_n(x) = 0. \quad (2.34)$$

Поряд з дискретним спектром ( $\varepsilon = \varepsilon_n \leq \varepsilon_F$ ) має місце безперервний спектр власних значень ( $\varepsilon > \varepsilon_F$ ), які відповідають діраківським віртуальним орбіталям.

У штурмовській постановці задачі необхідно знайти власні значення і власні функції рівняння  $ODF = ODF$ :

$$[h_{ODF}(x) - \varepsilon]\varphi_v = \lambda_v \rho(x)\varphi_v, \quad (2.35)$$

де

$$\varepsilon = E - \sum_{k=1}^{N-1} \varepsilon_{n_k}. \quad (2.36)$$

При  $\varepsilon < 0$  рівняння (2.35) має чисто дискретний спектр власних значень  $\lambda_v = \lambda_v(\varepsilon)$ . В якості вагового оператора, як правило, використовуються оператори, що пропорційні деякій частині або навіть всієї потенційної енергії в гамільтоніані  $H_0$ .

Для практичної реалізації метод штурмовських розкладень реалізується наступним чином. На першому етапі вирішується система релятивістських рівнянь ODF відносно діраківських радіальних функцій і групи діагональних параметрів Лагранжа і т.д.

На другому етапі чисельно вирішується система рівнянь, яка

еквівалентна (2.35) [274]:

$$(-i\alpha c\nabla + V(r) + \delta_i V_{SCF}(r) - \varepsilon_i)\varphi_i = 0. \quad (2.37)$$

Кожній  $i$ -орбіталі реального або штурмовського стану відповідає два параметри:  $\varepsilon_i, \delta_i$ .

Для орбіталей реальних станів параметр  $\delta_i = 1$ . Кількість функцій реальних станів, що явно враховуються, як правило, визначається практичним чисельним дослідженням методу для конкретної атомної системи. Інші деталі методу штурмовських розкладень та особливості практичної реалізації описані в [2, 34, 138, 274, 275].

2.2.4 Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи. Поправки першого порядку теорії збурень

У першому порядку ТЗ потрібно встановити елементи матриці оператора ТЗ з релятивістським потенціалом (2.4), які визначаються наступним стандартним чином [3, 274]:

$$\begin{aligned} M_1^{(2)} &= \langle n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 [J] | V_{\text{int}} | n_4 l_4 j_4 \quad n_3 l_3 j_3 [J] \rangle = \\ &= P_1 P_2 (-1)^{1+j_2+j_4+J} [(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)]^{1/2} \times \\ &\quad \times \sum_{i,k} \sum_a \begin{Bmatrix} j_i j_k J \\ j_2 j_1 a \end{Bmatrix} (\delta_{i,3} \delta_{k,4} + (-1)^J \delta_{i,4} \delta_{k,3}) \cdot T_{\lambda}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$P_1 = \begin{cases} 1 & \text{якщо } n_1 l_1 j_1 \neq n_2 l_2 j_2 \\ 1/2 & \text{якщо } n_1 l_1 j_1 = n_2 l_2 j_2 \end{cases}, \quad (2.39a)$$

$$P_2 = \begin{cases} 1 & \text{якщо } n_3 l_3 j_3 \neq n_4 l_4 j_4 \\ 1/2 & \text{якщо } n_3 l_3 j_3 = n_4 l_4 j_4 \end{cases}. \quad (2.39b)$$

Величину  $T_\lambda$  можна виразити через радіальні інтеграли, які, в принципі, схожі на відомі слейтерівські, та представити її у вигляді суми кулонівської та брейтівської частин

$$T_\lambda = T_\lambda^{\text{Qu}} + T_\lambda^{\text{Br}}, \quad (2.40)$$

що відповідає розподілу міжелектронного потенціалу на кулонівську та брейтівську частини у другому доданку в (2.4).

Зазначимо, що потенціал взаємодії між електронами у нижчих порядках КЕД ТЗ, безумовно, визначається в КЕД теорії фотонним пропатором.

Добре відомо, що його розкладання фактично індукує відоме мультипольне розкладання, яке в рамках енергетичного підходу використовується для визначення ймовірностей радіаційних (як електричного, так й магнітного типу) та автоіонізаційних переходів.

Нагадаємо, що, наприклад, кулонівська частина в (2.4) виражається через радіальні інтеграли та кутові коефіцієнти за допомогою виразу

$$T_\lambda^{\text{Qu}} = \{R_l(1243)Y_\lambda(1243) + R_l(\tilde{1}24\tilde{3})Y_\lambda(\tilde{1}24\tilde{3}) + \\ + R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3)Y_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})Y_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3})\}. \quad (2.41)$$

В (2.41) символи 1,2,3,4 означають великі компоненти радіальної діраківської функції, відповідно цифри з тильдою – це малі компоненти; знак “~” позначає, що в (2.41) велику радіальну компоненту  $f_i$  потрібно замінити на малу  $g_i$ , а в кутових коефіцієнтах – замінити  $l_i$  на  $\tilde{l}_i = l_i - 1$  (для  $\alpha_i > 0$  та  $l_i + 1$  для  $\alpha_i < 0$ ).

У (2.40) в нерелятивістських межах залишається тільки перший доданок, в якому фігурують лише великі складові одноелектронних функцій Дірака. Наприклад, його уявна частина має вигляд [2, 28, 29, 274]:

$$R_k(n'l'j' nlj; n'l'j' nlj) = \iint dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 f_{n'l'j'}(r_1) f_{nlj}(r_2) W_k(r_1 r_2) f_{n'l'j'}(r_2) f_{nlj}(r_1), \quad (2.42a)$$

де функція  $W$  стандартним чином виражається через функції Бесселя

першого і другого порядку:

$$W_k(r_1 r_2) = \begin{cases} \frac{\pi}{\sqrt{r_1 r_2}} (-1)^k (2k+1) J_{k+1/2}(\alpha z w, r_1) J_{-k-1/2}(\alpha z w, r_2), & r_1 < r_2 \\ \frac{\pi}{\sqrt{r_1 r_2}} (-1)^k (2k+1) J_{k+1/2}(\alpha z w, r_2) J_{-k-1/2}(\alpha z w, r_1), & r_1 > r_2 \end{cases} \quad (2.42б)$$

Підкреслимо, що в сучасній теорії для звичайних багатоелектронних атомів процедури обчислення шуканих кулонівських і брейтівських інтегралів дуже добре відпрацьовані. У нашому підході використано відомий ефективний метод диференціальних рівнянь, запропонований Івановим та співр. [3, 21, 22, 25-30].

В рамках вказаного підходу обчислення інтегралів типу (2.42а), який визначається як  $Y_3(\infty)$ , зводиться до чисельного розв'язання системи диференціальних рівнянь виду:

$$\begin{aligned} R_1'(r) &= f_{nlj}(r) j_{k+1/2}(\alpha z w, r) f_{1s}(r) r^{3/2}, \\ R_2'(r) &= f_{1s}(r) j_{k+1/2}(\alpha z w, r) f_{nlj}(r) r^{3/2}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$R_3'(r) = \frac{(-1)^k \pi}{2} (R_1(r) f_{1s}(r) j_{-k-1/2} f_{nlj}(r) + R_2(r) j_{k+1/2}(r) f_{1s}(r)) r^{3/2}.$$

Далі інтеграл (2.42б) визначається, як  $Y_3(\infty)$ . Відповідна процедура обчислення шуканих інтегралів детально викладена в роботах [3, 21, 22, 25-30, 274, 275] і чисельно реалізована у вигляді блоку “XInt” РС атомного кода “Superatom-ISAN”. У цьому комплексі в загальну систему диференціальних рівнянь також включені рівняння для функцій Бесселя, Дірака, КГФ для каонної та діраківської хвильових функцій і т.д.

Відповідно, уявна частина може бути виражена:

$$\text{Im } R_\lambda(12; 43) = \frac{1}{2} (2\lambda + 1) \pi X_\lambda(13) X_\lambda(24),$$

$$X_\lambda(12) = \int dr r^{\frac{3}{2}} f_1(r) J_{\lambda+\frac{1}{2}}^{(1)}(raZ|\omega|f_2(r)). \quad (2.44)$$

Кутовий коефіцієнт має лише дійсну частину:

$$Y_\lambda(1243) = \{\lambda l_1 l_3\} \{\lambda l_2 l_4\} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Тут  $\{\lambda l_1 l_3\}$  означає, що  $\lambda$ ,  $l_1$  і  $l_3$  повинні задовольняти правилу трикутника, а сума  $\lambda + l_1 + l_3$  повинна бути парним числом.

Аналогічні вирази можуть бути записані також для брейтівської частини величини (2.32), зокрема, дотримуючись [2, 28, 274], маємо:

$$T_\lambda^{\text{Br}} = T_{\lambda, \lambda-1}^{\text{Br}} + T_{\lambda, \lambda}^{\text{Br}} + T_{\lambda, \lambda+1}^{\text{Br}}, \quad (2.46)$$

де

$$T_\lambda^{\text{Br}} = \left\{ R_l(12 \tilde{4} \tilde{3}) Y_\lambda^l(12 \tilde{4} \tilde{3}) + R_l(\tilde{1} \tilde{2} 43) Y_\lambda^l(1243) + \right. \\ \left. + R_l(\tilde{1} \tilde{2} \tilde{4} 3) Y_\lambda^l(\tilde{1} \tilde{2} \tilde{4} 3) + R_l(1 \tilde{2} 4 \tilde{3}) Y_\lambda^l(1 \tilde{2} 4 \tilde{3}) \right\} \quad (2.47)$$

з факторизованою кутовою частиною S(1243):

$$\left. \begin{aligned} Y_\lambda^{(1)}(1243) &= (\lambda)(-1)^{\lambda+l+1} Y_\lambda^l(13) Y_\lambda^l(24), \\ Y_\lambda^{(1)}(13) &= (-1)^{l_3+j_3} (l_1 l_3) \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & \lambda \\ -1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda+1)}} \times \right. \\ &\times \left[ (-1)^{j_1+j_3+\lambda} (j_3) + (j_1) \right] \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} + (-1)^{l_3+j_1+\lambda} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left. \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (2.48)$$

Тут, як і вище, величина  $l_i$  замінюється на  $\tilde{l}_i = l_i - 1$  для квантових чисел  $\alpha_i > 0$  та  $l_i + 1$  для  $\alpha_i < 0$ . Символ  $\{\lambda l_1 l_3\}$  означає, що  $\lambda + l_1 + l_3$  – парне число.

Для довідки зазначимо тут же, що  $3j$ -символи в круглих дужках (2.48) визначаються простими аналітичними формулами згідно [1-4]:

$$\left(\frac{2a+1}{2a(2a+1)}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} a & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^l}{2} \begin{cases} 1/((l+1)(2l+1))^{1/2}, & a=l+1 \\ 1/(l(l+1))^{1/2}, & a=l \\ 1/(l(2l+1))^{1/2}, & a=l-1 \end{cases}$$

$$(2a+1)^{1/2} \begin{pmatrix} a & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^l}{(2l+1)^{1/2}} \begin{cases} -(l+1)^{1/2}, & a=l+1 \\ 0, & a=l \\ l^{1/2}, & a=l-1 \end{cases} \quad (2.49)$$

Символи  $\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & a \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}$  визначаються за стандартними формулами (див. [2]).

### 2.2.5 Процедура обчислення матричних елементів на хвильових функціях N-квазічастинкових станів. Метод Фано

При проведенні розрахунків спектрів складних атомних систем, зокрема, спектрів трьох- і більше квазічастинкових станів, найбільш трудомістким завданням є обчислення кутових частин матричних елементів, які виникають при інтегруванні по кутовим, а також (при підсумовуванні) по спіновим змінним [1, 3, 15, 274].

Найбільш ефективним вважається метод, запропонований Фано. Даний метод був адаптований в задачах атомної спектроскопії, зокрема, Іванова-Іванов та співр. (детальний виклад цього питання наведено в [25-30, 86, 87]).

Як відомо [1, 3, 127], двохквазічастинкові оператори пов'язують по два електрона з початкового стану  $\psi$  з двома електронами з скінченного стану  $\psi'$ . Згідно Фано, якщо позначати номери електронних оболонок, що містять ці два "взаємодіючих" електрона в  $\psi$  через  $\rho$  і  $\sigma$  ( $\rho \leq \sigma$ ), та в  $\psi'$  через  $\rho'$ ,  $\sigma'$  ( $\rho' \leq \sigma'$ ), тоді будуть мати місце відомі формули розрахунку матричного елемента двохчастинкового оператора [3, 15, 274]:

$$\langle \psi | V | \psi' \rangle = \sum_{\rho\sigma\rho'\sigma'} \frac{1}{2} (-1)^{\Delta P} \left[ N_\rho (N_\sigma - \delta_{\rho\sigma}) N_{\rho'} (N_{\sigma'} - \delta_{\rho'\sigma'}) \right]^{1/2} * \\ \left[ \sum_K R_K(\rho\sigma, \rho'\sigma') (l_\rho \| C^K \| l_{\rho'}) (l_\sigma \| C^K \| l_{\sigma'}) A_K(1) - \sum_K R_K(\rho\sigma, \sigma'\rho') (l_\rho \| C^K \| l_\sigma) (l_{\sigma'} \| C^K \| l_{\rho'}) A_K(2) \right] \\ \Delta P = \sum_{\lambda=\rho+1}^{\sigma} \bar{N}_\lambda - \sum_{\lambda=\rho'+1}^{\sigma} N_\lambda, \quad (2.50)$$

де  $N_\lambda$  – кількість електронів в  $\lambda$ -ой оболонці,

$\bar{N}_\lambda$  – кількість “невзаємодіючих” електронів в  $\lambda$ -ой оболонці,

$R_K$  – радіальні інтеграли:

$$R_K(\rho\sigma; \rho'\sigma') = \int dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 R_{n_\rho l_\rho}(r_1) R_{n_\sigma l_\sigma}(r_2) \frac{r_1^K}{r_2^{K+1}} R_{n_{\rho'} l_{\rho'}}(r_2) R_{n_{\sigma'} l_{\sigma'}}(r_1), \\ A_K(1) = \left[ 1 + (1 - \delta_{\rho\sigma})(1 - \delta_{\rho'\sigma'}) \right] \left[ (2l_\sigma + 1)(2l_{\rho'} + 1) \right]^{1/2} * \sum_{(\bar{\alpha}SL)} G_\rho G_\sigma G_{\rho'} G_{\sigma'} R_S(1) R_L(1),$$

$$A_K(2) = \left[ 2 - \delta_{\rho\sigma} - \delta_{\rho'\sigma'} \right] \left[ (2l_\sigma + 1)(2l_{\rho'} + 1) \right]^{1/2} * \sum_{(\bar{\alpha}SL)} G_\rho G_\sigma G_{\rho'} G_{\sigma'} R_S(2) R_L(2). \quad (2.51)$$

Тут  $G_\rho$  – генеалогічні коефіцієнти для оболонки  $\rho$ :

$$G_\rho = \left( l^{N_\rho - 1} \bar{\alpha}_\rho \bar{S}_\rho \bar{L}_\rho l_\rho s_\rho L_\rho \middle| \middle\} l_\rho N_\rho \alpha_\rho S_\rho L_\rho \right). \quad (2.52)$$

Згідно [3,15,274], коефіцієнти  $R_L(1)$ ,  $R_S(1)$ ,  $R_L(2)$ ,  $R_S(2)$  визначають так звані “коефіцієнти перезв’язку”, які являють собою параметри перетворення хвильової функції з однієї схеми зв’язку в іншу:

$$R_L(1) = \left\langle \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho l_\rho) L_\rho \dots \left[ \bar{L}_\sigma (l_\sigma k) l_\sigma \right] L_\sigma \dots \alpha \middle| \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho'-1} (\bar{L}_{\rho'} (l_\rho k) l_{\rho'}) L_{\rho'} \dots (\bar{L}_{\sigma'} l_{\sigma'}) L_{\sigma'} \dots \alpha' \right\rangle, \\ R_L(2) = \left\langle \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho l_\rho) L_\rho \dots \left[ \bar{L}_\sigma (l_\rho k) l_\sigma \right] L_\sigma \dots \alpha \middle| \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho'-1} (\bar{L}_{\rho'} l_{\rho'}) L_{\rho'} \dots \left[ \bar{L}_{\sigma'} (k l_\rho) l_{\sigma'} \right] L_{\sigma'} \dots \alpha' \right\rangle,$$

$$R_S(1) = \langle \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) S_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) S_\sigma \dots \alpha | \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho'-1} (\bar{S}_{\rho'} s_{\rho'}) S_{\rho'} \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) S_\sigma \dots \alpha' \rangle,$$

$$R_S(2) = \langle \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) S_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) S_\sigma \dots \alpha | \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho'-1} (\bar{S}_{\rho'} s_{\rho'}) S_{\rho'} \dots (\bar{S}_\sigma s_\rho) S_\sigma \dots \alpha' \rangle. \quad (2.53)$$

Далі, згідно [3, 15, 274], наведемо матричні елементи оператора збурення, які побудовані на хвильових функціях трьохквазічастинкових станів, для трьох можливих типів трьохквазічастинкових оболонки: однорідно-однорідної, однорідно-неоднорідної і неоднорідно-неоднорідної електронних конфігурацій.

Наприклад, для матричного елемента однорідно-однорідної конфігурації

$$\langle \gamma_1^2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1^2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle \quad (2.54a)$$

маємо електрон-електронну частину

$$\langle \gamma_1^2(J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1^2(J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12}). \quad (2.54b)$$

Матричний елемент типу

$$\langle \gamma_1^2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle \quad (2.55a)$$

однорідно-неоднорідної електронної конфігурації містить електрон-електронну частину виду [3, 15, 274]

$$\langle \gamma_1^2(J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12}) \delta(\pi_1 \pi_2). \quad (2.55b)$$

Для неоднорідно-неоднорідної електронної конфігурації

$$\langle \gamma_1 \gamma_2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle \quad (2.56a)$$

електрон-електронна частина має вигляд:

$$\langle \gamma_1 \gamma_2(J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12}). \quad (2.56b)$$



При розгляді більш складних взаємодій у випадку, якщо виникає необхідність у визначенні електрон-вакансійної частини, слід користуватися формулою типу:

$$\begin{aligned}
& \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_2) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + 1} * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
& \sum_{J_{13}} \langle \gamma_2 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{j_2 + j_3 + \bar{j}_2 + \bar{j}_3} * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{Bmatrix} (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
& \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_2 + j_2} * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{Bmatrix} (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
& \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_2) (-1)^{\bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_2 + \bar{j}_2} * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})}
\end{aligned} \quad . (2.57)$$

2.2.6 Ab initio теорія збурень для багатоелектронної релятивістської атомної системи. Урахування обмінно-кореляційних поправок

При описі таких складних систем, як релятивістські багатоелектронні атоми, наприклад, лантаноїдів, вкрай важливим є прецизійне врахування внеску складних обмінно-кореляційних ефектів, які відповідають поправкам другого і вищих порядків атомної ТЗ (четвертого і вище КЕД ТЗ).

У стандартних методах типу багатоконфігураційного наближення ХФ (МКХФ) або ДФ (МКДФ), а також різних версіях R-матричного методу [226] врахування обмінно-кореляційних ефектів здійснюється шляхом використання досить громіздкої багатоконфігураційної хвильової

функції.

Більш ефективний гібридний підхід до врахування поправок другого і вище порядків ТЗ зводиться до модифікації “запального” потенціалу та потенціалу взаємодії квазічастинок між собою.

Важливо підкреслити, що при цьому зберігається аналітичний вид поправок найнижчого порядку [3, 26-28]. З іншого боку, ця методика не дозволяє в повній мірі врахувати внесок високо розташованих рідбергівських станів і станів континууму, які, як неважко зрозуміти, відіграють вкрай важливу роль в розрахунках енергій і ширин енергетичних рівнів в спектрі атомної системи. .

Традиційним методом врахування обмінно-кореляційних ефектів в сучасній теорії багатоелектронного атома [1-5, 45-116, 138] є використання двох основних способів уточнення результатів розрахунку в першому порядку ТЗ:

а) перший спосіб передбачає розширення секулярної матриці  $M$  шляхом введення нових збуджених станів; в цьому випадку елементи секулярної матриці розраховуються в першому порядку ТЗ; ця частина схеми частково залишається;

б) другий спосіб уточнення результатів розрахунку в першому порядку ТЗ полягає у включенні поправок вищих порядків в кожен з матричних елементів; розмір секулярної матриці зберігається.

Поправки другого і вищих порядків ТЗ фактично враховують накладення додаткових станів в кожному з елементів  $M_{ij}$ . Детальний виклад повної теорії і технічних аспектів її реалізації в конкретних атомних розрахунках з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів можна знайти в цілій серії робіт [2-5, 25-30, 34, 68, 69, 274, 275].

У нашому підході ми використовували гібридну схему, яка поєднує обидва способи, в тому числі, і відому узагальнену техніку Іванова-Іванової-Глушкова, детально викладену в роботах [3, 25-30, 274].

Згідно із [3, 28, 274, 275], корисно навести відомі послідовності діаграм другого порядку по оператору збурень (рис. 2.1-2.2), які відповідають ефектам поляризаційної міжквазічастинкової (через “море Фермі”) взаємодії та екранування (або антиекранування в разі, скажімо, електрона та вакансії) квазічастинок.

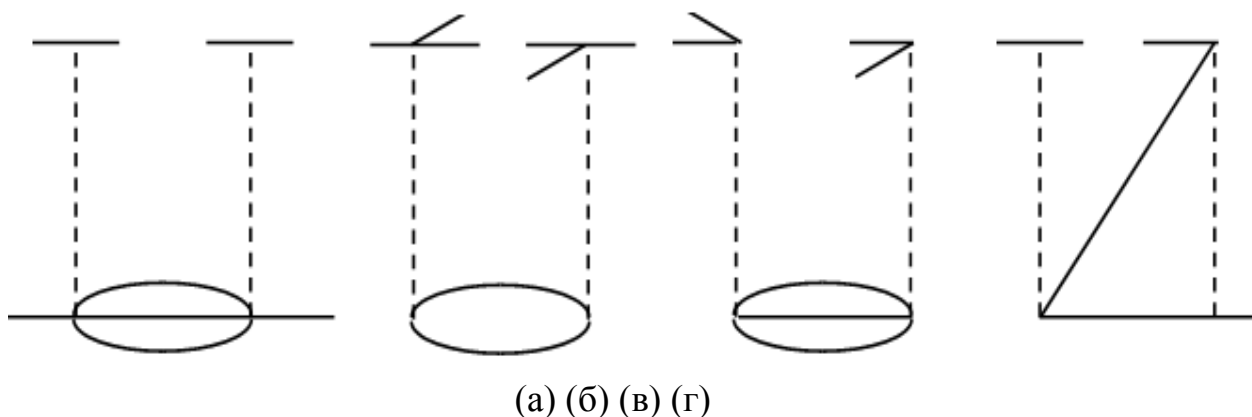


Рисунок 2.1 - Діаграми 2-го порядку, які враховують обмінну і пряму поляризаційні взаємодії квазічастинок

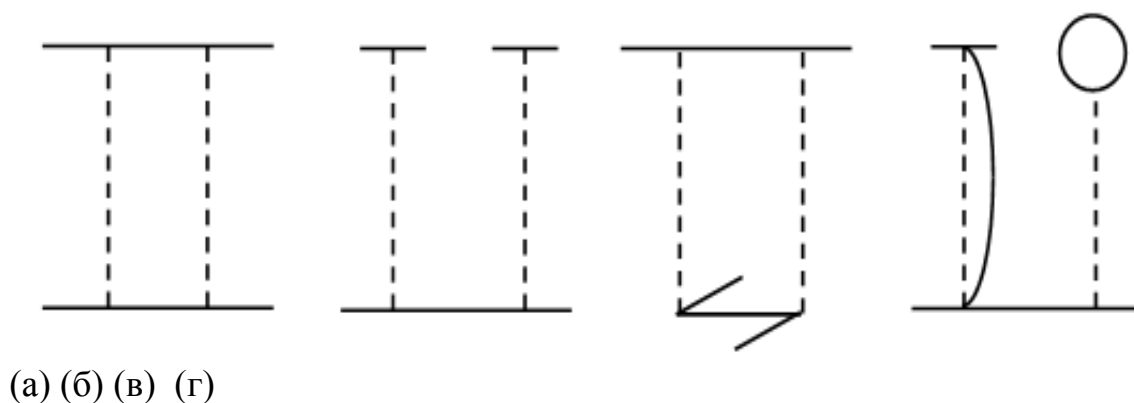


Рисунок 2.2 - Сходові діаграми другого порядку ТЗ: пряма та обмінна взаємодія 2-х або 3-х квазічастинок

Сходова діаграма, яка представлена на рисунку 2.1а, описує явну взаємодію квазічастинок у другому порядку ТЗ. Поправку другого порядку ТЗ символічно представимо у вигляді суми поляризаційної та екрануючої поправок:

$$\Delta E^{(2)} = \Delta E_{pol}^{(2)} + \Delta E_{scr}^{(2)}. \quad (2.58)$$

Безумовно, в вищих порядках ТЗ до додатків у (2.58) додаються внески діаграм, що описують інтерференцію поляризаційного та екрануючого ефектів. Згідно [3, 274, 275], внесок поправок за рахунок ефекту поляризаційної взаємодії квазічастинок без істотного збільшення

розмірів секулярної матриці  $M$  можна врахувати шляхом додавання до оператора кулонівської міжквaziчастинкової взаємодії поляризаційного оператора.

Тоді поляризаційний внесок визначається інтегралом виду [3, 28, 274]:

$$\Delta E_{pol}^{(2)} = \iint dr_1 dr_2 \rho_1(r_1) [V_{pol}^d(r_1 r_2) + V_{pol}^{ex}(r_1 r_2)] \rho_2(r_2). \quad (2.59)$$

У (2.59)  $\rho_1, \rho_2$  – щільності розподілу для відповідних квазічастинок.

У конкретних розрахунках ми використовуємо обмінно-поляризаційний потенціал у формі, що запропонована Глушковым [31]. Зокрема, шуканий потенціал прямої поляризаційної взаємодії (діаграма 2.1а) можна представити у вигляді виразу

$$V_{pol}^d(r_1 r_2) = X \left\{ \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'| \cdot |r' - r_2|} - \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'|} \int \frac{dr'' (\rho_c^{(0)}(r''))^{1/3} \theta(r'')}{|r'' - r_2|} \right\} / \left\langle (\rho_c^{(0)})^{1/3} \right\rangle \quad (2.60)$$

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

в якому присутній релятивістський фактор:

$$\theta(r) = \left\{ 1 + \left[ 3\pi^2 \cdot \rho_c^{(0)}(r) \right]^{2/3} / c^2 \right\}^{1/2}, \quad (2.61)$$

де  $X$  – чисельний коефіцієнт. Аналогічний вираз для потенціалу обмінної поляризаційної взаємодії наведено в [31].

Ефект екранування враховується стандартним чином шляхом розширення базису атомних станів [3, 28, 29, 274]. Накладення відповідних станів, зрозуміло, ускладнює обчислення. Тому вкрай важливим є врахування станів континууму, для чого вище була викладена ефективна методика обчислення цих станів.

Слід підкреслити, що ефективність будь-якої версії ТЗ визначається вибором оптимізованого нульового наближення, за рахунок чого вдається збільшити збіжність відповідних рядів ТЗ.

### **2.3 Калібрувально-інваріантна процедура генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в релятивістській теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням**

У цьому підрозділі формулюється послідовний калібрувально-інваріантний *ab initio* підхід до генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в релятивістській теорії опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів в рамках релятивістського енергетичного підходу і калібрувально-інваріантної ТЗ з оптимізованим ODF нульовим наближенням. Варто особливо підкреслити, що розвинутий нами підхід реалізовано для класу ДФ хвильових функцій, причому вперше у наближенні ODF. Також варто підкреслити, що наш підхід авжеж є більш коректним у порівнянні із стандартними HF, RHF або DF схемами.

Відповідно до [3, 21, 22, 108, 268, 274, 275], основними особливостями процедури є, по-перше, дотримання принципу калібрувальної інваріантності, по-друге, застосування ефективної процедури мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину рівнів [3, 21, 22].

Ключовим елементом новизни цієї роботи є реалізація шуканої процедури мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину в рамках RMBPT з ODF нульовим наближенням, що зроблено вперше в теорії атомних систем.

Слід нагадати, що дотримання принципу калібрувальної інваріантності грає принципову роль в теорії радіаційних процесів в атомах, оскільки, добре відомо, що саме порушення цього фундаментального принципу призводить до розбіжностей величин сил осциляторів, розрахованих в моделях самоузгодженого поля за допомогою операторів переходу в вигляді “довжини”, “швидкості”, “прискорення”.

Ідея побудови, оптимізованого калібрувально-інваріантного одноквазічастинкового уявлення, викладена в [3, 21, 22] й практично

зводиться до наступного. Радіаційні ширини або ймовірності розпаду збуджених атомних станів визначаються уявною частиною енергетичного зсуву (2.1).

Згідно з [2, 3, 21, 268, 274], основне завдання полягає у визначенні ненульового кількісного внеску в уявну частину енергетичного зсуву  $\text{Im}\Delta E$ , який враховує ефекти поляризаційної взаємодії. Шукані для даного розгляду ключові діаграми представлені на рисунку 2.3.

Методологія подальших теоретичних обчислень викладена в [2-5, 25-30], тому ми можемо використати її у повному обсязі, враховуючи лише ту обставину, що на виході очікується отримання базису оптимізованих ДФ орбіталей та взагалі оптимізоване 1-QP уявлення. Діаграма В є єдиною діаграмою другого порядку ТЗ, що дає внесок в уявну частину енергетичного зсуву  $\text{Im}\delta E$  (або радіаційну ширину атомного рівня).

Згідно із [3-5, 33-33], величини внесків  $\text{Im}\delta E$  обчислюються з використанням стандартної техніки, причому ключовим об'єктом виступає фотонний пропагатор. Загальновідомо, що вид фотонного пропагатора  $D_{\mu\nu}$  визначається калібруванням.

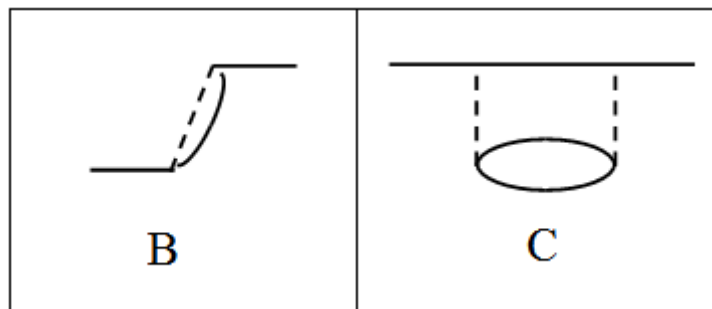


Рисунок 2.3 - Одноквазічастинкові діаграми ТЗ

У подальшому ми будемо використовувати калібрування Кулона, Фейнмана та Бабушкіна. Відповідно, такі форми калібрування фотонного пропагатора відповідають у стандартному амплітудному підході квантової механіки та квантової теорії випромінювання операторам у формі “довжини”, “швидкості” та “прискорення”.

На підставі [3, 21], внесок  $\text{Im}\delta E$  в діаграмі В може бути представлений у вигляді:

$$\text{Im } \delta E_i(B) = \sum \text{Im } \delta E(i-j). \quad (2.62)$$

Також

$$\text{Im } \delta E = -\frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{\substack{\gamma, \delta \in n \\ n \geq 1}} V_{ijj}^{|\omega|}, \quad (2.63)$$

в якому матричний  $V$  елемент переходу, що є, фактично, матричним елементом від уявної частини релятивістського оператора електромагнітної взаємодії (див. співвідношення (2.4)), що пояснює появлення синусу у відповідному визначенні виразі нижче.

Шуканий матричний  $V$  елемент радіаційного переходу має наступний вигляд [3, 21]:

$$V_{ijkl} = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_j^*(\mathbf{r}_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \cdot \varphi_k(\mathbf{r}_2) \varphi_l(\mathbf{r}_1). \quad (2.64)$$

Окремі члени суми в (2.64) являють собою парціальні внески різних каналів радіаційного розпаду. Уявна частина множника “потенціалу” в (2.64)  $\sim \sin|\omega|r_{12} / r_{12}$  далі стандартним чином розкладається в ряд функції Бесселя першого роду  $J$  (як це прийнято у PC Superatom) (див., напр., [3-7]:

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\widehat{\cos r_1 r_2}), \quad (2.65)$$

докладніше відповідні визначення наведені у [3, 271].

Можна показати, що при виборі кулонівського калібрування фотонного пропагатора відповідний вираз для ймовірності радіаційного переходу в енергетичному підході співпадає з виразом виду (2.63). Далі, згідно з [3, 21, 27, 28], шляхом підстановки (2.65) в (2.64) можна отримати вираз:

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]^{1/2} \sum_{\lambda\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 \dots j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \text{Im } T_{\lambda}(1234), \quad (2.66)$$

в якому, величина  $T_\lambda$ , що представляє собою суму кулонівської і брейтівської частин релятивістського потенціалу (2.4).

Нагадаємо, що розкладання (2.66) фактично відповідає стандартному (в електронно-атомній спектроскопії) мультипольному розкладанню для ймовірності радіаційного розпаду, та в нерелятивістському наближенні відповідає амплітудному підходу з матричними елементами оператора переходу в формі довжини для випромінювання фотону електричного типу [124]:

$$V_{fi} = (-1)^{m+1} i^j \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+1/2}}{(2j+1)!!} e(Q_{j,-m}^{(\ominus)})_{fi}, \quad (2.67a)$$

де, зокрема, використовуються позначення для величин

$$(Q_{jm}^{(\ominus)})_{fi} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int \rho_{fi}(\mathbf{r}) r^j Y_{jm} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) d^3x, \quad (2.67b)$$

що називаються  $2^j$ -польними електричними моментами переходу системи за аналогією з відповідними класичними величинами, або аналогічно для випромінювання фотону магнітного типу:

$$V_{fi} = (-1)^m i^j \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+1/2}}{(2j+1)!!} e(Q_{j,-m}^{(m)})_{fi} \quad (2.68a)$$

з відповідними  $2^j$ -польними магнітними моментами переходу [124]:

$$(Q_{jm}^{(m)})_{fi} = \frac{1}{j+1} \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int [\mathbf{r} \mathbf{j}_{fi}] \nabla (r^j Y_{jm}) d^3x. \quad (2.68b)$$

Неважко зрозуміти, що формули для випускання фотона магнітного типу відрізняються від аналогічних формул випускання фотона електричного типу заміною електричних моментів магнітними.

З класичної атомної спектроскопії відомо (дивись також вище), що повна ймовірність  $\lambda$ -польного радіаційного переходу в спектрі атому може бути представлена, як сума електричної (електричне мультипольне



розкладання)  $A_\lambda^E = P_\lambda^E$  і магнітної (магнітне мультипольне розкладання)  $A_\lambda^M = P_\lambda^M$  частин.

Для радіаційного розпаду (переходу) збудженого атомного стану відповідні вирази для ймовірностей  $\lambda$ -польного переходу  $\gamma \rightarrow \delta$  в рамках цієї теорії мають стандартний вигляд [2, 3, 96, 25-38, 274, 409]:

$$\begin{aligned} P_\lambda^E(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1) Q_\lambda^E(\gamma\delta; \gamma\delta) & Q_\lambda^E &= Q_\lambda^{Gl} + Q_{\lambda, \lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{Br} \\ P_\lambda^M(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1) Q_\lambda^M(\gamma\delta; \gamma\delta) & Q_\lambda^M &= Q_{\lambda, \lambda}^{Br}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Формули (2.63-2.69) складають основу відомого в атомній спектроскопії підходу (в оригінальній версії метод Іванова-Іванової). В нашій реалізації цього методу елементом новизни є обчислення базисів відповідних хвильових функцій в рамках релятивістської теорії збурень з оптимізованим нульовим ДФ наближенням й ефективним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів як ефектів другого та вищої порядків.

Далі слід явно виписати внесок діаграм типу С (рис. 2.3) в уявну частину енергетичного зсуву.

Попередньо записавши фотонний пропагатор запишемо у вигляді  $D = D_T + C \cdot D_L$  з відповідними поперечною  $D_T$  та поздовжньою  $D_L$  частинами ( $C$  – калібрувальна константа), тоді при обчисленні внесків в  $\text{Im}\delta E$ , обумовлених послідовністю діаграм типу С (рис. 2.3), відповідний вираз прийме форму, що відповідає методу Глушкова-Іванова [21]:

$$\begin{aligned} \text{Im}\delta E_{ninv}(\alpha - s | A_d) &= -C \frac{e^2}{4\pi} \iiint\int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \sum \left( \frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{\alpha_s}} + \right. \\ &\left. \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha_s}} \right) \Psi_\alpha^+(r_1) \Psi_m^+(r_2) \Psi_s^+(r_3) \Psi_n^+(r_4) (1 - \alpha_1 \alpha_2) / r_{12} \cdot \\ &\{ [(\alpha_3 \alpha_4 - (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34})) / r_{34} \cdot \sin[\omega_{\alpha_n} (r_{12} + r_{34}) + \omega_{\alpha_n} \cdot \\ &\cos[\omega_{\alpha_n} (r_{12} + r_{34})] (1 + (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34}))] \} \Psi_m(r_3) \Psi_\alpha(r_4) \Psi_n(r_2) \Psi_s(r_1). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Шуканий внесок, який називається калібрувально-неінваріантним, при обчисленні формально точних релятивістських хвильових функцій електронів повинен бути нульовим, однак на практиці цей внесок, зрозуміло, не є нульовим. Більш того, його величина може досягати до 50% величини амплітуди радіаційних переходів, що обчислюються в рамках стандартних одноконфігураційних методів ДФ або ХФ.

Далі, згідно з [21], реалізується процедура мінімізації функціонала щільності  $\text{Im}\delta E_{\text{minv}}$ , що призводить до відповідного інтегродиференціального рівняння типу ДФ для  $\rho_c$ . Його рішення дозволяє отримати точне оптимізоване одноквазічастинкове уявлення. Для обчислення сум виду (2.76), як правило, використовується метод диференціальних рівнянь Глушкова-Іванова-Іванової [26-28].

Процедура мінімізації функціоналу (2.71)  $\text{Im} E_{\text{minv}}$  зводиться до ланцюжка наступних варіацій [274]:

$$\delta\rho_c \rightarrow \delta V_{SCF} \rightarrow \delta\{f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s\} \rightarrow \delta X, \quad (2.71)$$

$$\delta Y \rightarrow \delta Y_i \rightarrow \delta Z_i \rightarrow \delta I \rightarrow \delta E. \quad (2.72)$$

Тут  $f$  та  $g$  – рішення релятивістського рівняння ОДФ з потенціалом  $V_{SCF}$ .

Перша ланка ланцюжка варіацій реалізується за допомогою виразу:

$$\delta V_{SCF} = \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \delta\rho_c(r') + \int_0^\infty dr' r' \rho_c(r'). \quad (2.73)$$

Далі по (2.73) розраховується поправка першого порядку до функцій ДФ  $f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s$ , які є рішеннями рівнянь ДФ з повним одночастинковим потенціалом, що є фактично біспінором виду [28, 97]:

$$\Phi_{\mu m} = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \mu_i m_i} \langle n_i \mu_i m_i | V | n \mu m \rangle / (\varepsilon_{n_i \mu_i m_i} - \varepsilon), \quad (2.74)$$

де  $\varepsilon$  – енергетичний параметр; відповідні компоненти біспінора (2.74) задовольняють системі рівнянь ДФ.

Згідно з [3, 21-24, 97, 106, 138], відповідна система диференціальних рівнянь для компонент шуканого біспінору (2.74) має наступний досить складний вигляд:

$$G' / \alpha Z + (1 - \mu)G / \alpha Z r + A_+ F = \delta V_C f_{n_i \mu_i}, \quad (2.75)$$

$$- F' / \alpha Z + (1 + \mu_i)F / \alpha Z r + A_- G = \delta V_C g_{n_i \mu_i}, \quad (2.76)$$

де функції  $A_{\pm}$  визначаються виразами:

$$A_{\pm} = V_C(r) \pm 1 / (\alpha Z)^2 - \varepsilon. \quad (2.77)$$

Рішення системи (2.74) подаються у формі квадратур і містять пари фундаментальних рішень (2.75-2.76) без правих частин.

Фактичне обчислення всіх вище наведених варіацій функцій  $X$ ,  $Z$ ,  $Y$  зводиться до чисельного розв'язання системи диференціальних рівнянь, для чого використана стандартна чисельна процедура Рунге-Кутта 4-го порядку (комплекс “Superatom-ISAN”).

## **2.4 Модельний підхід до врахування радіаційних КЕД ефектів в теорії важких атомних систем**

Як вже вказувалося вище, до числа вкрай важливих задач при прецизійному описі енергетичних, спектроскопічних характеристик релятивістських атомних систем відноситься питання урахування радіаційних КЕД поправок, а саме, власної енергетичної частини лембівського зсуву і поляризації електрон-позитронного вакууму [124].

Обчислення радіаційних поправок в КЕД, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву і поляризації електрон-позитронного вакууму, протягом довгого часу залишалося однією з найбільш фундаментальних задач фізики.

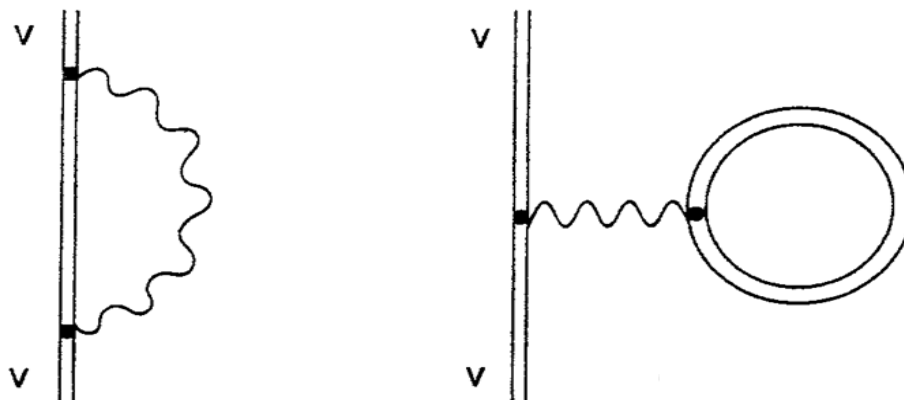
Перші вказівки на розбіжність рівнів енергії  $2S_{1/2}$  та  $2P_{1/2}$  в спектрі атома водню з'явилися ще в минулому сторіччі завдяки спектральним

дослідженням ліній Н-серії Бальмера. Експериментальне дослідження на основі радіоспектроскопічного методу Лемба і Резерфорда виявило зміщення в спектрі атома водню рівня енергії  $2S_{1/2}$  відносно рівня  $2P_{1/2}$  на 1000 МГц. Це відкриття, власне кажучи, послужило поштовхом до заснування та розвитку КЕД (e.g. [41-44, 60, 61, 250, 251, 341-343, 355-360, 392]).

Основними радіаційними КЕД ефектами є власно-енергетична частина лембівського зсуву та ефект поляризації вакууму. На мові фейнманівських діаграм ефекти описуються у нижчому по параметру  $\alpha Z$  наближенні відомими діаграмами, які наведені на рисунку 2.4.

Підкреслимо особливо, що наведені на рисунку 2.4 діаграми відповідають радіаційним поправкам у нижчому по параметру  $\alpha Z$  наближенні.

У випадку прецизійного опису важких атомних систем, а також екзотичних атомів принципово важливим є питання урахування поправок порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ), зокрема, поправок Калена-Сабри (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  і поправок Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll) порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  ( $n=3$ ).



(a) (б)

Рисунок 2.4 - Діаграми Фейнмана, що визначають внески в лембівський зсув в нижчому за  $\alpha Z$  порядку: а – власна енергетична поправка; б – поправка на поляризацію вакууму

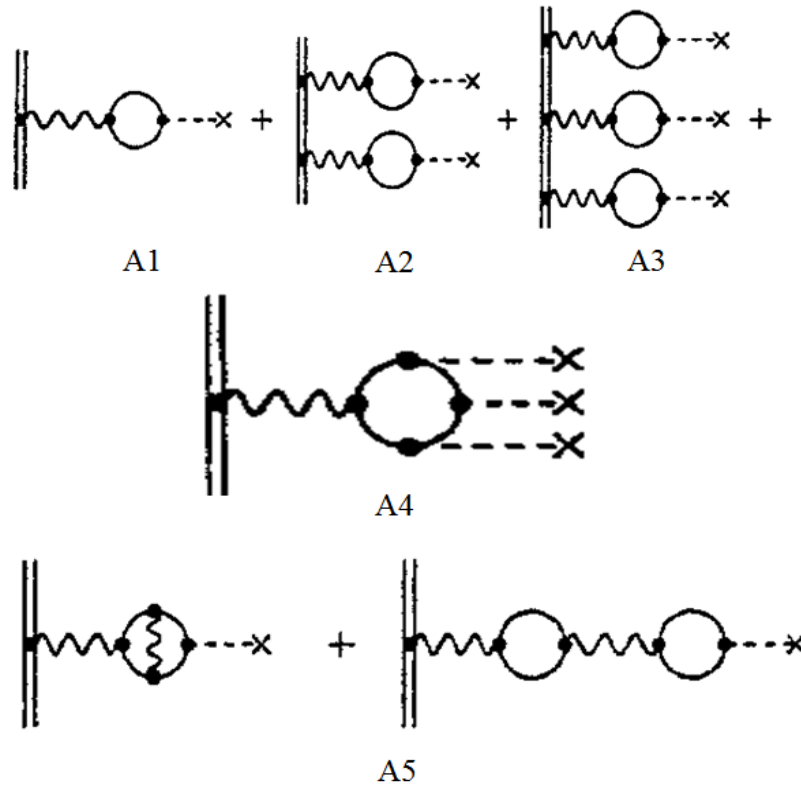


Рисунок 2.5 - Фейнманівські діаграми, що описують ефект поляризації вакууму: A1 – член Юлінга-Сербера; A2, A3 – члени порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ); A4 – 2-петльова поправка Калена-Сабрі (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$ ; A5 – поправка Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll)  $\alpha(Z\alpha)^n$  ( $n=3$ )

Відповідні діаграми A1-A3, а також діаграми, що відповідають 2-петльовій поправці Каллена-Сабрі (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  (A4) та поправці Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll) порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  ( $n=3$ ; A5), наведені на рисунку 2.5 ((e.g. [41, 60, 250, 251, 341, 355])).

На рисунку 2.5 хвиляста лінія традиційно відповідає фотонному пропагатору (з запізненням у релятивістській теорії), подвійна лінія відповідає хвильовій функції пов'язаного стану частинки (частинковий пропагатор), нарешті, переривчата лінія, що починається із знаку  $\times$ , описує взаємодію з ядром.

В прецизійній теорії потребується також урахування таких тонких ефектів як ефект на віддачу (дві верхні діаграми на рисунку 2.6) та поправку на поляризацію вакууму і власний енергетичний внесок, обумовлений змішаними діаграмами (дві нижні діаграми).

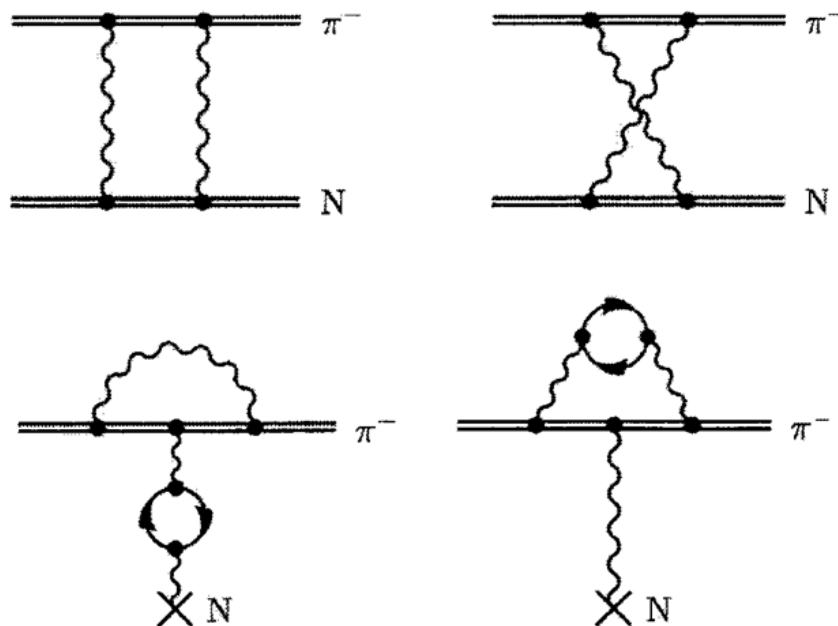


Рисунок 2.6 - Фейнманівські діаграми, які описують КЕД поправки другого та вищих порядків як у звичайній, так й адронній (каонній або піонній) системі: поправку на віддачу другого порядку (дві верхні діаграми) та поправку на поляризацію вакууму і власний енергетичний внесок, обумовлену змішаними діаграмами (дві нижні діаграми)

Вище вже вказувалося, що у сучасній КЕД теорії радіаційних ефектів корисно й звичайно враховують основні поправки (у нижчому по  $\alpha Z$  наближенні; рис. 2.4), а також поправки вищих порядків по фізичному параметру розкладання  $\alpha Z$ , а також одночасно поправки другого порядку по  $\alpha$  у власній енергії, аномальному магнітному моменті і поляризації вакууму, плюс ефекти, пов'язані зі скінченністю маси і радіусом протона.

Найбільш відомі теоретичні значення лембівського зсуву для атома водню отримали Мор et al. [341, 392]. Ними було виконано [355] найбільш повне врахування зазначених ефектів для цілого ряду нижчих електронних станів атома водню та H-подібних іонів. Слід нагадати, що в роботах Мора і Вічмана-Кролла був розвинений метод розкладання, який дозволяє обчислювати вакуумну поляризацію в усіх порядках по  $\alpha(Z\alpha)^n$ . Домінуючим виявляється перший член такого розкладання, який відповідає потенціалу Юлінга-Сербера.

Треба зазначити, що методи Мора, а також Вічмана-Кролла та ін.

строго застосовуються лише до легких систем, тобто  $Z \sim 1$  [41, 60, 250, 251, 341, 355].

Альтернативні непертурбативні підходи в теорії багатоелектронних систем, які були розроблені в роботах Мора, Деклокса-Інделікато, Саперштейна-Джонсона, Лабзовського, Шабаєва та співр., Фламбаума та співр., Іванова-Іванової-Глушкова, Хецеліус-Серги та ін. [41-44, 60-61, 250, 251, 341-343, 355-360, 392]), є досить послідовними, хоча деякі з них досі важко реалізувати для масових розрахунків.

На наш погляд, принципово важливим в теорії спектрів важких атомів є розвиток та адаптація послідовного релятивістського підходу, який дозволить з достатньою для додатків точністю, як правило, прецизійно описати зазначені вище ефекти. Спираючись на роботу Мора [341] та використовуючи результати коваріантної регуляризації S-матриці Фейнмана, можна показати, що власно-енергетичний зсув до енергії може бути представлений у вигляді (у кулонівських од.):

$$E = E_L + E_H(\Lambda) - \frac{1}{\tilde{\alpha} \pi Z} \left( \frac{3}{2} \ln \Lambda \tilde{\alpha}^2 + \frac{3}{8} \right) \langle \beta \rangle, \quad \Lambda \rightarrow \infty. \quad (2.78)$$

У рівнянні (2.78)  $E_L$ ,  $E_H$  – відповідно, низько- і високоенергетична частини лембівського зсуву до енергії. Високоенергетична частина може бути представлена у вигляді:

$$E_H(\Lambda) = \text{Re} \frac{1}{\pi Z} \int_0^\infty d\xi [E(\xi, 0) - E(\xi, \Lambda)], \quad (2.79a)$$

$$E_H(\xi, \Lambda) = \iint d r_1 d r_2 \frac{1}{r_{12}} \exp[(E_0 - i\xi)^2 - \Lambda^2]^{1/2} \Psi^+(r_2) \alpha^\mu G(r_1 r_2) \alpha^\mu \Psi(r_1). \quad (2.79b)$$

Тут  $\tilde{\alpha} = \alpha Z$ ,  $\Psi(r)$  – хвильова функція рішення рівняння Дірака,  $G$  – функція Гріна. Енергетичний параметр  $E = i\xi$  в (2.78) – чисто уявний, а функція Гріна – комплексна. Зазначимо, що два останні доданки в (2.78) є логарифмічно розбіжними при  $\Lambda \rightarrow \infty$ .

У серії робіт [27, 97, 250, 251, 269, 273, 298, 441] був розвинений новий ефективний метод визначення радіальної електронної функції Гріна

у вигляді комбінації двох фундаментальних рішень рівняння Дірака. Метод дозволяє в разі довільного центрально-симетричного атомного потенціалу визначати фундаментальні рішення відповідних диференціальних рівнянь, а чисельне рішення цих рівнянь поєднувати з обчисленням інтегралів  $\iint dr_1 dr_2$  в (2.79).

Радіальна функція Гріна визначається як 4-компонентна матриця

$$G(r_1 r_2 | E, \chi) = \begin{pmatrix} \widehat{F}(r_>)F(r_<) & \widehat{F}(r_>)G(r_<) \\ \widehat{G}(r_>)F(r_<) & \widehat{G}(r_>)G(r_<) \end{pmatrix}, \quad (2.80)$$

в якій функції  $F, G$  задовольняють рівнянням Дірака:  $\tilde{a}$

$$F' = -(\chi + |\chi|)F/r + V^- \tilde{a} G, \quad G' = (\chi - |\chi|)G/r - V^+ \tilde{a} F, \quad (2.81a)$$

$$\tilde{F}' = -(\chi + |\chi|)\tilde{F}/r + V^- \tilde{a} \tilde{G}; \quad \tilde{G}' = (\chi + |\chi|)\tilde{G}/r - V^+ \tilde{a} \tilde{F}, \quad (2.81b)$$

де  $\tilde{a} = \alpha Z$ ,  $\alpha$  – стала тонкої структури.

Функції  $(F, G)$  надають перший фундаментальний розв'язок, який є регулярним при  $r \rightarrow 0$ , сингулярним при  $r \rightarrow \infty$ . Будь-яка  $(\tilde{F}, \tilde{G}) + Cr^{2|\chi|}(F, G)$  задовольняє (2.81) і є сингулярним розв'язком при  $r \rightarrow 0$ . Існує одне значення коефіцієнту змішування, коли ця комбінація регулярна при  $r \rightarrow \infty$ . Саме це є другим фундаментальним розв'язком. В роботах [27, 28] було розроблено алгоритм його знаходження, виходячи з відомого першого розв'язку та антівронскіану:

$$W^- = F \cdot \widehat{G} + \widehat{F} \cdot G.$$

Далі розвинутий метод буде використано для обчислення відповідних радіаційних поправок до амплітуд. Як прийнято, у всіх блоках процедура розрахунку при фіксованих  $\Lambda, \chi, \xi$  буде зведена до вирішення методом Рунге-Кутта однієї системи звичайних диференціальних рівнянь, що включає також діраківські рівняння для нуклонних хвильових функцій, рівняння для потенціалу ядра із заданою щільністю розподілу заряду, а також всі інтеграли ТЗ для електронної підсистеми (див. нижче).

Дуже важливий висновок полягає у тому, що основна помилка при



обчисленні радіаційних поправок пов'язана не з ефектом розбіжностей, а є наслідком помилки інтегрування (2.78), (2.79а-2.79б).

Зручним й звичайно використовуваним стартовим підходом до обчислення радіаційної поправки, пов'язаної з ефектом поляризації вакууму, є метод, що базується на використанні відомого потенціалу типу Юлінга-Сербера [1-3].

Шуканий вакуум-поляризаційний потенціал  $V_{VP}$  може бути представлений у наступному вигляді:

$$V_{VP} = V_1 + V_3 + \dots \quad (2.82)$$

У (2.82) кожний доданок включає  $n$  польових вставок в електронну петлю поляризаційної діаграми другого порядку (рис. 2.4), причому кожний доданок  $VH_n$  стандартно обчислюється за допомогою розкладання по параметру  $\alpha Z$ .

Як відомо [124], перший доданок у виразі (2.81а-2.81б) повністю враховує три перших доданки точного розкладання по  $\alpha Z$ .

Перший член в (2.81а-2.81б) зазвичай визначається, як безпосередньо потенціал Юлінга-Сербера:

$$V_U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi} \Phi(r) \int_1^\infty dt \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) e^{-2trm} \quad (2.83а)$$

або

$$V_U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi r} \int_1^\infty dt \exp(-2rt/\alpha Z) \left(1 + 1/2t^2\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \equiv -\frac{2\alpha}{3\pi r} C(x), \quad (2.83б)$$

де  $x = r/\alpha Z$ .

Зазначимо, що вирази (2.83а, 2.83б) відносяться до поляризаційного потенціалу для точкового ядра.

Врахування скінченності розміру атомного ядра модифікує потенціал (2.83б), тоді відповідний потенціал (з урахуванням скінченного розміру ядра) буде мати вигляд:

$$V_U^{FS}(r) = -\frac{2\alpha^2}{3\pi} \int d^3r' \int_m^\infty dt \exp(-2t|r-r'|/\alpha Z) \times \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \frac{\rho(r')}{|r-r'|}, \quad (2.83в)$$

де  $\rho(r)$  – функція розподілу заряду в ядрі.

Ключовим елементом процедури обчислення радіаційних поправок є метод радіаційного потенціалу, запропонований Flambaum-Ginges (FGRP) [29]. Визначення вище введеного радіаційного оператора фактично зводиться до обчислення оператора власної енергії.

Відповідний розгляд слід розбити на дві частини, а саме: 1) розгляд взаємодії електрона з віртуальними фотонами високої частоти; 2) аналогічна взаємодія з фотонами низької частоти.

Далі нами буде використана ефективна обчислювальна схема визначення радіаційних поправок на основі потенціалу (2.83), яка заснована на методі диференціальних рівнянь Ivanov-Ivanova-Glushkov [21, 22, 25-30, 274].

У високочастотних межах зовнішнє (кулонівське) поле повинно бути включено вже в першому порядку (вершинні діаграми). У разі вільного електрону (або каону у адронному атомі) вершинні діаграми, безумовно, визначають так званий електричний  $f(q^2)$  та магнітний  $g(q^2)$  форм-фактори. Їх конкретне обчислення виявляється аналогічним обчисленню потенціалу типу Юлінга-Сербера [124].

У моментному уявленні високочастотний внесок в радіаційний потенціал визначається наступним виразом:

$$V_{rad}(q) = Q_{rad}(q)V(q), \quad (2.84)$$

де  $V$  – потенціал атома. Очевидно, на малих відстанях  $V$  дорівнює неекранованому електростатичному ядерному потенціалу [356]:

$$Q_{rad}(q) = -\frac{1}{q^2} P(-q^2) + \frac{g(-q^2)}{2m} \gamma \cdot q + f(-q^2) - 1. \quad (2.85)$$

У (2.85)  $\gamma$  – матриці Дірака,  $m = 1/r_C$ ,  $r_C$  – комптонівська довжина електрона,  $P$  – поляризаційний оператор.

Згідно [356] перший доданок в (2.85) після елементарних викладок зводиться до потенціалу Юлінга-Сербера. В координатному уявленні

радіаційний потенціал приймає наступний вигляд:

$$V_{rad}(r) = \frac{1}{4\pi^2 r} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} V_{rad}(-y^2) \exp(iy) y dy, \quad (2.86)$$

де  $y=(q^2)^{1/2}$ .

Використовуючи відповідні визначення поляризаційного оператора, електричного і магнітного форм-факторів [124, 356], можна отримати наступний вираз для радіаційного потенціалу FGRP  $V_{rad}$ :

$$V_{rad}(r) = V_U(r) + V_g(r) + V_f^\lambda(r), \quad (2.87a)$$

$$V_g(r) = \frac{\alpha}{4\pi m} i\gamma \cdot \nabla \left[ \Phi(r) \left( \int_1^\infty dt \frac{1}{t^2 \sqrt{t^2 - 1}} e^{-2tm} - 1 \right) \right], \quad (2.87b)$$

$$V_f^\lambda(r) = -\frac{\alpha}{\pi} \Phi(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2 - 1}} \left[ \left( 1 - \frac{1}{2t^2} \right) \times [\ln(t^2 - 1) + \ln(4m^2 / \lambda^2)] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right] e^{-2tm}, \quad (2.87b)$$

де перший доданок – це фактично потенціал (2.83), другий і третій – внески від електричного і магнітного форм-факторів.

Низькочастотний параметр  $\lambda$  обрізання в аргументі логарифма, що фігурує в (2.87), змінюється в межах  $(Z\alpha)^2 m \ll \lambda \ll m$ . Далі для того, щоб мінімізувати низькочастотний внесок, величина параметра вибирається рівною енергії зв'язку електрону (в звичайному багатоелектронному атомі), тобто  $(Z\alpha)^2 m$ . У порівнянні з  $s$  станами (хвилями) радіаційні зсуви для  $p$  та інших станів істотно менші і досить чутливі до коректного визначення низькочастотного внеску. Для врахування цих поправок, як правило, використовується вираз, який був вперше запропонований Фламбаумом-Гінгесом [356]:

$$V_l(r) = -\frac{B(Z)}{e} Z^4 \alpha^5 m c^2 e^{-Zr/a_B}, \quad (2.88)$$

в якому  $e$  – заряд протона,  $B(Z)$  – універсальна функція, яка визначається виразом  $B(Z)=0.074+0.35Z\alpha$ .

У формулі (2.87) також фігурує маса електрона та звичайний радіус Бора. Внесок в потенціал, обумовлений електричним форм-фактором [356], має наступний вигляд:

$$V_f(r) = -A(Z,r) \frac{\alpha}{\pi} V(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2-1}} \left[ \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right) \times [\ln(t^2-1) + 4 \ln(1/Z\alpha + 0.5)] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right] e^{-2irm} \quad (2.89)$$

У (2.89) функція  $A(Z,r)$  визначається наступним універсальним виразом:

$$A(Z,r) = (1.071 - 1.976x^2 - 2.128x^3 + 0.169x^4)mr / (mr + 0.07Z^2\alpha^2), \quad (2.90)$$

де  $x = (Z-80)\alpha$ .

В остаточній формі радіаційний потенціал можна представити у вигляді суми стандартного потенціалу Юлінга-Сербера, а також внеску, який пов'язаний з магнітним форм-фактором, високочастотного внеску, пов'язаного з електричним форм-фактором, та низькочастотного внеску (2.68), тобто:

$$V_{rad}(r) = V_U(r) + V_g(r) + V_f(r) + V_l(r). \quad (2.91)$$

Зазначимо, що у роботах [250, 251] була запропонована нова коректна форма узагальненого потенціалу Юлінга-Сербера, яка ефективно враховує поправки Каллена-Сабрі (Källén-Sabry) (A4) і Вічмана-Кролла (A5). Одним з ефективних засобів урахування шуканих поправок може бути в певній мірі менш точний, але в обчислювальному відношенні більш простий підхід, що базується на використанні додаткового вакуум-поляризаційного потенціалу, запропонований в [356] і маючого вигляд:

$$V_U^{high-order}(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi} \Phi(r) \frac{0.092Z^2\alpha^2}{1 + (1.62r/r_C)^4}. \quad (2.92)$$

З огляду на вище сказане, остаточний вираз для радіаційного потенціалу FGRP  $V_{rad}$ , використаний в нашій теорії, прийме наступний вигляд:

$$V_{rad}(r) = V_U(r) + V_g(r) + V_f(r) + V_l(r) + \frac{2}{3} V_U^{high-order}(r). \quad (2.93)$$

При практичній реалізації, як правило, використовується процедура “розмазування” потенціалу по об’єму, яка є аналогічною процедурі визначення ядерного потенціалу з урахуванням скінченного розміру атомного ядра. Вся обчислювальна процедура включена в загальну систему диференціальних рівнянь (блок “RadAdr” PC атомного коду “Superatom-ISAN” [25-30, 250, 251]).

## 2.5 Висновки до розділу 2

Основні, вперше отримані нами, результати та висновки даного розділу зводяться до наступного:

1. Розроблено новий релятивістський підхід до кількісного опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів, в основі якого лежить нова комбінована релятивістська ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням та прецизійним урахуванням всієї сукупності релятивістських, радіаційних, ядерних ефектів, включаючи ефекти Bohr-Weisskopf і Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також радіаційні КЕД поправки (зокрема, поправка на поляризацію вакууму та власно-енергетична частина лембівського зсуву, поправки вищих порядків, у т.ч. Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ,  $n=3$ ), та ефективний релятивістський енергетичний підхід (з використанням адіабатичної формули Gell-Mann & Low).

2. Розроблено нову послідовну калібрувальну-інваріантну ab initio методику генерації оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в теорії опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів в рамках калібрувальну-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF, яка узагальнює відому в атомній спектроскопії КЕД процедуру побудови оптимізованих атомних базисів з дотриманням принципу калібрувальної інваріантності.

3. В рамках нового формалізму RMBPT вперше адаптована узагальнена техніка обчислення матричних елементів оператора

релятивістської міжелектронної взаємодії, що включає кулонівську, брейтівську магнітну взаємодію з використанням релятивістських хвильових функцій оптимізованого ДФ наближення ODF.

4. Розвинена нова калібрувальна-інваріантна версія релятивістського енергетичного підходу до опису радіаційних та випромінювальних характеристик (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) важких релятивістських багатоелектронних атомів, що базується на формалізмі калібрувальна-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF й ефективним прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів.

5. В рамках нового формалізму релятивістської калібрувальна-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF розроблено новий прецизійний підхід до врахування кількісно важливих багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів при обчисленні спектрів та енергій рівнів (поправок другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків, у т.ч. екранування кулонівської взаємодії, взаємодії “частинка-вакансія”, ітерацій масового оператора, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незорому набору конфігурацій, ефекту некулоновості остова важких атомних систем, ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму та інших), як ефектів другого і вищих порядків RMBPT.

6. Вперше в межах калібрувальна-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF запропонована та реалізована нова релятивістська версія методу штурмовських розкладань для урахування станів континууму.

7. В рамках узагальненого енергетичного формалізму та нового методу калібрувальна-інваріантної RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF розроблені нові процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів при проведенні розрахунків амплітуд та ймовірностей переходів, сил осциляторів для переходів у спектрах релятивістських багатоелектронних атомів шляхом використання багаточастинкових обмінно-поляризаційних функціоналів густини.

8. В рамках нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF запропоновано та реалізовано ефективний підхід до опису радіаційних КЕД поправок, зокрема, поправок за рахунок урахування власно-енергетичної частини лембівського зсуву та ефекту поляризації вакууму (включаючи КЕД поправки вищих порядків КЕД ТЗ (У т.ч. 2-петльові поправки Källen-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ), який базується на методі релятивістських функцій Гріна з комплексною енергією та методі узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges, що включає стандартний потенціал Uhling-Serber, внески від електричного і магнітного форм-факторів, а також члени, що враховують внески поправок порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ), у т.ч. поправки Källen-Sabry та Wichmann-Kroll.

Основні наукові результати, викладені в даному розділі, опубліковано в роботах: [250, 251, 261, 268, 269, 271, 273-275, 277, 290, 296, 298-300].

## РОЗДІЛ 3

# ТЕОРЕТИЧНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ВАЖКИХ І НАДВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ: РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ СПЕКТРІВ, ЕНЕРГЕТИЧНИХ, РАДІАЦІЙНИХ І СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

### 3.1 Вступ

В даному розділі приведені результати розрахунків характеристик складних важких багатоелектронних атомів на основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу (див. розділ 2).

З метою апробації нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримані результати розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1 переходів та E2 переходу в одноразово іонізованому атомі  $\text{Hg}^+$ , енергій рівнів конфігурацій  $n^2$ ,  $n^2p$  (n=6, n'=7) та ймовірностей переходів (лінії 2833.9, 3684.5, 4059Å) важкого атому свинцю, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів в спектрі атому  $\text{Eu I}$ ,

Також отримані енергетичні, радіаційні і спектроскопічні характеристики цілої групи важких і надважких атомних систем, в тому числі, енергії і ширини збуджених станів (резонансів) для важких атомів рідкоземельних елементів ітербію Yb, тулія Tm, атома урану U і т.д.

Вперше для цілого ряду станів атомів Yb, Tm в рамках високоточних розрахунків отримані нові спектроскопічні дані. В якості тестових обчислень для визначення можливостей нового підходу проведені тестові обчислення енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів талію Tl і свинцю Pb, іона ртуті  $\text{Hg}^+$ .

Виконано детальне дослідження внеску різних груп обмінно-кореляційних поправок в характеристик атомних станів, в тому числі, вичерпний аналіз впливу вибору калібрування фотонного пропатора на значення ймовірностей радіаційних переходів і сил осциляторів важких



атомів талію Tl і свинцю Pb, іона ртуті  $\text{Hg}^+$ , а також ряду інших атомів та іонів. Показано, що акуратне урахування складних обмінно-кореляційних поправок принципово необхідне для отримання фізично розумної узгодженості теоретичних та експериментальних даних [262, 264, 265, 267, 274, 275, 286, 288, 292, 293, 294].

### **3.2 Теоретична спектроскопія іона ртуті $\text{Hg}^+$ та важких атомів талію Tl і свинцю Pb**

#### **3.2.1 Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні ртуті $\text{Hg}^+$**

В якості найбільш значущого тесту для використовуваного нами релятивістського підходу до визначення енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик атомних систем представимо результати розрахунку енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних дипольних переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та електричного квадрупольного переходу  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі  $\text{Hg}^+$  [29, 126, 142, 146, 170, 180, 267, 288].

Як вказувалося в роботах [9, 126, 142, 145, 146], цей істотно релятивістський іон вкрай цікавий і важливий, як з точки зору тестування релятивістських методів вивчення електронної структури важких атомних систем (принципово важливою є задача врахування релятивістських і кореляційних ефектів, оскільки переходи, що розглядаються, відбуваються в зовнішніх оболонках в сильному полі атома з великим зарядом ядра), так і по причині його використання в численних додатках в квантовій електроніці, фізиці зіткнень і т.д. В рамках релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF збуджені стани іона  $\text{Hg}^+$  трактуються, як одно- і трьох-квазічастинкові стани електронів ( $6s$ ) (вакансії  $5d^{-1}$ ) над остовом заповнених електронних оболонок  $5d^{10}6s^2$ .

У таблицях 3.1, 3.2, 3.3 відповідно представлені результати теоретичного обчислення енергій і ймовірностей дипольних E1 (для тесту) переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та електричного E2 квадрупольного переходу  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в

$\text{Hg}^+$  (HF – хартрі-фоківські дані, DF – дірак-фоківські дані,  $\text{DF}_{\text{експ.}}$  – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, RPT-MP - релятивістська ТЗ з емпіричним модельним потенціалом (MP), Our data, QI-RMBPT - наш розрахунок (на основі калібрувально-інваріантної (QI) релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF) [29, 126, 142, 146, 170, 267, 288]. а також досить надійні експериментальні дані Moore (NBS, Washington) [180].

Детальне порівняння даних, представлених в таблицях 3.1-3.3, показує, що методи HF і DF в стандартній реалізації простого одноконфігураційного наближення дають вкрай неточні дані як по енергіях, так і ймовірності радіаційних переходів.

Використання експериментальних значень енергії в рамках стандартної DF схеми призводить до поліпшення результатів, що пов'язано з емпіричним урахуванням вкрай важливих з кількісної точки зору ефектів міжелектронних кореляцій. Дійсно, певна частина обмінно-корреляційних ефектів (як правило, в основному одноквазічастинкових) враховується в емпіричних версіях традиційних методів розрахунку енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів.

Таблиця 3.1 - Енергії переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ ,  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в іоні  $\text{Hg}^+$  (в Ry): ХФ – хартрі-фоківські дані, ДФ – дірак-фоківські дані, RMBPT – релятивістська багаточастинкова ТЗ з модельним нульовим наближенням [29, 126, 142, 146, 170, 267]; Our data – наші дані; Exp. – (експеримент) Moore (NBS, Washington) [180]

Метод	$E_{6s}$	$7P_{1/2}-6S_{1/2}$	$7P_{3/2}-6S_{1/2}$	$7P_{1/2}-7S_{1/2}$	$7P_{3/2}-7S_{1/2}$	$D_{3/2}-S_{1/2}$	$D_{5/2}-S_{1/2}$
ХФ	-1.07	0.72	0.72	0.095	0.095	0.863	0.863
ДФ	-1.277	0.90	0.92	0.109	0.127	0.608	0.460
RPT-MP	-1.377	0.99	1.024	0.118	0.150	0.480	0.328
Our data: gf (L)	-1.378	0.988	1.021	0.116	0.148	0.462	0.325
Our data: gf (V)		0.986	1.019	0.114	0.0146	0.460	0.323
Exp.	-1.378	0.987	1.020	0.115	0.148	0.461	0.324

В той же час, такі методи мають обмежену область застосування. Крім того, у більшості випадків для деяких важливих атомних систем, зокрема, важких або надважких, експериментальні дані взагалі відсутні.

В рамках релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF-ефекти обмінно-кореляційної взаємодії поляризаційного типу в електронній підсистемі (в багатоконфігураційному наближенні цей ефект відповідає урахуванню віртуальних збуджень остова; квазічастинки “заморожені”) та ефекти взаємного екранування валентних електронів (остов “заморожений”; квазічастинки віртуально збуджуються) враховані значно краще у порівнянні зі стандартними найпростішими версіями методів ХФ і ДФ.

Таблиця 3.2 - 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,  $DF_{exp.}$  – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, RPT-MP – релятивістська ТЗ з модельним нульовим наближенням; Our data- наш розрахунок [29, 126, 142, 146, 170]; Exp. – Moore (NBS, Washington)[180]

Метод	$7P_{3/2}-6S_{1/2}$	$7P_{1/2}-6S_{1/2}$	$7P_{3/2}-7S_{1/2}$	$7P_{1/2}-7S_{1/2}$
HF	$4.75 \cdot 10^6$	$4.75 \cdot 10^6$	$3.65 \cdot 10^7$	$3.65 \cdot 10^7$
DF	$8.45 \cdot 10^7$	$1.67 \cdot 10^7$	$6.89 \cdot 10^7$	$4.71 \cdot 10^7$
$DF_{exp.}$	$1.17 \cdot 10^8$	$2.04 \cdot 10^7$	$1.10 \cdot 10^8$	$5.52 \cdot 10^7$
RPT-MP	$1.49 \cdot 10^8$	$2.31 \cdot 10^7$	$1.41 \cdot 10^8$	$6.33 \cdot 10^7$
Our data	$1.52 \cdot 10^8$	$2.34 \cdot 10^7$	$1.42 \cdot 10^8$	$6.35 \cdot 10^7$
Exp.	$1.53 \cdot 10^8$	$2.35 \cdot 10^7$	$1.44 \cdot 10^8$	$6.37 \cdot 10^7$

У нашому підході зазначені обмінно-кореляційні поправки враховані максимально точно.

Поправка на урахування поляризаційної взаємодії валентних електронів змінює значення ймовірностей дипольних переходів на 15-30%. Також слід звернути увагу на практично нульове значення калібрувально-неінваріантного внеску в ймовірність переходу (0,2%; в таблиці 3.2 це – різниця між значеннями сил осциляторів, розрахованими з використанням

оператора переходу у формі довжини та у формі швидкості), що на традиційній мові означає еквівалентність результатів розрахунків ймовірностей в схемах з оператором у формі довжини та швидкості (різні калібрування фотонного пропагатора), та є свідченням оптимального вибору дірак-фоківського нульового наближення ODF, а також досить повного ефективного обліку багаточастинкових кореляційних ефектів.

Таблиця 3.3 - Ймовірності забороненого E2 переходу  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в  $Hg^+$  (в  $s^{-1}$ ): HF – хартрі-фоківські дані, DF – дірак-фоківські дані,  $DF_{exp.}$  – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, RPT-MP – релятивістська багаточастинкова ТЗ з модельним нульовим наближенням; Our data- наш розрахунок [29, 126, 142, 146, 170, 267]; Exp. – (експеримент) Moore (NBS, Washington) [180]

Метод	$D_{3/2}-S_{1/2}$	$D_{5/2}-S_{1/2}$
HF	1360	1360
DF	253.0	77.4
$DF_{exp.}$	63.9	13.3
RPT-MP	54.53	11.84
Our data	53.88 (0.2%)	11.67 (0.2%)
Exp.	$53.5 \pm 2.0$	$11.6 \pm 0.4$

### 3.2.2 Теоретична релятивістська спектроскопія атома талію Tl

Розрахунок спектральних характеристик атомів талію і свинцю становить величезний інтерес з кількох причин. По-перше, зазначені атоми відносяться до класу вкрай складних з теоретичної точки зору, тому що є системами, в яких роль, як релятивістських, так і обмінно-кореляційних ефектів, очевидно, представляється вкрай істотною.

У цьому сенсі кількісна перевірка будь-якої послідовної теорії, що претендує на прецизійність, в тому числі і розвиненою нами, повинна, зрозуміло, включати в себе розрахунок тих характеристик важких атомів, опис яких вимагає коректного врахування релятивістських та обмінно-кореляційних ефектів. Згадані атоми є складними із спектроскопічної точки зору, оскільки спектр їх збуджених станів, в т.ч. за рахунок змінного (АС) електромагнітного поля, формується при збудженні електронів з

основних конфігурацій  $6s^26p$  ( $^2P_{1/2}^0$ ) у талію Tl та  $6s^26p^2$  ( $^3P_0$ ) у свинцю Pb.

У таблицях 3.4 і 3.5 представлені результати нашого розрахунку (на основі нової релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF, розділ 2) енергії ряду рівнів (цікавих для використання, напр., в таких прикладних задачах як вивчення порушення парності у важких атомах, обчислення зсуву і розширення спектральних ліній в буферних інертних газах та багатьох інших) та амплітуд E1 переходів для атома талію  $^{205}\text{Tl}$  (заряд ядра  $Z=81$ ) [3, 72, 73, 128, 129-133, 138, 286, 288].

Таблиця 3.4 - Енергії ( $\text{см}^{-1}$ ) рівнів для атома талію  $^{205}\text{Tl}$  (заряд ядра  $Z=81$ ): експериментальні дані та результати розрахунку в рамках: релятивістського методу ХФ (RHF); теорії РХФ, залежної від часу (TDRHF); теорії N-QED; теорії RPT-NODF; нашої теорії RMBPT- ODF

Стан	RHF	TDRHF	RPT-NODF	N-QED	Exp.	Our data
7s	-21100	-22952	-22818	-22799	-22786	-22809
6p <sub>1/2</sub>	-43909	-50654	-	-49295	-49264	-49308
7p <sub>1/2</sub>	-14282	-15203	-	-15142	-15104	-15154
6p <sub>3/2</sub>	-36670	-42704	-41432	-41497	-41471	-41501
7p <sub>3/2</sub>	-13359	-14224	-	-14135	-14103	-14145
6d <sub>3/2</sub>	-12218	-13130	-13175	-13141	-13146	-13167
6d <sub>5/2</sub>	-12167	-13042	-	-13055	-13064	-13083

Для порівняння також наведені результати розрахунку в рамках релятивістського методу Хартрі-Фока (РХФ=RHF), релятивістської теорії Хартрі-Фока, залежної від часу (TDRHF), релятивістської багаточастинкової ТЗ з неоптимізованим DF нульовим наближенням (RPT-NODF), прецизійної ядерно-квантово-електродинамічної ТЗ (N-QED), а також результати останніх прецизійних експериментальних вимірювань [3, 72, 73, 128, 129-133, 138, 286, 288].

Аналіз даних таблиці 3.4 показує, що точність класичних методів типу РХФ є явно незадовільною, що обумовлено, в першу чергу, недостатньо коректним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів. Наші дані знаходяться в достатньо хорошій узгодженості з експериментальними даними і, що дуже важливо, більш кращій, ніж навіть дані, які були

отримані в рамках досить складного і прецизійного методу теорії РХФ, залежного від часу.

Інші методи типу N-QED дають досить прецизійні результати, однак, слід підкреслити, що ці підходи розроблялися з орієнтацією на рішення вкрай складних класів задач надпрецизійної спектроскопії, зокрема, пов'язаних з описом ефектів незбереження парності у важких атомах, та на відміну від нашого підходу, враховують, в тому числі, і тонкі ядерні (включаючи ефекти Bohr-Weisskopf, Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow) і радіаційні (КЕД) поправки.

З іншого боку, з обчислювальної точки зору, зазначені методи істотно складніше нашого підходу і навряд чи можуть бути використані в масових розрахунках параметрів збуджених, у тому числі, рідбергівських та автоіонізаційних станів важких атомів. Як зазначалося раніше, точність розрахунку енергій, хоча і є, безумовно, показником коректності теорії, і в т.ч. коректності врахування як релятивістських, так і кореляційних поправок, проте, ще більш важливим з кількісної точки зору є розрахунок ймовірностей радіаційних переходів (амплітуд).

Представлені в таблиці 3.5 теоретичні та експериментальні дані [3, 128-133, 138, 286, 288] по амплітудам  $E1$  переходів для атома талію  $^{205}\text{Tl}$  показують, що класичні методи типу релятивістського методу ХФ і широко використовуваного одноконфігураційного (неоптимізованого!) методу ДФ (в даному випадку виконувалось обмежене врахування ефектів конфігураційної взаємодії) не дають прецизійної точності опису шуканих амплітуд радіаційних переходів.

Фундаментальна проблема, яка тут яскраво проявляється – це не надто висока точність обчислення матричних елементів радіаційних переходів, яка пов'язана, перш за все, з невиконанням фундаментального фізичного принципу калібрувальної інваріантності при генерації одноквазічастинкового уявлення в методах самоузгодженого поля РХФ, ДФ, на що вказує достатньо істотна за величиною різниця в даних по амплітудам переходів, отриманих з використанням оператора електричного дипольного переходу в формі довжини і швидкості (а також прискорення).

Як відомо, в прецизійних теоріях з досить точними базисами хвильових функцій внаслідок калібрувальної інваріантності значення амплітуд повинні бути однакові.

Таблиця 3.5 - Амплітуди ( $ea_B$ ) E1 переходів для атома талію  $^{205}\text{Tl}$  ( $Z=81$ ): експеримент і дані розрахунку в рамках методу РХФ (RHF), ДФ с урахуванням взаємодії конфігурацій (DF+CI), теорій TDRHF, N-QED і наші дані

Перехід	Форма оператора	RHF	DF-CI	TDRHF	N-QED	Наші дані	Exp.
$6p_{1/2}-7s$	Довжина, L	2.50	2.32	2.14	2.22	2.21	2.23(6)
	Швидкість, V	2.00	1.92	2.15	2.22	2.21	
$6p_{3/2}-7s$	L	3.43	3.10	2.81	2.83	2.82	2.83(6)
	V	2.75	2.55	2.84	2.82	2.81	
$6p_{1/2}-8s$	L	0.80	0.71	0.64	0.68	0.67	0.67(3)
	V	0.61	0.56	0.65	0.67	0.66	
$6p_{1/2}-8s$	L	0.86	0.77	2.63	0.66	0.65	-
	V	0.64	0.61	0.65	0.66	0.65	
$7p_{1/2}-7s$	L	-8.14	-7.52	-7.20	-7.26	-7.25	-7.27(7)
	V	-7.72	-7.07	-7.13	-7.26	-7.24	
$7p_{3/2}-7s$	L	-7.65	-7.08	-6.85	-6.82	-6.81	-6.84(7)
	V	-7.22	-6.86	-6.79	-6.82	-6.80	
$6p_{1/2}-6d_{3/2}$	L	-2.35	-2.40	-2.18	-2.03	-2.05	-1.99(8)
	V	-2.17	-2.28	-2.32	-2.02	-2.04	
$6p_{3/2}-6d_{5/2}$	L	-3.16	-3.08	-2.84	-2.67	-2.69	-2.64(9)
	V	-2.96	-2.94	-3.00	-2.66	-2.68	

Теорія Фламбаума та співр. [72, 73] в порівнянні з методом РХФ, залежного від часу, виявляється більш строгою та дає кращі дані, ніж ХФ, однак, як свідчать результати, наведені у табл. 3.5, в цій теорії також має місце не повне виконання принципу калібрувальної інваріантності збуджених та автоіонізаційних станів атомів.

Теорія N-QED, яка була розроблена Khetselius [138] та отримала в останні роки широке міжнародне визнання, судячи за кількістю особливо зарубіжних цитувань, дає найбільш точні результати, проте, як вже зазначалося вище, ця теорія в повній реалізації не орієнтована на проведення масових атомно-спектроскопічних розрахунків.

Теорія Glushkov-Svinarenko, яка базується на основі релятивістської

ТЗ з нульовим оптимізованим наближенням функціоналу густини, а саме, Дірака-Кона-Шема (DKS), також видається ефективним методом, хоча її точність поступається точності нашого підходу.

Зазначимо, що в нашій теорії калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційну амплітуду в середньому становить величину порядку 0.1%, в той час, як в альтернативних теоріях типу ХФ цей внесок досягає величини порядку 25%.

У таблицях 3.6 і 3.7 на основі нашої нової релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF наведені результати розрахунку енергетичних характеристик високозбуджених, АС станів талію, зокрема, представлені значення енергій і сил осциляторів переходів  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6 < n < 24$ ) (табл. 3.6) та  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8 < n < 24$ ) (табл. 3.7).

Таблиця 3.6 - Енергії та сили осциляторів переходів  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $12 < n < 24$ ) d-серій: Експеримент –  $E_{exp}$   $gf_{exp}$ ; Теорія –  $gf_{th}$ : А – кулонівське наближення;  $gf_{th}$ : В – метод ХФ=HF;  $gf_{th}$ : С – метод МП=MP;  $gf_{th}$ : наші дані

n	$E_{exp}$	$E_{th}$	$gf_{exp}$	$gf_{th}$ : А	$gf_{th}$ : В	$gf_{th}$ : С	$gf_{th}$ : наші дані
6	36129	36152	0.33	0.29	0.60	0.29	0.32 0.33
7	42024	42049	0.081	0.076	0.18	0.074	0.079 0.08
8	44687	44712	0.032	0.029	0.08	0.028	0.031 0.032
9	46113	46138	0.015	0.014	0.04	0.014	0.015 0.016
10	46965	46988	0.0081	0.0081	0.025	0.008	0.0081 0.082
11	47515	47535	0.0055	0.0055	0.017	0.0054	0.0055 0.0057
12	47876	47896	0.0035	-	-	-	0.0034 0.0036
13	48142	48161	0.0024	-	-	-	0.0022 0.0024
14	48338	48356	0.0017	-	-	-	0.0016 0.0018
15	48489	48505	0.0013	-	-	-	0.0012 0.0014
16	48604	48623	0.0010	-	-	-	0.0010 0.0012
17	-	48712	-	-	-	-	0.0007 0.0009
18	-	48781	-	-	-	-	0.0006 0.0008
19	-	48832	-	-	-	-	0.0005 0.0006
20	-	48891	-	-	-	-	0.0004 0.0005
22	-	48969	-	-	-	-	0.0003 0.0004



Для порівняння також наведені наявні експериментальні дані та дані альтернативних як емпіричних, так й неемпіричних теорій (методи МП, ХФ, кулонівського наближення) [3, 72, 73, 128-133, 138, 286, 288].

Наш метод, як видно з даних таблиць 3.6 і 3.7, забезпечує цілком прийнятну узгодженість з експериментальними даними, що, очевидно, можна пояснити використанням в нашій теорії оптимізованого одноквазічастинкового наближення (див. розділ 2); важливо, що внесок калібрувальних-неінваріантних членів становить  $\sim 0.1\%$  і прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів. Саме з цих причин метод є більш точним і послідовним у порівнянні з методами ХФ, кулонівським наближенням і методом МП (табл. 3.6, 3.7).

Для ряду досліджених станів досить точні дані отримані нами вперше.

Таблиця 3.7 - Енергії та сили осциляторів переходів  $6s^2 6p^2 P_{1/2} - 6s^2 n s^2 S_{1/2}$  ( $8 < n < 24$ ): Експеримент –  $E_{exp}$   $g_{f_{exp}}$ ; Теорія –  $g_{f_{th}}$ : А – кулонівське наближення;  $g_{f_{th}}$ : В – метод ХФ ;  $g_{f_{th}}$ : С метод МП;  $g_{f_{th}}$ : наші дані

n	$E_{exp}$	$E_{th}$	$g_{f_{exp}}$	$g_{f_{th}}$ : А	$g_{f_{th}}$ : В	$g_{f_{th}}$ : С	$g_{f_{th}}$ : наші дані
8	38757	38781	0.018	0.017	0.015	0.076	0.017
9	43180	43208	0.0067	0.0059	0.005	0.006	0.0065
10	45311	45336	0.0033	0.0079	0.0024	-	0.0029
11	46471	46494	0.0019	0.0020	0.0014	0.0022	0.0018
12	47193	47201	0.0012	0.0012	0.0008	0.0013	0.0012
13	47654	47670	0.00079	-	-	-	0.00081
14	47984	48002	0.00056	-	-	-	0.00054
15	48222	48235	0.00041	-	-	-	0.00040
16	-	48410	-	-	-	-	0.00029
17	-	48546	-	-	-	-	0.00022
18	-	48652	-	-	-	-	0.00018
19	-	48735	-	-	-	-	0.00014
20	-	48808	-	-	-	-	0.00011
22	-	48913	-	-	-	-	0.00008
24	-	48941	-	-	-	-	0.00006

### 3.2.3 Рівні енергії надважкого елемента ніхонія ${}_{113}^{278}\text{Nh}$

Цей ізотоп становить інтерес з багатьох причин. По-перше, мова йде про отримання інформації про об'єкт, який з багатьох ключових позицій є практично невивченим. З точки зору фізики ядра, він цікавий, оскільки знаходиться поблизу так званого “острова стабільності”. Якщо припустити, що послідовність заповнення оболонок в надважких елементах не порушена, то 113 елемент повинен мати також 1 електрон поверх замкнених оболонок з  $n \leq 6$  та подобонок  $7s^2$ . Його найближчим аналогом є якраз талій Tl.

У таблиці 3.8 представлені результати нашого розрахунку RMBPT-ODF енергій рівнів надважкого елемента  ${}_{113}^{278}\text{Nh}$  з урахуванням релятивістських, радіаційних та кореляційних поправок. Зазначимо, що в цьому окремому випадку для опису розподілу заряду в ядрі ми використовували фермієвську функцію розподілу. Радіаційні поправки оцінені відповідно до методики, викладеної в розділі 2. Для порівняння в табл. 3.8 наведені точкові наближені оцінки енергії рівня  $7p_{1/2}$ , взяті з літературних джерел [138, 168, 288]. Ці дані були отримані на основі стандартного неоптимізованого багатоконфігураційного методу ДФ (MCDF), релятивістського методу ХФ без урахування та з частковим урахуванням кореляцій (RHF і RHF-C). Очевидно, що облік обмінно-кореляційних поправок та радіаційних КЕД ефектів у значній мірі є вкрай важливим.

Таблиця 3.8 - Енергії рівнів надважкого елемента  ${}_{113}^{278}\text{Nh}$

Стан	RMBPT-ODF (без кореляції)	RMBPT-ODF	Інші розрахунки (див. текст)
8s	-22482	-24295	-
8s	-10504	-11008	-
$7p_{1/2}$	-55652	-60914	59700 (MCDF) -55576 (RHF) -61044 (RHF-C)
$8p_{1/2}$	-15395	-16086	-
$7p_{3/2}$	-31678	-37715	-
$8p_{3/2}$	-12627	-13461	-

### 3.2.4 Теоретична релятивістська спектроскопія атома свинцю Pb

Слід зазначити, що атом свинцю Pb викликає традиційно значний інтерес, оскільки він є дуже гарним тестовим прикладом з точки зору врахування релятивістських методів вивчення електронної структури важких атомних систем, враховуючі його важливість для використання в численних додатках в квантовій електроніці, фізиці зіткнень і т.д.

У таблиці 3.9 наведені дані розрахунку на основі нашої нової теорії (КЕД ТЗ-ЕА) ймовірності переходу, що відповідає лінії 12789А (1278.9 нм) в спектрі свинцю Pb, разом з результатами альтернативних теорій, зокрема, даними, отриманими на основі розрахунку в багатоконфігураціоному наближенні ДФ з використанням відповідно теоретичного ДФ та експериментального значень енергії переходу (MCDF: theor.E; exp.E), в багатоконфігураціоному релятивістському наближенні випадкових фаз (MCRRPA), в релятивістському наближенні Хартрі-Фока (RHF), в наближенні проміжного зв'язку (ICC) і, нарешті, методом емпіричного МП (EMP), нарешті, методом релятивістської ТЗ з ДКШ нульовим наближенням [125, 127-129, 169, 180, 288].

Таблиця 3.9 - Значення ймовірності  $P$  ( $s^{-1}$ ) переходу 12789А в спектрі свинцю (див. текст)

Теорія	MCDF (exp.E); Horodecki et al	7.27
Теорія	MCDF (theor.E); Horodecki et al	4.29
Теорія	EMP; Horodecki et al	7.50
Теорія	RHF (Biemont-Quinat)	7.85
Теорія	MCRRPA (Chou-Huang)	7.00
Теорія	RHF (Dzuba-Flambaum et al)	7.08
Теорія	ICC (Garstang)	7.14
Теорія	RPT -DKS (Glushkov-Svinarenko)	6.95
Теорія	RMBPT-ODF (Our data)	6.58
Експеримент	Laser absorption	6.1±1.5

Аналіз наведених в таблиці 3.9 даних показує, що методи типу ДФ та МП дають досить високу похибку у визначенні ймовірності переходу, в той час як методи Dzuba-Flambaum et al., Chou-Huang, Glushkov-Svinarenko і наша теорія забезпечують значно кращу узгодженість з експериментом. Дуже важливим тестом є визначення ймовірностей переходів, оскільки така оцінка дає можливість зробити висновок щодо якості базисів хвильових функцій. Наприклад, DF значення ймовірності переходу 12789A в спектрі свинцю, отримані в рамках методу MCDF з використанням теоретичного ДФ значення енергії переходу, виявляється рівним  $4.29 \text{ c}^{-1}$ , в той час як в рамках даної схеми підстановка експериментального значення енергії переходу змінює значення ймовірності зазначеного переходу фактично майже на 70%.

Слід мати на увазі, що при розрахунку шуканої ймовірності важливу кількісну роль відіграє прецизійне врахування обмінно-кореляційних ефектів. Кожен може нагадати тут про необхідність врахування таких ефектів як поляризаційна взаємодія зовнішніх  $b_r$  та  $b_s$  електронів через істотно поляризований остов (віртуальні збудження), так й про ефекти екрануючої взаємодії зовнішніх квазічастинок, а також про різні інтерференційні ефекти вищих порядків ТЗ.

Зазначимо, що детальний виклад процедур їх врахування наведено в попередньому розділі.

Вельми цікаві висновки можна отримати з аналізу величини калібрувально-неінваріантного внеску в амплітуду переходу Отримане нами значення ймовірності  $6.58 \text{ c}^{-1}$  відповідає кулоновому калібруванню фотонного пропатора.

При використанні калібрування Фейнмана аналогічне значення становить  $6.60 \text{ c}^{-1}$ , тобто величина калібрувально-неінваріантного вкладу становить долі проценту.

Слід також звернути увагу на надзвичайно високу похибку експерименту. В таблиці 3.10 наведені наші результати розрахунку енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) свинцю.

Для порівняння також наведені дані (NIST [180]) і результати розрахунку в рамках релятивістської багаточастинкової ТЗ: RPT-PHF з хартрі-фоківським HF «0» наближенням та RPT-DKS з дірак-коншемівським DKS «0» наближенням [125,127-129,169, 180, 288].

Таблиця 3.10 - Енергії рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $n'p^2$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) свинцю

Конфігурація	Терм	Exp (NIST)	PPT-HF	RPT-DKS	Our data
$np^2$	$^3P_0$	59821	59960	59862	59856
	$^3P_1$	52002	51996	52005	52001
	$^3P_2$	49171	49174	49172	49168
	$^1D_2$	38363	38301	38352	38364
	$^1S_0$	30354	30282	30332	30348
$n'p^2$	$^3P_0$	24861	24763	24924	24898
	$^3P_1$	24534	25321	24598	24576

У табл. 3.11 наведені дані нашої теорії RMBPT-ODF для ймовірностей переходів  $6p^2\ ^3P_J \rightarrow 7s\ ^3P_J^0$ , (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) разом з експериментальними значеннями [180] та даними обчислення в рамках релятивістської багаточастинкової ТЗ RPT з дірак-кон-шемівським DKS «0» наближенням [125, 127-129, 169, 180, 288].

Аналіз наведених у таблицях спектроскопічних даних для свинцю показує, що, по-перше, цей атом з очевидних причин є приклад достатньо складної системи, опис спектроскопічних та енергетичних характеристик якої потребує акуратного та прецизійного урахування релятивістських та обмінно-поляризаційних ефектів.

Таблиця 3.11 - Ймовірності переходів  $6p^2\ ^3P_J \rightarrow 7s\ ^3P_J^0$  (лінії 2833.9, 3684.5, 4059.0 A)

Перехід	$\lambda$ (A) Експ.	Експ.: $P(c^{-1})$	RPT-DKS $P(c^{-1})$	Our data $P(c^{-1})$
$6p^2\ ^3P_0 \rightarrow 7s\ ^3P_1^0$	2833.9	$(0.6 \pm 0.18) \cdot 10^8$	$0.74 \cdot 10^8$	$0.62 \cdot 10^8$
$6p^2\ ^3P_1 \rightarrow 7s\ ^3P_0^0$	3684.5	$(1.5 \pm 0.25) \cdot 10^8$	$1.65 \cdot 10^8$	$1.52 \cdot 10^8$
$6p^2\ ^3P_2 \rightarrow 7s\ ^3P_1^0$	4059.0	$(0.9 \pm 0.27) \cdot 10^8$	$1.04 \cdot 10^8$	$1.01 \cdot 10^8$

Неважко побачити, що має місце також достатньо висока похибка експерименту. Також варто уваги та обставина, що як й у попередньому випадку досить складного радіаційного переходу  $12789A$ , в спектрі Pb теоретичні значення виявляються за величиною більше рекомендованих експериментальних.

Ключовими для адекватної точності опису спектроскопічних характеристик свинцю є авжеж прецизійне врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, використання оптимізованих базисів орбіталей. Порівняння наших результатів з даними розрахунків у межах ТЗ з дірак-кон-шемівським наближенням показує, що має місце певна різниця як в значеннях енергій, так й ймовірностей переходів, що авжеж пов'язано із різним ступенем урахування у тому числі обмінно-кореляційних поправок.

Головний висновок наших розрахунків полягає у тому, що розвинутий нами метод релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF має досить високу теоретичну послідовність і прецизійність, й може бути використаний і для розрахунків таких складних систем, як атоми лантанодів, актиноідів, взагалі, важких та надважких атомів та іонів.

### **3.3 Тестові розрахунки ймовірності радіаційних переходів в спектрі атому Європію Eu I**

В цьому підрозділі ми наведемо результати розрахунку енергій переходів і ймовірностей деяких переходів в спектрі атомів (з групи лантанодів) Європію Eu I. У таблиці 3.12 наведені розглянуті переходи, а також відповідні довжини хвиль, які були нами розраховані.

У табл. 3.13 представлені результати наших розрахунків (колонка F) сил осциляторів електричних дипольних переходів разом з наявними експериментальними даними (колонки E1, E2).

Для порівняння в цій таблиці наведені також результати розрахунку в рамках популярного й добре відомого кулонівського наближення (колонки A, B, C відповідають калібруванню фотонного пропатора: Coulomb Babushkin, Feynmann) та багатоконфігураційного методу ДФ

(колонка D), F – RPT ТЗ з емпіричним МР «0» набл.; G – результати нашого обчислення [3, 117-120, 138, 288].

Аналіз отриманих даних дозволяє зробити висновок, що, по-перше, наша теорія знаходиться в достатньо хорошій узгодженості з експериментом, значно кращій у порівнянні з відомим багатоконфігураційним методом ДФ, а також зі спрощеним кулонівським наближенням.

Таблиця 3.12 - Переходи та відповідні довжини хвиль (в А) в спектрі Eu I (наші дані)

Номер	Перехід	Довжина хвилі (в А)
1	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2}$	4661,77
2	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{7/2}$	4627,15
3	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{9/2}$	4592,01
4	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2}$	2743,16
5	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{9/2}$	2738,48
6	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{7/2}$	2731,33
7	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{9/2}$	2471,09
8	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{7/2}$	2461,68
9	$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{5/2}$	2520,45

По-друге, як видно, в кулонівському наближенні дані розрахунку з використанням різних калібрувань фотонного пропатора досить сильно відрізняються один від одного, в той час як в нашій теорії різниця даних щодо сили осциляторів не перевищує 0,05% (для кулонівського калібрування та калібрування Бабушкіна).

По-третє, розрахунок продемонстрував вкрай значний в кількісному відношенні внесок (до 30%), обумовлений ефектами міжелектронної кореляції (поляризаційної та екрануючої взаємодій) як ефектами другого та вище порядків ТЗ. Нарешті, аналіз показує, що експериментальні дані для переходів  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{9/2}$  та  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{7/2}$ , очевидно, містять значну помилку, що в принципі пояснюється вкрай істотною складністю вивчення зазначеного спектру.

Таблиця 3.13 - Сили осциляторів ряду переходів в спектрі атома EuI: експеримент – E1, E2; A, B, C – кулонівське наближення (відповідає калібруванню фотонного пропатора: Coulomb Babushkin, Feynmann), D – багатоконфігураційний метод DF, F – RPT з емпіричним MP «0» набл., G – результати нашого обчислення RMBPT-ODF

Перехід	A	B	C	D	E1	E2	F	G
1	0,205	0,264	0,469	0,280	0,433	0,49	0,478	0,484
2	0,272	0,350	0,622	0,374	0,588	0,59	0,591	0,589
3	0,342	0,439	0,781	0,540	0,740	0,74	0,740	0,741
4	0,0228	0,0293	0,052		0,012		0,015	0,014
5	0,0381				0,0024		0,028	0,025
6	0,0303				0,0027		0,022	0,026
7	0,0157				0,0015		0,0017	0,0016
8	0,0098				0,0060		0,0063	0,0062
9	0,0075				0,0045		0,0049	0,0047

### 3.4 Теоретична релятивістська спектроскопія атома ітербію Yb

Слід зазначити, що довгий час ступінь вивчення спектрів більшості атомів лантаноїдів характеризувалася вкрай незадовільним станом. В якості огляду вкажемо на найбільш важливі роботи по спектроскопії ітербію [3, 51, 58, 80-86, 141, 248, 264, 265, 272, 286, 292, 293].

Теоретичні знання про лантаноїди були представлені Коуеном, а перший спектр ітербію був вивчений Кінгом (див. напр., [3]). Згідно із докладно проаналізованими джерелами, напр., [80-86, 141]. Меггерс та співр. за результатами дослідження атомних спектрів рідкоземельних елементів повідомили про довжини хвиль та відносні інтенсивності 1668 ліній, у тому числі, дали оцінку інтенсивності 1791 ліній Yb I.

Камю та співр. виміряли 73 лінії поглинання в ультрафіолетовій області та отримали стани з парної парністю  $J = 0$  та  $J = 2$ , що належали до серії  $4f146sns$  ( $n = 13-62$ )  $1S0$ ,  $4f146snd$  ( $n = 11-64$ )  $1D2$  та  $4f146snd$  ( $n = 11-21$ )  $3D2$ . Крім того, Вярт і Камю розширили аналіз та визначили кілька нових рівнів Yb I. Спектор визначив рівні енергії конфігурацій  $4f135d6s2$



та  $4f136s26p$ , Менсфілд і Бейг сфотографували спектр  $5p$ -підоболонки  $Yb I$ , Maeda et al. досліджували оптико-мікрохвильову спектроскопію подвійного резонансу високозбуджених рідбергівських станів ітербію (див. напр., [51, 58]). Автоіонізуючі стани атома ітербію досліджували в [80-86], зокрема, спектр внутрішньої оболонки і подвійне збудження ітербію з участю  $4f$  та  $6s$  підоболонки; отримані дані про автоіонізуючі резонанси з парної парністю та двокольорові трьохфотонні  $6snf 1;3F3$  та  $6snp 1P1, 3P1;2$  збудженні рідбергівські стани  $Yb I$  (див. напр., [80-86]).

Рідбергівські та автоіонізуючі стани нейтрального ітербію вивчали також Xu et al; Griesmann et al. представили інформацію щодо перетину фотоіонізації двічі збуджених резонансів в ітербії;

Бу та співр. виміряли деякі нові рівні енергії, що належать до серій  $4f146snp 3P0;2$ , та дослідили шістнадцять рівнів автоіонізації  $Yb$  (див. напр., [80-86]). Аймар та співр. представили теоретичний аналіз високозбуджених рівнів  $Yb$  і досліджували високо розташовані рівні  $Yb I$  з непарною парністю методом селективної триступеневої лазерної спектроскопії, Vaig і Connerade повідомили про міжканальну взаємодію між одноканальним збудженням від  $4f14$  і про подвійне порушення від  $6s2$  в  $Yb I$ , Eliav et al. розрахували енергії переходів ітербію з використанням релятивістського методу пов'язаних кластерів (див. напр., [51]).

Радіаційні часи життя ітербію вивчалися багатьма авторами, зокрема, Рамбоу і Шерер виміряли радіаційні часи життя деяких рівнів  $Yb I$  [3, 51, 58, 80-86]. Бауман та співр. визначили  $gJ$  фактори і часи життя збуджених станів  $6s6p 1Po 1$  та  $6s6p 3Po 1$  ітербію, а також вирахували часи життя і  $gJ$ -значення в  $D$ -станах конфігурації  $4f146s6d$ , радіаційні часи життя і  $gJ$ -фактори низько розташованих рівнів парності в спектрі  $Yb I$  та виміряли радіаційні часи життя в парній парності  $6snd 1D2$  ( $n=6-13$ ) та  $6sns 1S0$  ( $n=8-14$ ) ряду рівнів нейтрального  $Yb$ ; Guo et al. виміряли часи життя рідбергівських рівнів у збуджених  $6snp 3P2$  серіях  $Yb I$  та час життя  $21$  збудженого стану в атомі  $Yb$  було виміряне методом Bowers et al.

Радіаційні часи життя рівнів  $Yb I$  складені і проаналізовані Благоевим та Комаровським, Цзян і Ларссон вивчали збудження у рідбергівських послідовностях  $np 1;3P$  та проводили вимірювання часу життя  $Yb I$ , Мігдалек і Бейліс представили енергії і силу осцилятора для дозволеного по спіну переходу  $6s2 1S0;6s6p 1Po 1$  в нейтральному ітербії; Пізніше вони повідомили про багатоконфігураційні розрахунки методом

Дірак-Фока (MCDF) часів життя для низько розташованих рівнів нейтрального ітербію (див. напр., [3, 51, 58, 80-86]).

Список енергетичних рівнів для збуджених рівнів було складено та подано Сансонетті і Мартіном, інформацію можна знайти на веб-сайті NIST [180]. На рисунку 3.1 представлена якісна схема енергетичних рівнів Yb, побудована на основі блискучих експериментальних досліджень групи В.С. Летохова [84].

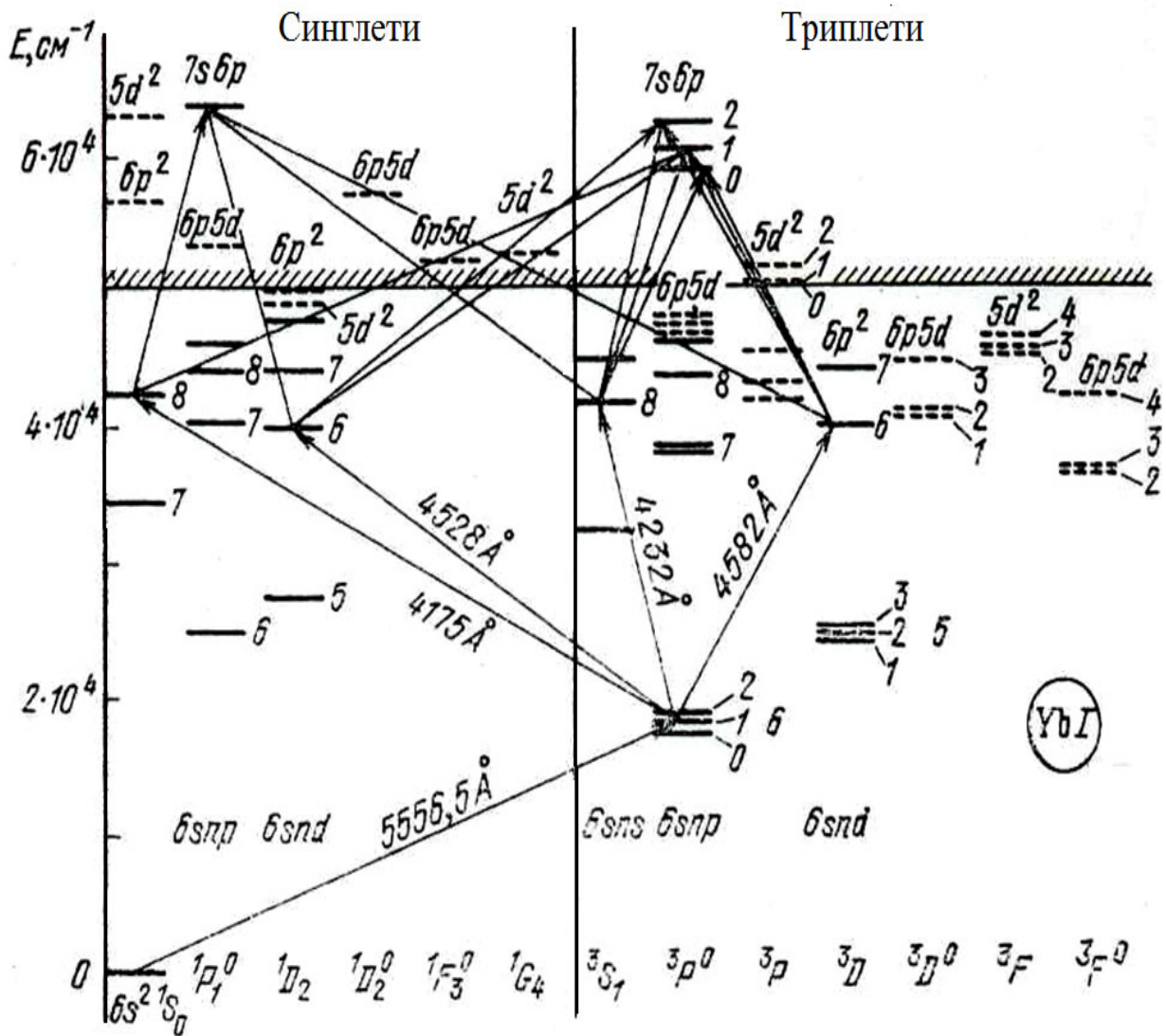


Рисунок 3.1 - Схема рівнів енергії Yb та переходи, які використані в експерименті Летохова та співр.

В атомі Yb основна електронна конфігурація  $4f^{14}6s^2$ ,  $Z=70$  (в даному випадку оболонки  $5s^2$  и  $5p^6$  мають більшу енергію зв'язку, ніж  $4f^{14}$ ). Енергія іонізації цього атома  $I = 50\,441\text{ см}^{-1}$ .

Далі на рисунку 3.2 приведена діаграма найбільш унікальних переходів в спектрах різних ізоотопів Yb, що збуджуються 408 нм лазером.

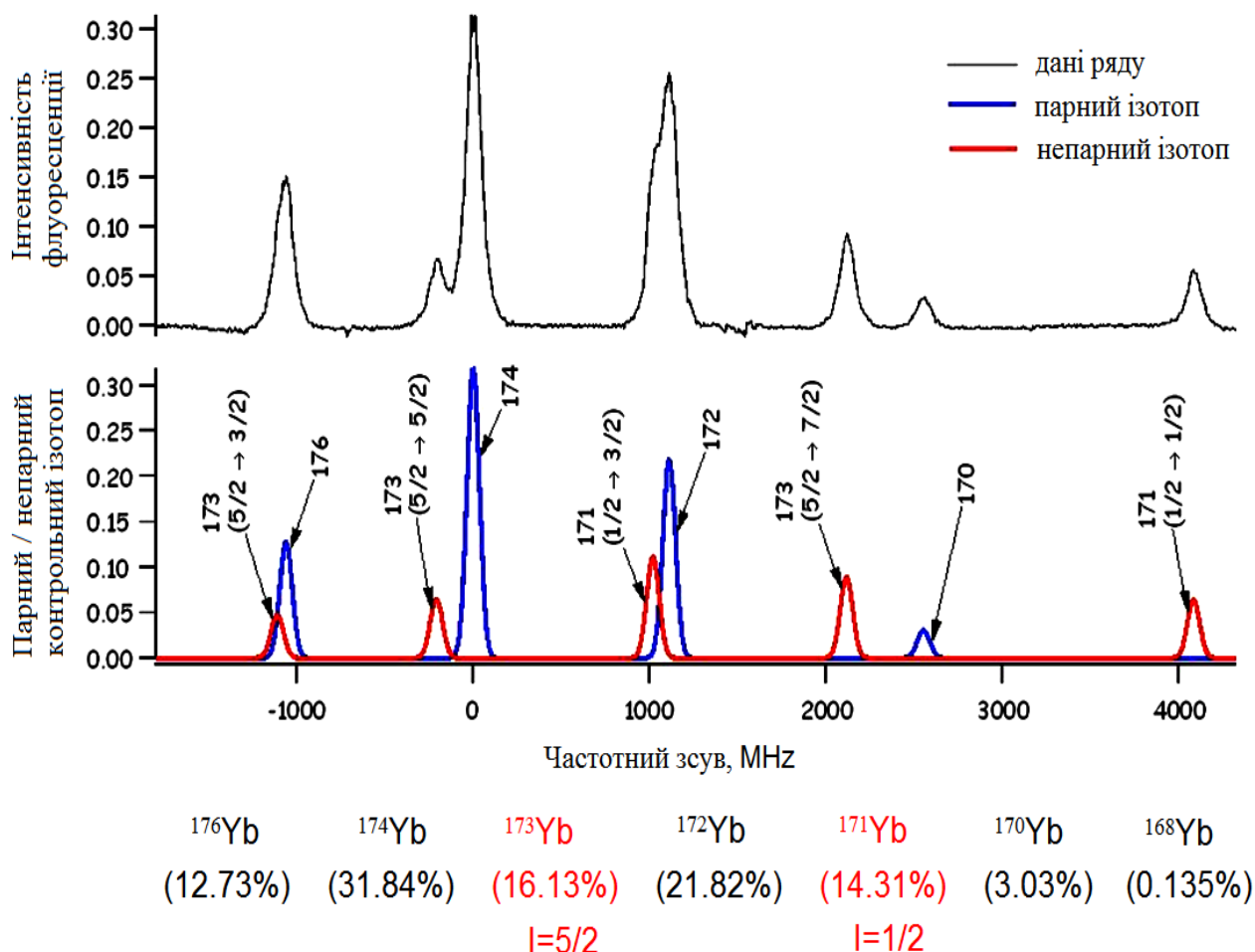


Рисунок 3.2 - Діаграма найбільш унікальних переходів в спектрах різних ізоотопів Yb, що збуджуються 408 нм лазером (за даними сайту лабораторії Berkeley <http://socrates.berkeley.edu>)

Оцінки енергії АС конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  в одночастинковому наближенні показують, що ці стани повинні розташовуватися в області  $0 \div 15\,000\text{ см}^{-1}$  над межею іонізації Yb. З рисунку 3.2 видно, що в такому випадку парні конфігурації  $6p^2$ ,  $5d^2$  можуть

збуджуватися в два ступені, а непарні  $6p5d$ ,  $7s6p$  – в три ступені.

В експерименті Летохова та співр. атоми Yb збуджувалися АС випромінюванням трьох лазерів на барвниках. Лазер першого ступеня ( $\lambda_1=5556,5 \text{ \AA}$ ) збуджував перехід  $6s^2 1S_0 \rightarrow 6s6p 1P_1^0$  (див. рис. 3.2). Другий лазер здійснював подальше збудження в один з обраних проміжних станів. Довжина хвилі третього лазера перебудовувалася в такому діапазоні, щоб забезпечити порушення АС в досліджуваній області  $0 \div 15000 \text{ см}^{-1}$  над межею іонізації [84].

У таблиці 3.14 представлені результати розрахунку сил осциляторів переходів з низько розташованих збуджених станів в основний стан для атома Yb I. Для порівняння наведені також результати розрахунку в кулонівському наближенні (колонка А), багатоконфігураційному наближенні ДФ (колонка D) та в рамках нашої ТЗ з модельним емпіричним нульовим наближенням (колонка F), нарешті, данні нашого розрахунку – колонка G (див. [3, 51, 58, 80-86, 248, 264, 265]).

Таблиця 3.14 - Сили осциляторів ряду переходів в спектрі атома Yb I: експеримент – E; A – кулонівське наближення (калібрування фотонного пропегатора), D – багатоконфігураційний метод ДФ (MCDF), F – результати розрахунку методом емпіричного модельного потенціалу, G – наші дані (RMBPT)

Перехід	$\lambda$ (A)	A	D	F	G	E
$4f^{14}6s^2 1S_0 - 4f^{14}6s6p 1P_1$	3987.9	1.82	1.65	1.48	1.16 <sup>a</sup> ; 1.18 <sup>b</sup>	1.2; 1.38; 1,12;
$4f^{14}6s^2 1S_0 - 4f^{14}6s7p 1P_1$	2464.5	1.19	0.59	0.38	0.25 <sup>a</sup> ; 0.28 <sup>b</sup>	0.22

Примітка. <sup>a</sup> – розрах. з оптиміз. базисом; <sup>b</sup> – теж з неоптимізов. базисом.

Висновки, які впливають з аналізу, в принципі, аналогічні вищенаведеним для атома Eu I. Кулонівське наближення, по суті, є досить грубим наближенням. Експериментальні дані також, мабуть, потребують уточнення.

В таблиці 3.15 приведені експериментальні і теоретичні дані для енергій (відлік яких ведеться від енергії основного стану:  $4f^{14}6s^2 1S_0$ ) деяких Yb I одноразово збуджених станів: MCHF-VP – дані, отримані на

основі багато конфігураційного методу Хартрі-Фока (MCHF) з урахуванням поправок Брейта-Паулі (BP) (A,B+D,D – різні набори конфігурацій, включених в розрахунок методом MCHF-BP [36]); RHF – дані Cowen, метод РХФ; RPT-MP (E1) – дані Ivanov-Letokhov та співр., метод – релятивістська ТЗ з МП нульового наближенням; RPT-DKS – дані Glushkov-Svinarenko релятивістська ТЗ з DKS нульовим наближенням; дані ДФ аналізу Wyart-Samus з емпіричною підгонкою; RMBPT-ODF дані нашої теорії (our data) (див. напр., [3, 51, 58, 80-86, 248, 264, 265]).

Таблиця 3.15 - Енергії ( $\text{см}^{-1}$ ) одноразово збуджених станів Yb I: MCHF-BP – багатоконфігураційний метод ХФ з урахуванням поправок Брейта-Паулі (BP), A,B+D,D – різні набори конфігурацій; RHF – метод РХФ; RPT (E1) – релятивістська ТЗ; PT-DKS – релятивістська ТЗ з «0» DKS набл.; DF – ДФ аналіз Wyart-Samus; наша теорія (QED-PT); дані експерименту (Exp)

Конфігурація	J	MCH+ BP(A)	MCHF+ BP(C)	MCHF+ BP(BD)	HFR	RPT- MP	PT- DKS	DF	Our data	Exp.
$6s_{1/2} 2^*$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$6s_{1/2} 6p_{1/2}$	0	18087	17262	18730	17320	17400	17310	17312	17305	17288
$6s_{1/2} 6p_{1/2}$	1	18174	17568	18813	17954	18100	18008	17962	18006	17992
$6s_{1/2} 6p_{3/2}$	1	24614	26667	24857	25069	25100	25094	25075	25078	25068
$6s_{1/2} 6p_{3/2}$	2	18357	18249	18999	19710	19800	19715	19716	19720	19710
$6s_{1/2} 5d_{3/2}$	1	24094	28871	23740	24489	23900	24410	24489	24527	24489
$6s_{1/2} 5d_{3/2}$	2	24505	28973	24172	24484	24600	24824	24751	24781	24752
$6s_{1/2} 5d_{5/2}$	2	26984	29633	26841	27677	26100	26970	27654	27792	27678
$6s_{1/2} 5d_{5/2}$	3	25460	29374	25100	24871	24900	25098	24870	24901	24871

Аналіз даних таблиці 3.15 показує, що, внесок як релятивістських, так й особливо обмінно-кореляційних ефектів для досліджуваного атома є вкрай істотним. Але його величина природно змінюється при переході від одного методу до іншого.

Ключовими для адекватної точності опису спектроскопічних характеристик ітербію є авжеж прецизійне врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, використання оптимізованих базисів орбіталей. Саме останній фактор пояснює дуже істотну різницю в даних, отриманих різними методами.

У таблиці 3.16 наведені експериментальні та теоретичні дані Летохова та співр. [84] для енергії і ширини збуджених (автоіонізаційних) станів  $7s6p$  конфігурації в спектрі Yb I (які відбуваються з основного стану:  $4f^{14}6s^2 \ ^1S_0$  Yb): E1, Г1 – дані Іванова та співр. (RPT-MP); E2, Г2 – наша теорія (RPT- DKS); E3 – дані Karasoban-Özdemir (MCHF-VP) класифікація в [81] відрізняється від нашої класифікації), E4, Г4 – наші дані (RMBPT-ODF). Похибка методу ХФ досягає понад  $100 \text{ см}^{-1}$ . (див. напр., [3, 51, 58, 80-86, 248, 264, 265]).

Таблиця 3.16 - Енергії E ( $\text{см}^{-1}$ ) і ширини  $\Gamma$  ( $\text{см}^{-1}$ ) автоіонізаційних резонансів конфігурації YbI  $7s6p$  (див. текст)

Терм	Теорія E3	Теорія E1	Теорія Г1	Теорія E2	Теорія Г2	Теорія E4	Теорія Г4	Ехр. E <sub>ехр</sub>	Ехр. Г <sub>ехр</sub>
$^3P_0^0$	61233	59800	0.7	59450	1.15	59270	1.12	59130.5	1.1
$^3P_1^0$	62085	60000	3.0	60315	1.10	60398	0.98	60428.7	0.95
$^3P_2^0$	62423	62600	0.7	62547	1.51	62505	1.58	62489.1	1.6
$^1P_1^0$	64216	63600	1.8	63613	2.48	63638	2.55	63655.8	2.6

Аналіз таблиці 3.16 показує, що взагалі значення енергій резонансних станів в цілому прийнятно узгоджуються один з одним, однак, значення відповідних ширин енергетичних станів Г1, Г2, Г4, Г<sub>ехр</sub> істотно відрізняються. До ключових факторів, що пояснюють таку ситуацію, безсумнівно, слід віднести ступінь точності оцінки радіальних інтегралів у різних підходах, якість використаних неоптимізованих та оптимізованих базисів та у т. ч. деякі аспекти, пов'язані із використаними наближеннями у чисельних схемах.

У нашому розрахунку використано оптимізований базис релятивістських орбіталей (релятивістських хвильових функцій) станів методу комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням. Тобто, фактично мова йде про використання оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів, яке отримане на основі принципу мінімізації калібрувальних-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT. Також у використаному методі більш точно виконане врахування принципово важливих багаточасткових обмінно-кореляційних ефектів (у т.ч. поляризаційної міжквазічастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незоромому набору конфігурацій, суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та обліку станів континууму).

В таблиці 3.17 наведені дані енергій (відлік від енергії основного стану  $Yb\ 4f^{14}\ Yb\ I$ ) збуджених АС  $Yb\ I$  з двічі збудженою валентною оболонкою: E1 – RPT з модельним потенціалом нульового наближення RPT-MP, E2 – дані Glushkov-Svinarenko (PT-DKS) з використанням наближення функціоналу густини DKS й дані нашої теорії (E4) (див. напр., [3, 15, 51, 58, 80-86, 248, 264, 265]).

Таблиця 3.17 - Енергії ( $10^2\ \text{см}^{-1}$ ) АС  $Yb\ I$  з двічі збудженою валентною оболонкою

Конфігурація	J	Теор. E1	Теор. E2	Теор. E4	Exp: $E_{\text{exp}}$
$6p_{1/2}^2$	0	-1067	-1064	-1062	-1062,7
$6p_{3/2}^2$	2	- 987	-1004	-1009	-1008.9
$6p_{1/2}6p_{3/2}$	1	-1054	-1050	-1048	-1049
$6p_{1/2}6p_{3/2}$	2	-1032	-1036	-1037	-1039.5
$5d_{3/2}^2$	2	-1034	-1032	-1024	-1010.76
$5d_{3/2}5d_{5/2}$	2	- 994	- 995	- 994	-994.63
$5d_{3/2}5d_{5/2}$	3	-1030	-1032	-1031	-1032.47

В таблиці 3.18 аналогічні дані наведені для ширин інших автоіонізаційних резонансів.

Таблиця 3.18 - Ширини (см<sup>-1</sup>) АС Yb I з двічі збудженою валентною оболонкою

Конф.	J	Терм	Г1	Г4	Конф.	J	Терм	Г1	Г2	Г4
6p <sup>2</sup> <sub>3/2</sub>	0	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	5.4	5.682	6p <sub>3/2</sub> 5d <sub>3/2</sub>	2	<sup>1</sup> D <sub>2</sub> <sup>0</sup>	0.20	0.52	0.48
6p <sub>3/2</sub> 5d <sub>5/2</sub>	1	<sup>1</sup> P <sub>1</sub> <sup>0</sup>	5.7	5.945	5d <sup>2</sup> <sub>5/2</sub>	0	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	3.30	3.63	3.61
6p <sub>3/2</sub> 5d <sub>5/2</sub>	3	<sup>1</sup> F <sub>3</sub> <sup>0</sup>	1.60	1.978	5d <sup>2</sup> <sub>5/2</sub>	2	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	0.40	0.73	0.71
5d <sup>2</sup> <sub>3/2</sub>	0	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	0.01	0.051	5d <sup>2</sup> <sub>5/2</sub>	4	<sup>1</sup> G <sub>4</sub>	0.90	1.74	1.72
5d <sub>3/2</sub> 5d <sub>5/2</sub>	1	<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	-	0.0007						

У таблицях 3.19, 3.20 наведені результати розрахунку в рамках нашої теорії енергій і ширин автоіонізаційних резонансів 4f<sup>13</sup>[<sup>2</sup>F<sub>7/2</sub>]<sub>2</sub>6s<sup>2</sup>np[5 / 2]<sub>2</sub>, 4f<sup>14</sup>[<sup>2</sup>F<sub>7/2</sub>]<sub>2</sub>6s<sup>2</sup>nf[5 / 2]<sub>2</sub>, що виникають в результаті збудження електронів 4f-оболонки.

Таблиця 3.19 - Енергії та ширини (см<sup>-1</sup>) автоіонізаційних резонансів 4f<sup>13</sup>[<sup>2</sup>F<sub>7/2</sub>]<sub>2</sub>6s<sup>2</sup>np[5 / 2]<sub>2</sub>, що виникають в результаті збудження електронів 4f-оболонки

N	E <sub>exp</sub>	Г <sub>exp</sub>	E RMBPT- DKS	Г RMBPT- DKS	E Наші дані	Г Наші дані
12	70120.5	1.5	70121	1.7	70121	1.6
13	70482.0	0.4	70483	0.5	70483	0.4
15	70914.8	1.2	70916	1.4	70915	1.3
20	71428.1	0.6	71429	0.7	71429	0.6
25	71612.5	1.3	71611	1.5	71613	1.4
26	71633.3	0.6	71631	0.8	71633	0.7
30	71698.8	0.5	71697	0.7	71698	0.6
31	71710.3	0.4	71712	0.5	71711	0.4
33	71731.9	0.6	71733	0.6	71732	0.5
34	-	-	-	-	71741	0.3
35	-	-	-	-	71748	0.5
46	-	-	-	-	71797	0.4
48	-	-	-	-	71805	0.3



Аналіз стосовно даних по ширинам резонансів є аналогічним аналізу, наведеному вище. Зокрема, неважко помітити, що результати нашої теорії, а також теорії Ivanov et al., Glushkov-Svinarenko по енергіях знаходяться в прийнятній узгодженості з експериментальними даними (тут важливий коректний вид релятивістського гамільтоніана), однак по ширинам резонансів між теоріями спостерігається досить велика розбіжність, причина якої пов'язана з використанням різних базисів орбіталей, різним ступенем обліку обмінно-кореляційних ефектів.

Найбільш цікавий аспект пов'язаний із поведінкою резонансу  $5d_{3/2}5d_{5/2}^3P_1$ , який має аномально малу ширину. Одним з найбільш прийнятних пояснень є той факт, що його розпад заборонений в нерелятивістському наближенні. Аналогічна картина має місце й для ширин рідбергівських резонансів, причина якої в літературі не пояснювалася.

Таблиця 3.20 - Енергії та ширини ( $\text{см}^{-1}$ ) автоіонізаційних резонансів  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ , що виникають в результаті збудження електронів  $4f$ -оболонки

N	$E_{\text{exp}}$	$\Gamma_{\text{exp}}$	E RMBPT-DKS	$\Gamma$ RMBPT-DKS	E Наші дані	$\Gamma$ Наші дані
12	70963.6	0.5	70965	0.7	70964	0.6
13	71105.0	0.4	71107	0.5	71105	0.4
15	71312.2	1.4	71313	1.6	71313	1.4
20	71559.1	0.8	71561	0.9	71560	0.8
25	71672.5	0.5	71675	0.8	71673	0.6
26	71687.5	0.5	71692	0.7	71688	0.6
30	71732.4	0.4	71736	0.5	71733	0.5
31	71741.2	0.5	71745	0.6	71741	0.5
33	-	-	71760	0.4	71756	0.4
34	-	-	71765	0.8	71763	0.7
35	-	-	-	-	71770	0.4
46	-	-	-	-	71813	0.3
48	-	-	-	-	71839	0.2

Варто нагадати, що звичайно в спектроскопії автоіонізаційних резонансів мають місце величинами ширин порядку 10 та 100 см<sup>-1</sup>) (наприклад, для атому гелію та інших інертних газів, лужних і лужноземельних атомів тощо).

Також можна додати, що дані про резонансам свідчать про досить складну енергетику важких атомів, обмовлену наявністю важкого остову й появою аномально вузьких резонансів.

Цей факт, до речі, рекомендований нами як дуже важливий та позитивний у сенсі пошуку ефективних підходів до побудови оптимальних лазерно-фотоіонізаційних систем поділення важких ізотопів. Й спектроскопія ітербію в цьому сенсі демонструє яскравий приклад важких атомних систем з дуже незвичайною фізикою резонансів у спектрі.

### 3.5 Теоретична релятивістська спектроскопія атома тулія Tm

В цьому підрозділі ми розглянемо ще один атом сімейства лантаноїдів – рідкоземельний елемент тулій (Tm, Z = 69). На наш погляд, цей атом, на відміну від атомів, які були розглянуті вище, не отримав адекватної уваги з боку експериментаторів, хоча причина цієї обставини пов'язані із відомою складністю шуканого спектра.

Дійсно, як було показано ще в роботах Ivanov et al., Glushkov-Svinarenko [3, 86, 87], наявність двох границь меж іонізації із станами вакансії в 4f<sup>14</sup> остові, а саме 4f<sup>1</sup><sub>7/2</sub> / 2 4f<sup>1</sup><sub>5/2</sub> обумовлює й два основних фундаментальних виду розпаду автоіонізаційних резонансів:

А. Загальновідомий канал розпаду Beutler-Fano (decay BFD)

$$4f^{1}_{5/2} 6s1/2 (J12) nl - 4f^{1}_{7/2} 6s1/2 [J12'] Tm^{+} + leje, \\ n > 7 \quad J12=2;3 \quad J12'=3;4. \quad (3.1)$$

Б. Канал розпаду реорієнтаційного (reorientation kind decay) типу Ivanov-Letokhov et al. (ROD):

$$4f^{1j} 6s1/2 (J12) nl - 4f^{1j} 6s1/2 [J12'] Tm^{+} + leje), \\ n > 25 \quad J12=3, \quad J12'=2;4 \quad j=5/2;7/2. \quad (3.2)$$

На противагу BFD каналу розпаду, розпад по каналу ROD є

достатньо складним низькоенергетичним процесом, який може мати як монопольний так й квадрупольний характер й, що важливо, зберігає одноелектронні квантові числа остова:  $4f_{7/2}^{-1} 6s_{1/2}$  атомних системи.

Говорячи про монопольність або квадрупольність, на увазі мається мультипольність міжквaziчастинкової релятивістської взаємодії, яка відповідальна за розпад автоіонізаційних станів. Докладне викладення фізичних механізмів утворення та функціонування розглядаємих каналів розпаду вперше виконане групою Ivanov-Ivanova et al. [13-19].

Комбінований метод калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень (RMBPT) та релятивістський енергетичний підхід з використанням моделі оптимізованого ODF застосований для розрахунків енергій та ширин автоіонізаційних станів атома тулію  $4f_{7/2}^{-1} 6s_{1/2} (3)ns_{1/2}[J]$  Tm з квантовим числом  $n=25-50$ .

В таблиці 3.21 наведені розраховані значення ширин  $\Gamma_3$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) та енергій E3 ( $10 \text{ см}^{-1}$ ) для станів  $4f_{7/2}^{-1} 6s_{1/2} (3)ns_{1/2}[J]$  атома Tm, для яких ROD-розпад – єдиний канал автоіонізаційного розпаду.

Для порівняння наведені розрахункові дані, методом релятивістської T3 з модельним потенціалом нульового наближення RPT-MP Ivanov et al. (E1,  $\Gamma_1$ ), а також RPT-DKS Glushkov-Svinarenko (E,  $\Gamma_2$ ) [3, 15, 86, 87, 92, 228, 274, 275].

Таблиця 3.21 - Ширини та енергії AC  $4f_{7/2}^{-1} 6s_{1/2} (3)ns_{1/2}[J]$  атома Tm

	J=5 / 2			J=5 / 2			J=7 / 2	J=7 / 2
N	$\Gamma_1$	$\Gamma_2$	$\Gamma_3$	E1	E3	E2	$\Gamma_3$	E3
25	1.18(-5)	1.25(-5)	1.21(-5)	4985	4980	4981	1.54(-2)	4984
26	-	1.07(-5)	1.01(-5)	-	4974	4975	1.31(-2)	4986
30	5.77(-6)	6.05(-6)	5.95(-6)	4995	4993	4994	3.94(-3)	4993
33	-	-	-3.63(-6)	-	4995	-	1.58(-2)	4996
35	-	-	3.07(-6)	-	4997	-	3.18(-3)	4998

Далі представляє інтерес навести приклад спектроскопічних

характеристик автоіонізаційних станів в спектрі тулію, для яких канал їх розпаду ROD або BFD є єдиний каналом (табл. 3.22, 3.23).

Таблиця 3.22 - Ширини ( $\text{cm}^{-1}$ ) та енергії ( $10^2 \text{ cm}^{-1}$ ) станів  $4f_{5/2}^{13} 6s_{1/2} (2)ns_{1/2} [J]$  Тm (наші дані)

	J=3 / 2	J=3 / 2	J=3 / 2	J=3 / 2	J=5 / 2	J=5 / 2
N	Г1	Г2	Е1	Е2	Г2	Е2
25	2.64(-5)	2.61(-5)	5836	5833	5.28(-5)	5835
30	1.27(-5)	1.24(-5)	5845	5841	2.74(-5)	5843
35	8.89(-6)	8.86(-6)	5850	5847	1.51(-5)	5849

Таблиця 3.23 - Ширини та енергії станів  $4f_{7/2}^{13} 6s_{1/2} (3)np_j [J]$  атома Тm (наші данні)

(j,J)	(3 / 2,3 / 2)	(1 / 2,5 / 2)	(3 / 2,5 / 2)
N	Г2 Е2	Г2 Е2	Г2 Е2
25	4.64(-5) 49860	1.36(-1) 49854	1.88(-1) 49863
26	4.18(-5) 49875	1.28(-1) 49870	1.71(-1) 48977
30	2.38(-5) 49937	0.99(-1) 49933	1.04(-1) 49938
33	1.76(-5) 49969	7.51(-2) 49965	8.16(-2) 49968
35	1.35(-5) 49990	5.68(-2) 49988	6.55(02) 49991
(j,J)	(1 / 2,7 / 2)	(3 / 2,7 / 2)	(3 / 2,9 / 2)
N	Г2 Е2	Г2 Е2	Г2 Е2
25	3.68(-2) 49845	3.42(-1) 49865	3.94(-1) 49866
26	3.41(-2) 49860	3.20(-1) 49882	3.671(-1) 49881
30	2.33(-2) 49936	2.34(-1) 49950	2.58(-1) 49952
33	2.09(-2) 49959	2.01(-1) 49975	2.22(-1) 49975
35	1.72(-2) 49981	1.52(-1) 49990	1.67(-1) 49991

Відповідні значення для ширин та енергій станів  $4f_{5/2}^{13} 6s_{1/2} (2)ns_{1/2} [J]$  атома Тm (BFD є єдиним каналом розпаду) наведені в таблиці 3.22. У випадку, коли ROD є єдиний каналом розпаду, результати для значень для енергій і ширин автоіонізаційних станів  $4f_{7/2}^{13} 6s_{1/2} (3)np_j [J]$  представлені в таблиці 3.23. Для порівняння надані також відповідні дані, отримані на

основі методу RPT з DKS нульовим наближенням [15, 265, 274, 275]. Аналіз наведених даних показує, що у випадку одного каналу розпаду, ширини у випадку ROD розпаду мають більші значення, чим у випадку BFD. Але для різних станів тобто різних значень квантових чисел)) ситуація може суттєво ускладнюватися. Більш того, стає неможливим попередньо передбачити який з каналів стає домінуючим. Про свідчать й дані таблиці 3.24 для ширин та енергій (в  $\text{cm}^{-1}$ ) станів  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ , для яких розпад може проходити через обидва канали: ROD і BFD.

Таблиця 3.24 - Ширини ( $\text{cm}^{-1}$ ) станів  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$  Тm (наші дані)

	$\Gamma_2 J=5 / 2$		$\Gamma_2 J=7 / 2$	
n	$\Gamma$ ( ROD)	$\Gamma$ ( BFD)	$\Gamma$ ( ROD)	$\Gamma$ ( BFD)
25	1.34(-2)	2.81(-5)	1.32(-5)	5.36(-5)
30	3.28(-3)	1.48(-5)	6.77(-6)	2.74(-5)
35	0.98(-3)	8.64(-6)	3.48(-6)	1.52(-5)

У табл.3.25-3.26 наведені наші дані по ширинам АС  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$ , для яких єдиним каналом розпаду є канал Бейтлера-Фано BFD.

Таблиця 3.25 - Ширини автоіонізаційних станів  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (наші дані)

(j,J)	(3 / 2, 1 / 2)	(3 / 2, 1 / 2)	(1 / 2, 3 / 2)	(1 / 2, 3 / 2)	(3 / 2, 3 / 2)	(3 / 2, 3 / 2)
n	$\Gamma$	$E$	$\Gamma$	$E$	$\Gamma$	$E$
10	4.47E-3	55 870	3.75E-3	55 690	9.14E-3	55 849
15	1.56E-3	57 789	1.40E-3	57 764	1.53E-3	57 788
20	5.76E-4	58 231	5.09E-4	58 221	5.07E-4	58 230
25	2.64E-4	58 401	2.25E-4	58 395	2.27E-4	58 399
30	1.38E-4	58 484	1.16E-4	58 481	1.20E-4	58 483
35	8.35E-5	58 531	6.77E-5	58 530	7.13E-5	58 530
40	5.31E-5	58 560	4.25E-5	58 559	4.54E-5	58 558
45	3.57E-5	58 579	2.82E-5	58 578	3.06E-5	58 579
50	2.50E-5	58 591	2.02E-5	58 592	2.10E-5	58 593

Нарешті, в таблиці 3.27 наведені дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f^{13}6s_{nRS}$  та  $4f^{13}6s_{nRp}$ . Для порівняння ми також наводимо єдині представлені у літературі дані Ivanov-Vidolova-Angelova et al. [86-87].

Таблиця 3.26 - Дані по ширинам автоіонізаційних станів  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (наші дані)

(j,J) n	(1 / 2, 5 / 2) Г	(1 / 2, 5 / 2) E	(3 / 2, 5 / 2) Г	(3 / 2, 5 / 2) E	(3 / 2,7 / 2)Г	(3 / 2,7 / 2)E
10	2.83E-3	55 186	6.73E-3	55 752	4.13E-3	55 678
15	1.17E-3	57 718	1.14E-3	57 803	7.77E-4	57 790
20	4.15E-4	58 204	4.00E-4	58 242	3.13E-4	58 231
25	1.82E-4	58 385	1.76E-4	58 413	1.52E-4	58 402
30	9.51E-5	58 473	9.27E-5	58 491	8.44E-5	58 484
35	5.51E-5	58 523	5.38E-5	58 538	5.09E-5	58 531
40	3.47E-5	58 554	3.38E-5	58 568	3.28E-5	58 560
45	2.31E-5	58 575	2.26E-5	58 585	2.22E-5	58 581
50	1.61E-5	58 592	1.57E-5	58 598	1.56E-5	58 593

Як показує аналіз даних, значення радіаційних ширин, отримані на основі нашого підходу, систематично менше, ніж значення, які отримані на основі ТЗ з модельним емпіричним нульовим наближенням Vidolova-Angelova et al. [86-87].

Справа у тому, що альтернативному методі обчислення використовувались емпіричні дані, що веде до переоцінки відповідних обмінно-кореляційних внесків. В цілому між двома підходами спостерігається фізично розумне узгодження, але розвинутий нами підхід є виключно неемпіричним.

Варто також підкреслити, що вивчення спектру  $T_m$ , як і інших важких атомів, зокрема, атомів лантанідів, актинідів, урану (див нижче), трансуранових елементів тощо, становить значний інтерес, по-перше, з точки зору дослідження дуже складної динаміки та квантової кінетики розпаду збуджених, особливо високо розташованих рідбергівських станів важких систем.

Таблиця 3.27 - Дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1}6s_{1/2}(J')n_R l_R j_R [J]$  (стани у таблиці зазначені у вигляді  $(j, J', j_R, J)$ ): Th1 – ТЗ з модельним «0» наближенням [86, 87]; Th2 – даний підхід

$n_R$	Th1 (5 / 2,2,1 / 2,3 / 2)	Th2 (5 / 2,2,1 / 2,3 / 2)	Th2 (5 / 2,2,3 / 2,3 / 2)	Th2 (5 / 2,3,3 / 2,3 / 2)
10	$0.72 \times 10^7$	$0.68 \times 10^7$	$0.11 \times 10^8$	$0.12 \times 10^8$
13	$0.22 \times 10^7$	$0.19 \times 10^7$	$0.35 \times 10^7$	$0.42 \times 10^7$
15	$0.12 \times 10^7$	$0.10 \times 10^7$	$0.18 \times 10^7$	$0.23 \times 10^7$
20	$0.44 \times 10^6$	$0.41 \times 10^6$	$0.68 \times 10^6$	$0.82 \times 10^6$
25	$0.22 \times 10^6$	$0.19 \times 10^6$	$0.31 \times 10^6$	$0.36 \times 10^6$
30	$0.13 \times 10^6$	$0.11 \times 10^6$	$0.16 \times 10^6$	$0.18 \times 10^6$
35	$0.88 \times 10^5$	$0.85 \times 10^5$	$0.11 \times 10^6$	$0.11 \times 10^6$
40	$0.61 \times 10^5$	$0.58 \times 10^5$	$0.73 \times 10^5$	$0.77 \times 10^5$
45	$0.45 \times 10^5$	$0.41 \times 10^5$	$0.51 \times 10^5$	$0.54 \times 10^5$
50	$0.33 \times 10^5$	$0.31 \times 10^5$	$0.37 \times 10^5$	$0.38 \times 10^5$

З іншого боку, це принципово важливо й з точки зору виявлення унікальних особливостей теоретичної спектроскопії автоіонізаційних резонансів особливо реорієнтаційного типу, а також зрозуміло, подальшого розвитку сучасної квантової електроніки та лазерної спектроскопії, побудови нових ефективних методів та технологій поділення ізотопів методом лазерної селективної атомної фотоіонізації [3-5, 16-20, 267, 274-276]. Відзначені вище унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії ітербія та тулія, особливо такі, що стосуються характеристик аномально вузьких резонансів свідчать про досить складну енергетику важких атомів. Цей факт, як вказувалося, має принципове значення особливо у сенсі пошуку нових підходів до побудови оптимальних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів. Особливе значення це має для ізотопів урану та трансуранових елементів.

### 3.6 Теоретична спектроскопія атома урану U

В даному підрозділі ми наведемо теоретичні дані по спектроскопії урану, отримані на основі методу PMBPT-ODF. У табл. 3.28 надані чисельні значення орбітальних енергій (ат. од.) у важкому атомі урану (ізотоп  $^{92}\text{U}$ ), розраховані на основі різних теоретичних методів атомної спектроскопії: RHF – стандартного релятивістського методу Хартрі-Фока; DF – релятивістського методу Дірака-Фока; DFS\* – методу Дірака-Кона-Шема з кон-шемовським урахуванням обміну; DFS\*\* – методу Дірака-Кона-Шема з урахуванням обмінно-кореляційних поправок і релятивістським кореляційним потенціалом; ODF – оптимізованого DF методу (наші дані) [5, 162, 163, 254, 266, 267].

Таблиця 3.28 - Орбітальні енергії (ат.од.) в  $^{92}\text{U}$ : RHF – стандартний релятивістський метод Хартрі-Фока; DF – релятивістський метод Дірака-Фока; DFS\* – метод Дірака-Кона-Шема з кон-шемовським урахуванням обміну; DFS\*\* – метод Дірака-Кона-Шема з урахуванням обмінно-кореляційних поправок і релятивістським кореляційним потенціалом; ODF – оптимізований DF метод (наші дані) [5, 162, 163, 254, 266, 267]

Стан	RHF	DF	DKS*	DKS**	ODF	Exp.
1s <sub>1/2</sub>	4281.380	4279.233	4249.656	4223.351	4248.491	4248.660
2s <sub>1/2</sub>	794.895	806.152	794.415	789.455	799.513	799.722
2p <sub>1/2</sub>	768.855	776.373	766.036	761.336	769.842	769.955
2p <sub>3/2</sub>	627.660	635.570	625.444	622.817	630.994	631.039
3s <sub>1/2</sub>	199.740	206.610	200.498	199.413	203.982	204.001
3p <sub>1/2</sub>	186.895	193.099	187.610	186.646	190.497	190.513
3p <sub>3/2</sub>	154.250	160.323	155.221	154.686	158.192	158.283
3d <sub>3/2</sub>	135.025	139.018	134.814	135.524	137.063	137.115
3d <sub>5/2</sub>	128.975	132.418	128.242	128.000	130.609	130.647
4s <sub>1/2</sub>	50.510	54.324	51.045	50.782	52.997	53.104
4p <sub>1/2</sub>	49.700	48.194	45.249	45.030	46.879	46.893
4p <sub>3/2</sub>	36.355	39.541	36.795	36.683	38.490	38.514
4d <sub>3/2</sub>	27.225	29.733	27.563	27.524	28.767	28.776



Таблиця 3.28 – Продовження

Стан	RHF	DF	DKS*	DKS**	ODF	Exp.
4d5 / 2	25.700	28.131	26.100	25.981	27.204	27.232
4f5 / 2	13.845	15.204	13.866	13.885	14.495	14.516
4f7 / 2	13.445	14.792	13.461	13.481	14.073	14.112
5s1 / 2	11.310	12.596	11.358	11.301	11.999	12.017
5p1 / 2	9.055	10.128	9.106	9.064	9.649	9.665
5p3 / 2	7.515	8.092	7.096	7.077	7.264	7.277
5d3 / 2	3.790	4.351	3.808	3.807	3.961	3.969
5d5 / 2	3.500	4.042	3.511	3.512	3.629	3.638
5f <sub>5/2</sub>	0.137	0.347	0.163	0.168	0.295	-
5f <sub>7/2</sub>	-	0.319	0.133	0.138	0.261	-
6s <sub>1/2</sub>	1.799	2.137	1.780	1.770	1.741	1.720
6p <sub>1/2</sub>	1.143	1.343	1.132	1.126	1.674	1.691
6p <sub>3/2</sub>	0.813	0.985	0.805	0.804	1.295	1.323
6d <sub>3/2</sub>	0.113	0.192	0.140	0.141	0.247	0.253
6d <sub>5/2</sub>	-	0.183	0.123	0.124	0.240	-
7s <sub>1/2</sub>	0.189	0.202	0.204	0.203	0.224	0.225±0.002

До ключових факторів, що пояснюють різницю між приведеними даними слід віднести якість використаних неоптимізованих та оптимізованих базисів та у тому числі і деякі аспекти, пов'язані із використаними наближеннями у чисельних схемах. У нашому розрахунку використано оптимізований базис релятивістських орбіталей (релятивістських хвильових функцій) станів методу комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням. Тобто, фактично мова йде про використання оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів, яке отримане на основі принципу мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT. В таблиці 3.29 представлені спостерігаємі і розраховані енергії (в  $\text{cm}^{-1}$ ) рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня 32899.790

см<sup>-1</sup>; послідовність збудження: 6056.81 + 6098.10 + (5880-5890) Å. У табл. 3.30 надані спостерігаємі і розраховані енергії (в см<sup>-1</sup>) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану 5f37s2nf, відраховані від рівня 32899.790 см<sup>-1</sup>; послідовність збудження: 6056.81 + 6098.10 + (5998-6137) Å.

Таблиця 3.29 - Спостерігаємі і розраховані енергії (в см<sup>-1</sup>) рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня 32899.790 см<sup>-1</sup>; послідовність збудження: 6056.81 + 6098.10 + (5880-5890) Å

$E_{exp}$ [163]	$E_{theor}$ [163]	$E_{theor}$ (our)	$n_{exp}^*$	$n_{calc.}$
$5f^3 7s^2 np$				
49878.5	49877.9	49878.3	37.13	42
49882.5	49882.1	49882.2	38.10	43
49886.6	49885.9	49886.2	39.18	44
49890.2	49889.5	49889.8	40.20	45
49893.6	49892.8	49893.1	41.25	46
49896.6	49895.8	49896.1	42.24	47
49899.4	49898.8	49899.1	43.24	48
49902.0	49901.4	49901.8	44.23	49
49904.5	49903.9	49904.2	45.25	50
49906.8	49906.2	49906.7	46.25	51
49908.9	49908.4	49908.8	47.23	52
$5f^3 7s^2 nf$				
49881.5	49881.3	49881.4	37.85	40
49885.9	49885.2	49885.7	38.99	41
49889.6	49888.8	49889.3	40.03	42
49893.0	49892.2	49892.8	41.06	43
49896.1	49895.2	49895.9	42.07	44

Таблиця 3.30 - Спостерігаємі і розраховані енергії (в  $\text{cm}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790 \text{ cm}^{-1}$ ; послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137) \text{ \AA}$

$E_{exp}$ [163]	$E_{theor}$ [163]	$E_{theor}$ (our data)	$n_{exp}^*$	$n_{calc.}$	$\tau$ , нс
49193.9	49170	49192.8	11.98	14	140
49295.6	49288	49293.4	12.87	15	160
49392.1	49381	49390.9	13.92	16	100
49461.6	49546	49460.5	14.87	17	320
49522.6	49518	49521.7	15.87	18	280
49572.5	49570	49571.9	16.87	19	320

В таблиці 3.31 представлені спостерігаємі і розраховані енергії (в  $\text{cm}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32857.449 \text{ cm}^{-1}$  ( $5f36d7s8s \ ^7L_5^0$ ); послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914) \text{ \AA}$ .

Таблиця 3.31 - Спостерігаємі і розраховані енергії (в  $\text{cm}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32857.449 \text{ cm}^{-1}$  ( $5f36d7s8s \ ^7L_5^0$ ); послідовність збудження:  $6056.81+6113.89+(5862-5914) \text{ \AA}$

$E_{exp}$ [163]	$E_{theor}$ [163]	$E_{theor}$ (our data)	$n_{exp}^*$	$n_{calc.}$	$\tau$ , нс
49765.3	49767	49765.0	15.10	20	910
49830.7	49824	49829.1	16.23	21	810
49877.8	49871	49876.5	17.24	22	825
49917.0	49911	49916.2	18.23	23	670

Таблиця 3.32 - Спостерігаємі і розраховані енергії (в  $\text{cm}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f^37s^2np$ , відраховані від рівня  $33083.3 \text{ cm}^{-1}$ ; послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951) \text{ \AA}$

E <sub>exp</sub> [163]	E <sub>theor</sub> [163]	E <sub>theor</sub> (our data)	n theor
49885.6	49885.9	49889.7	44
49889.4	49889.5	49891.9	45
49893.0	49892.8	49894.2	46
49896.3	49895.8	49896.6	47
49898.9	49898.8	49898.8	48
49901.4	49901.4	49901.3	49
49903.9	49903.9	49903.9	50
49906.2	49906.2	49906.2	51
49908.4	49908.4	49908.4	52
49910.5	49910.7	49910.5	53

В таблиці 3.32 жирним шрифтом виділені дані з роботи [163], які на нашу думку, є помилковими; з великого набору експериментальних даних авторами обрані результати, що збігаються з теорією; насправді, ці дані в [163] не відповідають стандартному атомно-спектроскопічному тесту на гладкість значень енергії.

Уявляється цілком ймовірним, що в даному випадку мова йде про перескок на іншу рідбергівську серію. Слід зазначити, що ця обставина не є випадковою, оскільки поведінка рідбергівських серій в спектрі атому урану є дуже складною й потребує значної акуратності.

На завершення підрозділу зазначимо, що розвинутий в роботі новий метод релятивістської багаточастинкової теорії збурень (RMBPT) з оптимізованим ODF нульовим наближенням виявляється достатньо ефективним підходом при проведенні досліджень спектроскопічних властивостей рідбергівських серій атому урану. Безумовно, наведені дані представляють значний інтерес в сенсі подальшого використання в задачах побудови оптимальних лазерних схем поділу радіоактивних ізотопів, у т.ч. урану.

### 3.7 Висновки до розділу 3

Основні наукові результати і висновки даного розділу зводяться до наступного:

1. З метою апробації нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу були виконані тестові розрахунки енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних дипольних переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та електричного квадрупольного переходу  $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі  $Hg^+$ .

Показано, що методи HF і DF в стандартній реалізації простого одноконфігураційного наближення дають вкрай неточні дані як по енергіях, так і ймовірностям радіаційних переходів; одночасно встановлено, що достатньо висока точність нашого підходу пов'язана з оптимальним вибором дірак-фоківського нульового наближення ODF, а також з досить повним ефективним урахуванням багаточастинкових кореляційних ефектів; при цьому поправка на урахування поляризаційної взаємодії валентних електронів змінює значення ймовірностей дипольних переходів на 15-30%, величина калібрувально-неінваріантного внеску в ймовірність переходу складає долі проценту.

2. На основі релятивістської ТЗ з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF виконані обчислення енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема, конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ ; енергії і сили осциляторів переходів  $6s^2 6p^2 P_{1/2}-6s^2 nd^2 D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^2 6p^2 P_{1/2}-6s^2 ns^2 S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ); показано, що метод HF, а також кулонівське наближення дають недостатньо точні дані як по енергіях, так і ймовірностям радіаційних переходів; одночасно встановлено, що достатньо висока точність нашого підходу пов'язана з оптимальним вибором дірак-фоківського нульового наближення ODF, а також досить повним ефективним урахуванням багаточастинкових кореляційних ефектів

3. Вперше представлені результати розрахунку RMBPT-ODF енергій рівнів надважкого елемента ніхонія  ${}_{113}^{278}Nh$  з урахуванням релятивістських,

радіаційних та кореляційних поправок й вказано на вкрай важливе значення одночасного урахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних поправок. На основі нового методу отримані дані щодо енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $np'n's$  ( $n = 6, n' = 7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_{J'} \rightarrow 7s^3P_J^o$  важкого атому свинцю Pb, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p^8P_{5/2,7,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p^8P_{9/2,7,2}$  атому європію Eu I і показано, що дані нашої теорії, у порівнянні з відомим багатоконфігураційним методом (неоптимізованим) ДФ, а також спрощеним кулонівським наближенням, значно краще узгоджуються з експериментальними даними.

4. Представлені результати прецизійних обчислень енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  атому ітербію Yb, сил осциляторів радіаційних переходів, зокрема,  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії та ширини автоіонізаційних станів, енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ , причому для деяких резонансів вперше передбачені прецизійні значення їх енергії та ширин; показано, що ключовими факторами для досягнення адекватної точності опису спектроскопічних характеристик ітербію Yb є прецизійне врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, а також використання оптимізованих базисів орбіталей.

5. Для розрахунків енергій та ширин автоіонізаційних станів атома тулію  $4f^{-1}_j 6s(J12)nsnp[J]$  Tm з квантовим числом  $n=25-50$  застосований комбінований метод калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень (RMBPT) та релятивістський енергетичний підхід з використанням моделі оптимізованого ODF, зокрема, отримані нові прецизійні дані енергій, ширин автоіонізаційних станів  $4f^{13}_{7/2} 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2} 6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{7/2} 6s_{1/2}(3)np_j[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2} 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2} 6s_{1/2}(2)np_j[J]$ , розпад яких проходить як по стандартному каналу Бейтлера-Фано (BFD), так й новому в атомній спектроскопії каналу реорієнтаційного типу (ROD) або по обидва одночасно, а також отримані дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f^{-1}_j 6s_{1/2}(J')n_{R}l_{R}j_{R}[J]$  ( $j, J', j_R, J$ ) = 1 / 2-5 / 2; показано, що унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії атомів ітербію та тулія,

особливо ті, що стосуються характеристик аномально вузьких резонансів, свідчать про досить складну енергетику важких атомів, а також мають принципове значення у сенсі пошуку нових підходів до побудови оптимальних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів, у т.ч. радіоактивних ізотопів, що має величезне теоретичне та прикладне значення для багатьох галузей науки і техніки.

6. З метою вивчення спектроскопічних характеристик атому урану U та подальшої апробації нового теоретичного підходу виконані обчислення орбітальних енергій цього атому (ізоотоп  $^{92}\text{U}$ ); проведено порівняння з альтернативними та найбільш ефективними сучасними підходами атомної спектроскопії, яке доводить ефективність нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF. Вперше отримані прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій U урану, відраховані від рівня  $32899.790 \text{ cm}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5880-5890) \text{ \AA}$ ), нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790 \text{ cm}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137) \text{ \AA}$ ), рівня  $32857.449 \text{ cm}^{-1}$  ( $5f36d7s8s \ ^7L_5^0$ ); послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914) \text{ \AA}$ ), а також рівня  $33083.3 \text{ cm}^{-1}$  послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951) \text{ \AA}$ ). На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість значень енергії показано, що наведені у літературі дані по вказаним вище рідбергівським серіям атому урану U містять певні неточності, що пов'язано із вкрай високою складністю рідбергівських серій в спектрі цього атому. Слід зазначити, що отримані дані по спектроскопії урана U мають велике значення з точки зору теоретичної перевірки нових ефектів на стику традиційної атомної оптики та спектроскопії, а також фізики електрослабких взаємодій, зокрема, пошуку ефектів Нової фізики за межами Стандартної Моделі, з'ясування ролі слабких взаємодій в атомній спектроскопії, вивчення властивостей нового стану речовини, так званої рідбергівської матерії тощо. Крім того, вони мають величезне практичне значення для вирішення задач побудови оптимальних схем лазерного фотоіонізаційного поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів та ядерних ізомерів, зокрема, урану U.

Основні наукові результати, викладені в даному розділі, опубліковано в роботах: [248, 254, 262, 264-267, 273-276, 286, 288, 292].

## РОЗДІЛ 4

### РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ КАОННИХ АТОМІВ З УРАХУВАННЯМ ОБМІННО-КОРЕЛЯЦІЙНИХ, РАДІАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ ТА ЕФЕКТІВ СИЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

#### 4.1 Вступні зауваження. Огляд експериментальних та теоретичних робіт із спектроскопії каонних атомних систем

Теоретичне вивчення різних характеристик каонних атомів (КА) представляє великий інтерес як для розвитку сучасної релятивістської квантової оптики і спектроскопії, квантової фізики та хімії скінчених Фермі систем з електромагнітними та сильними взаємодіями взагалі, так і для подальшого розвитку та вдосконалення концепцій атомних і ядерних структур [331-335].

В цьому розділі представлено нову теорію визначення спектрів та спектроскопічних характеристик каонних багатоелектронних атомних систем на основі рівняння Клейна-Гордона-Фока з одночасним урахуванням електромагнітної та сильної каон-ядерної взаємодії [250-253, 281, 283, 291, 295]. В їх основі лежить викладена вище нова комбінована релятивістська ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням та прецизійним урахуванням всієї сукупності релятивістських, радіаційних, ядерних ефектів, включаючи ефекти Bohr-Weisskopf і Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а радіаційні КЕД поправки (зокрема, поправка на поляризацію вакууму та власно-енергетична частина лембівського зсуву, поправки вищих порядків, у тому числі, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ,  $n=3$ ) та ефективний релятивістський енергетичний підхід (з використанням адіабатичної формули Gell-Mann & Low).

Також наведені результати розрахунку енергій переходів у важких каонних атомах, які порівнюються з експериментальними та альтернативними теоретичними даними, зокрема, з тими, що отримані з використанням найпростішої каскадної моделі Фермі-Теллера та послідовного методу Indelicato et al. Наведені енергії та ширини зсувів за рахунок сильної взаємодії, які розраховані та виміряні для декотрих рентгенівських переходів ряду важких каонних атомів.

Варто нагадати, що вивчення спектрів, енергії та спектроскопічних



характеристик екзотичних квантових систем, зокрема, адронних (каонних, піонних та інших) атомів має велике значення з точки зору розуміння передових концепцій [1-90].

Загальновідомо, що поняття екзотичного атома було вперше введено в 1947 р. Фермі, Теллером, Вілером для пояснення експериментів з поглинання негативних мюонів у речовині. В останні роки вивчення каонних атомів набуває особливої актуальності у світлі загальновідомого прогресу експериментальних досліджень (на фабриках мезонів в лабораторіях LAMPF (США), PSI (Швейцарія), TRIUMF (Канада), IFF (Росія), RIKEN (КЕК, Японія), RAL (Великобританія), DEAR в DAPNE (Італія)), що стимулює подальший істотний розвиток сучасної ядерної теорії, квантової механіки атомів тощо.

Вивчення спектрів та спектроскопічних, радіаційних та інших властивостей каонних атомів є унікальним інструментом для розуміння суті фундаментальної взаємодії, включаючи перевірку Стандартної моделі, що дає надзвичайно важливі дані про властивості ядра та про самі адрони, характер їх взаємодії з нуклонами.

В принципі, це дозволяє визначити масу та магнітні моменти частинок (каону, піону, антипротону тощо), які є найбільш точними на даний момент.

Легкі каонні атоми є кандидатами на створення нових ефективних низькоенергетичних рентгенівських стандартів. Більше того, експерименти з різними адронними атомами дозволяють визначити спіни та пари адронів. Оскільки продукти реакцій адронів (каонів) з нейтронами і протонами різні, це дозволяє отримати кількісні дані про розподіл протонів і нейтронів в ядрах шляхом вимірювання ширини рентгенівських переходів та відносної ймовірності різних реакцій.

Одне з головних фундаментальних питань у сучасній фізиці адронів пов'язане з тим, що маси адронів набагато перевищують масу їх вмісту в кварках. Поточна маса кварків на два порядки менша, ніж типова маса адрону, яка становить приблизно 1 ГеВ. Передбачається, що це незвичайне явище виникає через спонтанне порушення хіральної симетрії безмасових кварків у фізиці сильної взаємодії [1-5].

Одним з найбільш чутливих тестів для сценарію порушення хіральної симетрії у сучасній фізиці адронів є вивчення екзотичних (зокрема, каонічних) атомних систем. Слід нагадати, що найповніша теорія

адронних багатоелектронних атомів повинна базуватися на принципах квантової хромодинаміки (КХД) та квантової електродинаміки (КЕД).

Механізм утворення адронних (каонних) атомів зараз добре відомий [1-5]. Реально такий атом утворюється, коли негативний каон (піон) потрапляє в середовище, втрачає свою кінетичну енергію через канали збудження та іонізації і врешті-решт захоплюється, замінюючи електрон на збудженій атомній орбіті. Подальший сценарій дезбудження включає різні каскадні процеси, такі як переходи Оже, дезбудження Кулона, розсіювання тощо. Коли каон досягає низького  $n$ -стану з невеликим кутовим моментом, сильна взаємодія з ядром спричиняє його поглинання.

Сильна взаємодія є причиною зміщення енергій низових рівнів від суто електромагнітних значень, а кінцевий час життя стану відповідає збільшенню спостережуваної ширини рівня.

На даний час відомо про проведення ряду високоточних вимірювань каонного (піонного) водню, гелію та інших елементів, включаючи важкі системи. Експеримент E570 [18, 19] дозволив зробити точне вимірювання енергії рентгенівського випромінювання в каонному атомі гелію. Протягом останніх десятиліть щодо цієї системи має місце дуже складна проблема. Мова йде про велику розбіжність між теоріями та експериментами, які стосуються  $2p$  стану каонного гелію.

На початку 1970-х та 80-х років кілька експериментальних груп (WG71- Wiegand-Pehl (1971), BT79-Batty et al. (1979), BR83-Baird et al. (1983) [1-26]) заявили про отримання результатів щодо великого відштовхуючого зсуву ( $\sim -40$  eV), тоді як розрахунки фізично обґрунтованих оптичних моделей дають значення зсуву на порядок менше. Ця значна неузгодженість між експериментальними та теоретичними результатами отримала статус “каонної гелієвої головоломки”.

Нове вимірювання рентгенівського випромінювання каонного гелію було проведено за допомогою каналу каонного пучка КЕК-PS K5 [18-20]. На рисунку 4.1 представлені експериментальні дані спектру K-He, які були отримані на протонному синхротроні КЕК 12 GeV RIKEN Nishina Center, Японія (Okada et al., 2008; Експеримент E570) [18, 19].

Теоретично було передбачено набагато більший зсув із припущенням щодо існування глибоко пов'язаних каонних ядерних станів. Кілька теоретичних оцінок за останні роки [18, 19] не підтвердили значного зміщення каонного гелію.

Теоретичні підходи, які широко застосовувались до вивчення адронних (каонних та інших) атомних систем, описані в [1-56]. В роботах [43-56] представлені ефективні схеми ab initio для рівняння Клейна-Гордона-Фока та подальше визначення рентгенівських спектрів для багатоелектронних каонних атомів з різними схемами для врахування ядер, КЕД, ефектів кореляції між частинками, а також результати теоретичного вивчення зсувів та ширин сильної взаємодії по рентгенівській спектроскопії каонних атомів (U, Pb тощо).

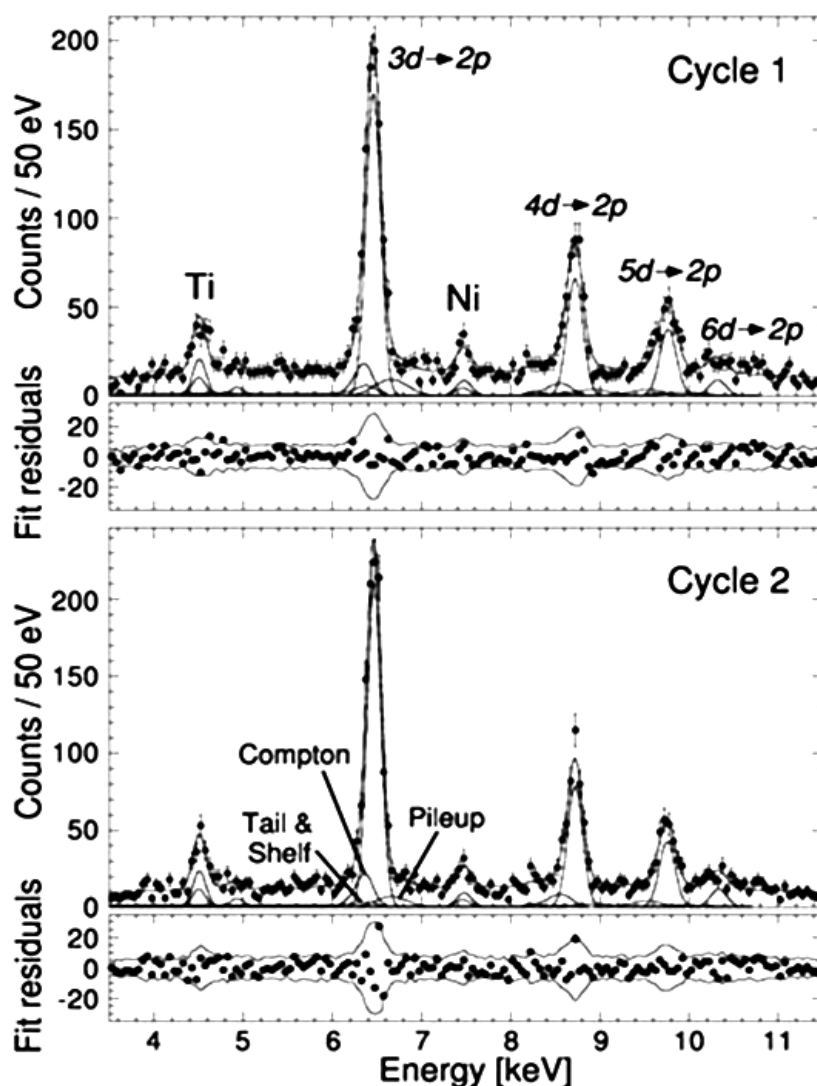


Рисунок 4.1 - Результати експериментальних даних спектру К-Не (Okada et al., 2008; Експеримент E570) [18, 19]

Найскладніші аспекти теоретичного вивчення зводяться до правильного опису каонної (піонної) сильної взаємодії, оскільки обґрунтовано враховується електромагнітна частина проблеми [2, 41-45, 57-68]. Крім того, зовсім новий аспект пов'язаний з можливими, очевидно, дуже крихтними електрослабкими та надтонкими взаємодіями. Ці питання є надто складними й у подальшому представленні ми докладно їх не розглядаємо.

У цьому розділі ми представляємо новий ефективний релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних властивостей каонних багатоелектронних атомних систем та далі в якості ілюстрації переваг нашого методу представляємо деякі результати розрахунку енергетичних та спектральних параметрів для каонних атомів  $K$ ,  $^{184}W$ ,  $^{207}Pb$ ,  $^{238}U$ , з урахуванням радіаційних (вакуумна поляризація), ядерних (кінцевий розмір ядра) та поправок на сильну каон-ядерну взаємодію.

Наведені експериментальні результати (DAΦNE EAR, Frascati, Italy; E570-КЕК, RIKEN, Nishina Centre, JAPAN тощо) та альтернативні теоретичні дані.

## 4.2 Релятивістське рівняння Клейна-Гордона-Фока для каонної атомної системи. Електромагнітні взаємодії

Основи нашого теоретичного підходу до вивчення екзотичних атомних систем детально представлені в роботах [51-56, 250, 291]. Варто нагадати, що каон є бозоном зі спіном «0», і далі т ми використовуємо такі довідкові значення для його маси та радіуса:

$$m_{K^-} = 493.667 \pm 0.013 \text{ MeV},$$

$$r_{K^-} = 0.560 \pm 0.031 \text{ фм}.$$

Рівняння Клейна-Гордона-Фока за відсутності сильної взаємодії запишемо в стандартному вигляді (нижче використовуються атомні одиниці):

$$m^2 c^2 \Psi_0(x) = \left\{ \frac{1}{c^2} \left[ i\hbar \partial_t + eV_0(r) \right]^2 + \hbar^2 \nabla^2 \right\} \Psi_0(x), \quad (4.1a)$$

Або у випадку стаціонарного представлення:

$$\left\{ \alpha^2 [E - V_c(r)]^2 + \vec{\nabla}^2 - \mu^2 c^2 \right\} \psi(r) = 0, \quad (4.16)$$

Де  $\mu$  – приведена маса каона,

$E$  – енергія каона,  $c$  – швидкість світла,

$\hbar$  – стала Планка,

$V_c$  – сума ефективного потенціалу, що описує взаємодію каона зі скінченно-розмірним розподілом заряду в ядрі, потенціалу, який обумовлений зарядом електронних оболонок у багатоелектронній атомній системі, та узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges, що включає стандартний потенціал Uhling-Serber, внески від електричного і магнітного форм-факторів, а також члени, що враховують внески поправок порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ), у т.ч. поправки Källen-Sabry та Wichmann-Kroll.

Хвильова функція має вигляд:

$$\Psi_0(x) = \exp(-iE_0 t/\hbar) \varphi_0(r) \quad (4.2)$$

Повне рівняння Клейна-Гордона-Фока з урахуванням потенціалу сильної каон-ядерної взаємодії для каонної атомної системи може бути представлено в наступному вигляді:

$$\left[ \hbar^2 \nabla^2 + c^{-2} (E - V_{FS})^2 - \mu^2 c^2 \right] \psi = 2\mu V_N \psi. \quad (4.3)$$

Тобто, у правій частині з'являється потенціал сильної каон-ядерної взаємодії.

Відповідне радіальне рівняння для (4.2) стандартним чином представляється у вигляді системи двох рівнянь першого порядку:

$$\frac{d}{dr} p = q \quad (4.4a)$$

$$\frac{d}{dr}q = \left[ \mu c^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha^2 (V_c - E)^2 \right] p, \quad (4.46)$$

де  $p$  – радіальна частина хвильової функції Клейна-Гордона-Фока.

В цьому місті обчислювальної процедури звичайно всіма дослідниками використовується стандартний прийом, викладений у багатьох роботах (див. напр., огляд [347]).

Дійсно, для уточнення отриманого значення  $E$  використовується стандартна процедура варіації  $p, q$ :

$$(q + \delta q)_{r_m^+} = (q + \delta q)_{r_m^-}. \quad (4.5)$$

У рівнянні (4.5) значення  $p, q, E$  замінюються відповідно значеннями

$$\begin{aligned} p + \delta p, \\ q + \delta q, \\ E + \delta E, \end{aligned} \quad (4.6)$$

тоді:

$$\frac{d}{dr}p + \frac{d}{dr}\delta p = q + \delta q, \quad (4.7)$$

Й неважко далі записати таке співвідношення:

$$\frac{d}{dr}\delta q = \left[ \mu c^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha^2 (V_c - E)^2 \right] \delta p + 2\alpha^2 (V - E) \delta E p. \quad (4.8)$$

Помножимо (4.4а) на  $q$  та (4.4б) на  $p$ , потім віднімемо одне з іншого; в результаті маємо:

$$\frac{d}{dr}(p\delta q - q\delta p) = 2\alpha^2 (V_c - E) p^2 \delta E. \quad (4.9)$$

Після нескладних трансформацій та подальшого інтегрування, неважко отримати наступне співвідношення для відповідної поправки до

енергії (рівняння Клейна-Гордона-Фока):

$$\delta E = \frac{p(r_m) [q(r_m^+) - q(r_m^-)]}{2\alpha^2 \int_0^\infty (V_c - E) p^2 dr} \quad (4.10)$$

Цікаво порівняти співвідношення (4.10) з аналогічним співвідношенням для поправки до енергії, отриманим у випадку релятивістського рівняння Дірака (див. напр., огляд [347]).

Шукане співвідношення має вигляд:

$$\delta E = \frac{p(r_m) [q(r_m^+) - q(r_m^-)]}{\alpha \left[ \int_0^{r_m^-} (p^2 + q^2) dr + \int_{r_m^+}^\infty (p^2 + q^2) dr \right]} \quad (4.11)$$

У рівнянні (4.11)  $p$ ,  $q$  – велика і мала діраковські компоненти відповідно.

Найбільш важливим моментом подальшого розгляду є визначення ефективного потенціалу каонної атомної системи (який включає потенціал взаємодії каона зі скінченно-розмірним розподілом заряду в ядрі), потенціалу електронних оболонок у багатоелектронній атомній системі та узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges,

Як вже вказувалося вище, електричний потенціал ядра визначається стандартним способом (див розділ 2, а також [91-93]). Для опису розподілу заряду в ядрі звичайно використовувати відому модель Фермі [91], або наближення моделі Гауса та релятивістські моделі середнього поля. Як вказувалося вище, в нашому класі задач використання гладкої функції розподілу заряду типу Гауса має перевагу у порівнянні, наприклад, з розривною функцією розподілу заряду в ядрі у вигляді однорідно зарядженої кулі.

З іншого боку, наявність відповідного програмного блоку обчислення розподілу Гауса (Фермі) методом диференціальних рівнянь Іванова-Іванової-Глушкова в РС комплексі “Superatom” [7, 82, 83, 183, 187, 188] є мотивацією для імплементації в нашу теорію моделі Гауса (Фермі).

Відповідні рівняння для гаусової моделі розподілу заряду докладно представлені вище, а також в роботах [92, 93]. Деякі автори воліють також використовувати модель однорідно зарядженої кулі.

Для урахування скінченного розміру ядра далі ми використали дві моделі розподілення заряду в ядрі: модель Фермі і модель Гауса. Корисно вказати, що потенціал, обумовлений зарядом ядра в моделі рівномірно зарядженої кулі, можна задати у вигляді [2]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\alpha Z'}{R} \left[ 3 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right], & r \leq R \\ -\frac{\alpha Z}{R} U(r) - \frac{\alpha}{r}, & r > R \end{cases} \quad (4.12)$$

де  $\alpha$  – стала тонкої структури;

У моделі Фермі розподіл заряду в ядрі описується наступною функцією  $\rho(r)$  [3]:

$$\rho(r) = \rho_0 / \{1 + \exp[(r - c) / a]\}, \quad (4.13)$$

де параметр  $a=0.523$  фм, а параметр  $c$  вибирається таким чином, щоб середньоквадратичний радіус визначався виразом:

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = (0.836 \cdot A^{1/3} + 0.5700) \text{ фм.} \quad (4.14)$$

В якості альтернативного варіанту в атомних розрахунках, як правило, застосовують наступну  $Z$ -залежність для ефективного радіуса [247]:

$$R = 1,202 \cdot 10^{-13} Z^{1/3} \text{ см.} \quad (4.15)$$

Нарешті, є ще один альтернативний варіант: використовувати табличні значення ядерних радіусів (а також наведених мас) [41, 53, 204].

Оскільки в задачі опису спектрів КА врахування скінчених розмірів ядра виявляється вкрай важливим, опишемо коротко процедуру переходу від потенціалу точкового ядра до потенціалу скінченного ядра.



Якщо точкове ядро володіє деяким центральним потенціалом  $W(R)$ , то перехід до потенціалу скінченного ядра здійснюється заміною  $W(r)$  на

$$W(r|R) = W(r) \int_0^r dr r^2 \rho(r|R) + \int_r^\infty dr r^2 W(r) \rho(r|R). \quad (4.16)$$

Наприклад, згідно з [3-7], для кулонівського потенціалу ядра зі сферично симетричною щільністю  $\rho(r|R)$  можна записати:

$$V_{nucl}(r|R) = -\left(\frac{1}{r}\right) \int_0^r dr r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr r' \rho(r'|R). \quad (4.17)$$

Використовуючи універсальний метод диференціальних рівнянь Ivanov-Ivanova-Glushkov [2, 9, 13], процедуру обчислення зазначеного потенціалу до чисельного вирішення певної системи диференціальних рівнянь, яка реалізована у відповідному блоці програмного комплексу "Superatom-Kaon".

Шукана систем а має вигляд:

$$V'_{nucl}(r, R) = \left(\frac{1}{r^2}\right) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r', R) \equiv \left(\frac{1}{r^2}\right) y(r, R),$$

$$y'(r, R) = r^2 \rho(r, R), \quad (4.18)$$

$$\rho'(r, R) = -8\gamma^{5/2} r / \sqrt{\pi} \exp(-\gamma r^2) = -2\gamma \rho(r, R) = -\frac{8r}{\pi r^2} \rho(r, R)$$

з граничними умовами:

$$V_{nucl}(0, R) = -4/(\pi r),$$

$$y(0, R) = 0 \quad (4.19)$$

$$\rho(0, R) = 4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi} = 32 / R^3.$$

Згаданий вище універсальний метод диференціальних рівнянь був спочатку запропонований Івановою та Івановим [86], а потім із успіхом застосовувався у багатьох задачах класичної атомної та молекулярної спектроскопії. Детальний опис методу представлений у роботах [38, 39, 86, 87, 91-96].

Система рівнянь включає також рівняння для функції розподілу густини. В теорії важких каонних атомів у багатьох випадках зручним виявляється знання та використання часткових похідних від потенціалу по радіусу ядра.

Відповідні похідні (процедура їх визначення, та корисні схеми їх обчислення докладно описані у ряді робіт, напр., [2, 9, 13, 281, 291]).

Далі слід підкреслити, що на відміну від лептонів, таких як електрони або мюони, у відповідних багатоелектронних атомах або мюонних атомних системах, каон представляє собою складну частинку з ненульовим радіусом розподілу заряду.

Таким чином, для того, щоб точніше описати електричну взаємодію ядра скінченного розміру (з радіусом  $R_1$ ) з каоном (скінченного розміру з радіусом  $R_2$ ), звичайно використовують дуже ефективний й достатньо простий потенціал типу Indelicato-Desclaux et al. [42, 44, 43, 49, 50]):

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Z(-5r^2 + 15R_1^2 - 3R_2^2)}{10R_1^3}, & 0 \leq r \leq (R_1 - R_2), \\ \frac{Z}{160R_1^3 R_2^3} \left[ r^6 - 15r^4(R_1^2 + R_2^2) + 40r^3(R_1^3 + R_2^3) - 45r^2(R_1^2 - R_2^2) + \right. \\ \left. + 24r(R_1 + R_2)^3(R_1^2 - 3R_1R_2 + R_2^2) - 5(R_1 - R_2)^4(R_1^2 + 4R_1R_2 + R_2^2) \right], & (R_1 - R_2) \leq r \leq (R_1 + R_2), \\ \frac{Z}{r}, & (R_1 + R_2) \leq r \leq \infty \end{cases} \quad (4.20)$$

### 4.3 Новий підхід до урахування радіаційних ефектів в спектрах важких каонних атомів

Наступний принципово важливий аспект точної теорії каонних атомних систем пов'язаний з послідовним і максимально точним урахуванням внесків радіаційних ефектів або КЕД-ефектів. На даний час теорія КЕД-ефектів в теорії екзотичних атомних систем отримала інтенсивний розвиток, оскільки всі наробки з теорії звичайних атомів достатньо просто переносяться й на випадок екзотичних систем [41, 57-68].

Далі для урахування радіаційних ефектів в задачах розрахунку спектрів важких каонних атомів ми використовуємо процедури, розвинуті вище у розділі 2, з відповідною модифікацією [37-39, 86-90, 291]. Тобто, фактично мова йде про наш новий ефективний підхід до опису радіаційних КЕД поправок, зокрема, поправок за рахунок урахування власно-енергетичної частини лембівського зсуву та ефекту поляризації вакууму (включаючи КЕД поправки вищих порядків КЕД ТЗ).

Підхід базується на методі релятивістських функцій Гріна з комплексною енергією та методі узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges, що включає стандартний потенціал Uhling-Serber, внески від електричного і магнітного форм-факторів, а також члени, що враховують внески поправок порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ), у т.ч. поправки Källén-Sabry та Wichmann-Kroll. Відповідні радіаційним ефектам діаграми Фейнмана представлені на рисунку 4.2.

Відповідні діаграми A1-A3, а також діаграми, що відповідають 2-петльовій поправці Каллена-Сабрі (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  (A4) та поправці Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll) порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  ( $n=3$ ; A5), наведені на рисунку 2.5 ((e.g. [41, 60, 247-251, 341, 355]).

Ефект поляризації вакууму, як правило, враховується в першому порядку теорії збуджень за допомогою узагальненого потенціалу Юлінга-Сербера з модифікацією, що враховує радіаційні поправки високого порядку. Достатньо ефективним є використання в теорії урахування радіаційних ефектів відомого методу радіаційного оператора FGRP типу Flambaum-Ginges [29]. Визначення шуканого радіаційного оператора фактично зводиться до обчислення оператора власної енергії. Відповідне дослідження слід розбити на дві частини, а саме, розглянути взаємодію каона (електрона) з віртуальними фотонами високої частоти та аналогічну взаємодію з фотонами низької частоти.

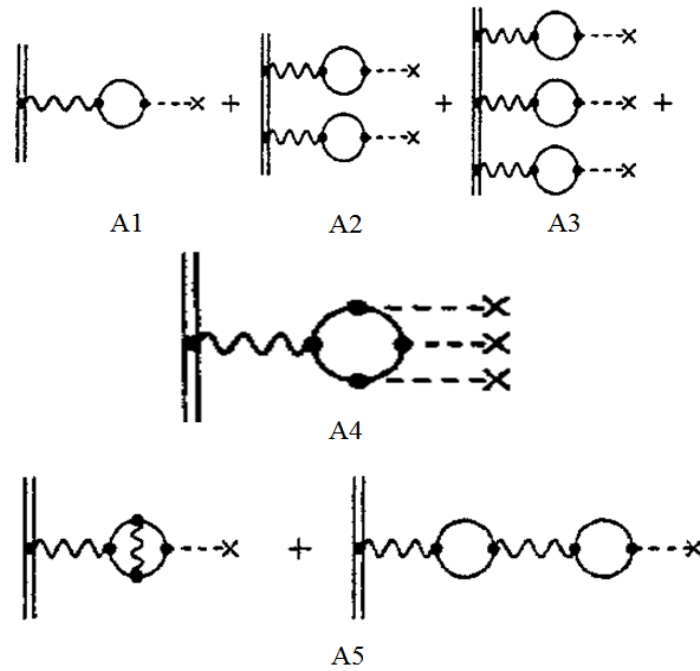


Рисунок 4.2 - Фейнманівські діаграми, що описують ефект поляризації вакууму: A1 – член Юлінга-Сербера; A2, A3 – члени порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ); A4 – 2-петльова поправка Калена-Сабрі (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$ ; A5 – поправка Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll)  $\alpha(Z\alpha)^n$  ( $n=3$ )

Їх конкретне обчислення для даної системи виявляється аналогічним обчисленню потенціалу типу Юлінга-Сербера [172, 173].

З урахуванням вище наведених формул (розділ 2) радіаційний потенціал можна представити у вигляді суми стандартного потенціалу Юлінга-Сербера, внеску, що пов'язаний з магнітним форм-фактором, високочастотного внеску, що пов'язаний з електричним форм-фактором та низькочастотного внеску, тобто:

$$\Phi_{rad}(r) = \Phi_U(r) + \Phi_g(r) + \Phi_f(r) + \Phi_l(r). \quad (4.21)$$

Значимо, що у рівнянні (4.21) фігурує стандартний потенціал Юлінга-Сербера  $\Phi_U(r) = V_U(r) = V_{U}^{FS}(r)$ :

$$V_U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi r} \int_1^\infty dt \exp(-2rt/\alpha Z) \left(1 + 1/2t^2\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} \equiv -\frac{2\alpha}{3\pi r} C(x), \quad (4.22a)$$

де  $x = r/\alpha Z$ , або відповідний потенціал (з урахуванням скінченного розміру ядра) буде мати вигляд:

$$V_U^{FS}(r) = -\frac{2\alpha^2}{3\pi} \int d^3r' \int_m^\infty dt \exp(-2t|r-r'|/\alpha Z) \times \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \frac{\rho(r')}{|r-r'|}, \quad (4.22б)$$

де  $\rho(r)$  – функція розподілу заряду в ядрі.

Ключовим елементом процедури обчислення радіаційних поправок є метод радіаційного потенціалу, запропонований Flambaum-Ginges (FGRP) [29]. Визначення вище введеного радіаційного оператора фактично зводиться до обчислення оператора власної енергії.

Інші члени в (4.21) відповідають визначенням визначення поляризаційного оператора, електричного і магнітного форм-факторів [124, 356], а саме  $\Phi_g(r) = V_g(r)$ ,  $\Phi_f(r) = V_f(r)$ :

$$V_g(r) = \frac{\alpha}{4\pi m} i\gamma \cdot \nabla \left[ \Phi(r) \left( \int_1^\infty dt \frac{1}{t^2 \sqrt{t^2-1}} e^{-2trm} - 1 \right) \right], \quad (4.23а)$$

$$V_f^\lambda(r) = -\frac{\alpha}{\pi} \Phi(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2-1}} \left[ \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right) \times [\ln(t^2-1) + \ln(4m^2/\lambda^2)] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right] e^{-2trm}. \quad (4.23б)$$

Низькочастотний параметр  $\lambda$  обрізання в аргументі логарифма, що фігурує в (4.23б), змінюється в межах  $(Z\alpha)^2 m \ll \lambda \ll m$ .

Далі для того щоб мінімізувати низькочастотний внесок, величина параметра вибирається рівною енергії зв'язку каона  $(Z\alpha)^2 m$  в адронному атомі, звичайною підстановкою маси каону.

Оскільки у адронному атомі також місце ситуація, а саме, радіаційні зсуви для  $p$  та інших станів у порівнянні з  $s$  станами (хвилями) істотно менші і досить чутливі до коректного визначення низькочастотного внеску, з цієї причини, як й у випадку звичайного багатоелектронного атому, для врахування шуканих поправок використовується вираз, запропонований Фламбаумом-Гінгесом [356]:

$$V_i(r) = -\frac{B(Z)}{e} Z^4 \alpha^5 m c^2 e^{-Zr/a_B}, \quad (4.24)$$

в якому  $e$  – заряд протона,  $B(Z)$  – універсальна функція [247].

Внесок в потенціал, обумовлений електричним форм-фактором [247], має вигляд  $\Phi_f(r) = V_f(r)$  :

$$V_f(r) = -A(Z,r) \frac{\alpha}{\pi} V(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2-1}} \left[ \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right) \times [\ln(t^2-1) + 4\ln(1/Z\alpha + 0.5)] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right] e^{-2trm} \quad (4.25)$$

$$A(Z,r) = (1.071 - 1.976x^2 - 2.128x^3 + 0.169x^4)mr / (mr + 0.07Z^2\alpha^2). \quad (4.26)$$

Зазначимо, що описана нами процедура урахування радіаційних поправ в каонних атомах розвинута та адаптована вперше. Варто нагадати, що практично всі альтернативні теорії каонних атомних систем, природно, базуються на використанні рівняння Клейна-Гордона-Фока, а також для урахування радіаційних поправок стандартного потенціалу Юлінга-Сербера, який авжеж не враховує всю послідовність радіаційних поправок. Таким чином, розвинутий нами підхід з точки зору урахування радіаційних поправок очевидно переважає інші альтернативні підходи.

При практичній реалізації, як правило, використовується процедура “розмазування” потенціалу по об’єму, яка є аналогічною процедурі визначення ядерного потенціалу з урахуванням скінченного розміру атомного ядра. Вся обчислювальна процедура включена в загальну систему диференціальних рівнянь (блок “RadAdr” PC атомного коду “Superatom-ISAN” [25-30, 247-251]).

Варто також згадати тут інші прецизійні поправки, які слід враховувати при описі енергетичних спектрів каонних атомів.

Сама очевидна поправка є поправкою на приведену масу  $(1 + m_K^- / M_{KA})$ , де  $m_K$  – маса каона,  $M_{KA}$  – маса всієї атомної системи) й є фактично вже присутньою в енергії, яка розраховується шляхом вирішення рівняння Клейна-Гордона-Фока. Інша релятивістська поправка, яка враховує релятивістську віддачу, елементарно оцінюється по формулі:  $B^2 / 2M_{KA}$ , де  $B$  – рівень енергії атомної системи.

Далі, для глибоко розташованих рівнів в спектрах каонного атому варто також враховувати поправку на поляризація вакууму завдяки утворенню віртуальних пар мюонів. Ця поправка також природньо враховується в модифікованому наближенні Юлінга-Сербера, який в нашій теорії фактично присутній в радіаційному потенціалі FGRP типу

Flambaum-Ginges. Також слід додати, що існують подібні поправки наступних порядків для ферміонів [1-5]. Для бозонів ситуація з цими ефектами є більш складною й за теперішнього часу має певні проблеми, але внесок шуканих релятивістських поправок виходить за рамки виконаних експериментів. Інші деталі нашого підходу можна знайти в роботах [51-55, 90-138]. Всі розрахунки виконані з використанням програми “Superatom”.

#### 4.4 Елементи релятивістської теорії надтонкої структури спектрів каонних атомів

В даному підрозділі ми викладемо елементи добре розвинутої релятивістської теорії надтонкої структури атомних систем (викладена у багатьох монографіях та оглядових роботах; див. напр., [2, 3, 138, 271, 283, 287, 289, 347, 370, 410, 440, 441]).

Новим елементом цієї частини нашої теорії буде лише використання оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення релятивістській теорії спектрів важких атомів, отримане в нашій теорії на основі принципу мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з дірак-фоківським нульовим наближенням ODF (розділ 2).

Згідно, напр., [370, 410], нагадаємо, що ядра з відмінними від нуля магнітним і квадрупольним електричним моментами  $\mu$  і  $Q$  відчують додаткову взаємодію з орбітальним електроном (каоном):

$$W = W_{\mu} + W_Q = -\mu \cdot H(0) + \frac{1}{6} e \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} . \quad (4.27)$$

Тут  $H$  та  $\varphi$  – відповідно напруженість магнітного поля і електростатичний потенціал, створювані частинкою (каоном, електроном) в місці знаходження ядра.

Загально відомо, що вказана взаємодія індукує розщеплення рівня з моментом  $J$  на ряд компонент, кожна з яких відповідає певному значенню повного моменту атома  $F$ :  $F=I+J$ . Відповідно зберігається лише повний момент атома  $F$ .

Магнітний момент ядра зі спіном  $I$  спрямований по  $I$  і дорівнює  $g_I I$ .

Якщо середнє значення  $H$  в стані із деяким значенням  $J$  спрямовано по  $J$ , тоді має місце добре відоме співвідношення:

$$\left. \begin{aligned} W_\mu &= -g_I I a J = A I J = \frac{1}{2} A \{F^2 - J^2 - I^2\} \\ \langle \gamma \cdot J I F M | W_\mu | \gamma \cdot J I F M \rangle &= \frac{1}{2} A \{F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)\} \end{aligned} \right\} . \quad (4.28)$$

Релятивістська теорія надтонкої структури для каонних атомних систем природньо у багатьох елементах співпадає із відповідною теорією для звичайних атомів й докладно викладена у багатьох роботах (див., напр., [43, 138, 251-253, 347, 350, 370, 440, 441]), тим не менш, мають місце певні особливості, пов'язані із різницею між каоном та електроном.

Дотримуючись робіт [251, 350, 440], далі можна стандартно ввести у розгляд потенціал взаємодії з ядерним магнітним полем як збурення:

$$W(r) = i\hbar e \left[ 2A_i(r) \partial^i + [\partial_i, A^i(r)] \right] - e^2 A^i(r) A_i(r) \quad (4.29)$$

де  $A_i$  – векторний потенціал.

Тут варто нагадати, що надтонка структура, обумовлена магнітною дипольною взаємодією, описується першим магнітним членом стандартного мультипольного розкладання, зокрема, у кулоновому калібруванні можна записати:

$$A(r) = -i \frac{\mu_0}{4\pi} \sqrt{2} r^{-2} C^{11} \circ M^1, \quad (4.30)$$

де  $M^l$  – діє тільки на ядерну частину  $|I m_I\rangle$ ,  $C^{11}$  - вектор (сферічна гармоніка) діє на частинкову (каон, електрон) частину  $|n l m\rangle$  відповідної хвильової функції.

В загальному вигляді збурення, обумовлене надтонкою взаємодією, має вигляд:



$$W(r) = W_1(r) + W_2(r) , \quad (4.31)$$

в якому стандартна лінійна частина [350, 440]:

$$W_1(r) = +i\hbar e \left[ 2A_i(r) \partial^i + [\partial_i, A^i(r)] \right], \quad (4.32a)$$

а другий квадратичний член має вигляд:

$$W_2(r) = -e^2 A^i(r) A_i(r) \quad (4.32b)$$

Якщо далі розвивати теорію з використанням кулонового калібрування, тобто:

$$[\partial_i, A^i(r)] = -\nabla \cdot A(r) = 0 \quad (4.33)$$

Тоді магнітний член в (4.31) може бути записаний у вигляді [251, 350, 440]:

$$W_1(r) = +2i\hbar e A_i(r) \partial^i = -2i\hbar e A(r) \cdot \nabla = -e\mu_0 \hbar \frac{\sqrt{2}}{2\pi} r^{-2} (C^{11} \cdot \nabla) \circ M^1$$

$$C_q^{11} \cdot \nabla = -\frac{r^{-1}}{\sqrt{2}} L_q, \quad (4.34)$$

де  $L_q$  – означає безрозмірний оператор кутового моменту у сферичних координатах.

Далі оператор збурення стандартним чином записується в сферичних координат у вигляді скалярного твору оператора  $T^1$ , діючого на хвильову функцію каона, і ядерного оператора  $M^1$ :

$$W_1 = \frac{e\mu_0 \hbar}{2\pi} r^{-3} (L \circ M^1) = T^1 \circ M^1 , \quad (4.35)$$

де

$$T_q^1 = \frac{e\mu_0 \hbar}{2\pi} r^{-3} L_q .$$

Далі, середнє значення оператора надтонкої взаємодії визначається стандартним співвідношенням

$$\langle n'l'IF'm'_F | W_1 | nIFm_F \rangle = (-1)^{l'+I+F} \delta_{FF'} \delta_{m_r m'_F} \delta_{ll'} \times \begin{Bmatrix} F & I & l' \\ 1 & l & I \end{Bmatrix} \langle n'l' || T^1 || nl \rangle \langle I || M^1 || I \rangle \quad (4.36a)$$

з приведеним ядерним матричним елементом та матричним елементом відповідно:

$$\langle I || M^1 || I \rangle = \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \quad (4.36б)$$

$$\begin{aligned} \langle n'l' || T^1 || nl \rangle &= \delta_{l_0} \frac{(-1)^{l-1}}{\begin{pmatrix} l & 1 & l \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \langle n'l'1 | T_0^1 | nl \rangle = \delta_{l_0} \sqrt{l} \sqrt{l+1} \sqrt{2l+1} \frac{e\mu_0 \hbar}{2\pi} \langle n'l'1 | r^{-3} L_z | nl \rangle = \\ &= \delta_{l_0} \delta_{ll'} \sqrt{l} \sqrt{l+1} \sqrt{2l+1} \frac{e\mu_0 \hbar}{2\pi} \langle n'l | r^{-3} | nl \rangle \end{aligned} \quad (4.36в)$$

де  $\mu_I$  – z ядерний дипольний момент, який зазвичай виражається в одиницях ядерного магнетону:

$$\mu_N = e\hbar / 2m_p c .$$

Тоді повне вираження для матричного елемента оператора  $W_1$  запишеться у вигляді (див. [251, 350, 440]):

$$\begin{aligned} \langle n'l'IF'm'_F | W_1 | nIFm_F \rangle &= \delta_{FF'} \delta_{m_F m'_F} \delta_{ll'} \mu_I \mu_N \times \\ &\times \frac{e\mu_0 \hbar}{2\pi} \frac{F(F+1) - I(I+1) - l(l+1)}{2I} \langle n'l | r^{-3} | nl \rangle \end{aligned} \quad (4.37a)$$

Аналогічно, для матричного елемента оператора  $W_2$  можна записати наступне стандартний вираз:

$$\langle nIFm_F | W_2 | nIFm_F \rangle = +2 \left( \frac{e\mu_0}{4\pi} \right)^2 \langle nIFm_F | (r^{-2} C^{11} \circ M^1) \cdot (r^{-2} C^{11} \circ M^1) | nIFm_F \rangle. \quad (4.37б)$$

Остаточний вираз для енергії надтонкої розщеплення енергетичних рівнів в каонній атомній системі має вигляд (див. [251, 350, 440]):

$$E_1^{nlF} = \frac{\mu_I \mu_N e \mu_0 \hbar c^2}{4\pi (E_0^{nl} - \langle nl | V_0(r) | nl \rangle)} \times \left[ \frac{F(F+1) - I(I+1) - l(l+1)}{2I} \right] \langle nl | r^{-3} | nl \rangle. \quad (4.38)$$

На закінчення цього підрозділу надамо також загальні визначення ймовірностей відповідних радіаційних переходів між компонентами надтонкої структури зазвичай визначаються стандартними виразами спектроскопії радіаційного розпаду збуджених станів атома.

Зокрема, згідно з [251, 350], ймовірність переходу між компонентами надтонкої структури має стандартний вигляд:

$$A_{nIF \rightarrow n'I'F'} = \frac{(2F+1)(2F'+1)}{2I+1} \begin{Bmatrix} l' & F' & I \\ F & l & 1 \end{Bmatrix}^2 A_{nl \rightarrow n'l'}, \quad (4.39)$$

де матричний елемент оператора переходу:

$$A_{nl \rightarrow n'l'} = \frac{4(E_{nl} - E_{n'l-1})^3}{3m^2 c^4 \hbar} \frac{\alpha}{(Z\alpha)^2} \frac{l}{2l+1} (R_{nl}^{n'l-1})^2. \quad (4.40)$$

Докладніше елементи теорії надтонкої структури атомних систем викладені у роботах [51, 138, 251-253, 271, 283, 287, 289, 347, 350, 370, 440].

#### 4.5 Процедура урахування сильної взаємодії в розрахунках енергетичних параметрів каонних атомів

Найскладнішим аспектом досліджуваної проблеми є адекватне врахування сильної каон-ядерної взаємодії в екзотичній системі. Сьогодні добре відомо, що найбільш фундаментальна і послідовна мікроскопічна теорія сильної взаємодії забезпечується сучасною квантовою хромодинамікою.

Слід нагадати, що мова йде про калібрувальну теорію, яка заснована на представленні обмежених кольорових кварків та глюонів. Тут можна

розглянути режими відносно низької та високої енергій (асимптотична свобода).

У випадку низьких енергій так звана константа зв'язку зростає до порядку 1, з цього випливає, що ці методи збурення не можуть описувати взаємодію сильно взаємодіючих адронів (включаючи каони).

Отже, для мікроскопічного опису сильної каон-ядерної взаємодії (навіть при відносно низьких енергіях), можуть бути розроблені інші підходи [1-56, 253, 291].

В ядерних розрахунках для опису каон-нуклонної (в загальному випадку мезон-нуклонної) взаємодії широке поширення отримала відома феноменологічна модель оптичного потенціалу [41, 44-48].

Пряма оцінка величини зсуву енергетичних рівнів каона в атомній системі, яка обумовлена сильною каон-ядерною взаємодією, може бути отримана зі співвідношення:

$$E_N = E - (E_{KG} + E_{FS} + E_{VP}), \quad (4.41)$$

де  $E = E^{експ}$  – експериментальне значення енергії; сума, що стоїть в дужках в правій частині (4.41), є фактично точним значенням електромагнітного внеску в енергію, тобто внеску, що обумовлений усіма електромагнітними взаємодіями.

Енергію каонних атомів можна визначити наступним чином:

$$E_N = E - (E_{KGF} + E_{FS} + E_{QED} + E_{other}). \quad (4.42)$$

У формулі (4.42):

$E_{KGF}$  – енергія каона в ядрі з точковим зарядом;

$E_{FS}$  – внесок в енергію, що забезпечується ефектом скінченних розмірів ядра;

$E_N$  – зсув енергії, що забезпечується сильною взаємодією  $V_N$ ;

$E_{QED}$  – поправки, що обумовлені КЕД-ефектами (ефект поляризації вакууму);

$E_{other}$  – інші поправки.

Треба мати на увазі, що, як правило, внески  $E_{FS}$ ,  $E_{QED}$  мають різні знаки, зокрема:

$$E_{FS} < 0,$$

$$E_{QED} > 0 .$$

Повне рівняння Клейна-Гордона-Фока з урахуванням потенціалу сильної каон-ядерної взаємодії записувалось вище, формула (4.3).

У разі каон-нуклонної системи, як правило, використовується потенціал типу Batty et al. [41]:

$$V_N = -\frac{2\pi}{\mu} \left[ 1 + \frac{M_K}{M_N} \right] [A_{Kp} \rho_p(r) + A_{Kn} \rho_n(r)], \quad (4.43)$$

де  $\mu$  – приведена каон-ядерна маса,

$A_{Kp}, A_{Kn}$  – комплексні ефективні довжини  $Kp$  та розсіювання  $Kn$ .

$M_K$  и  $M_N$  – маси каона та нуклона відповідно,

$\rho_p(r), \rho_n(r)$  – протонна і нейтронна щільності в ядрі,

Однією з визнаних спрощених моделей оптичного потенціалу є модель, яка базується на використанні потенціалу виду [41]:

$$V_N = -\frac{2\pi}{\mu} \left[ 1 + \frac{M_K}{M_N} \right] [a\rho(r)], \quad (4.44)$$

де  $a$  – ефективна усереднена довжина каон-нуклонного розсіювання.

Згідно даних аналізу Batty et al. для легких ядер рекомендована наступна оцінка усередненої довжини розсіювання  $a$ :

$$a = [(0.34 \pm 0.03) + i(0.84 \pm 0.03)] \text{ (фм)}. \quad (4.45)$$

Дуже важливим є коментар, наскільки коректною є модель (4.42), особливо з точки зору використання підгінних параметрів потенціалів. Тут слід мати на увазі, що шукані параметри, відкалібровані завдяки інформації для ядер легких елементів, виявляються, взагалі кажучи, мало коректними для використання щодо важких атомних систем.

Крім того, варто мати на увазі й відомий ефект так званого нейтронного гало. Мова йде про те, що через кулонівський бар'єр густина протонів спадає на периферії ядра (ядерна стратосфера) швидше, ніж густина нейтронів, а у важких ядрах поглинання каонів відбувається саме на периферії.

## 4.6 Результати розрахунків енергетичних та спектроскопічних параметрів каонних атомів

### 4.6.1 Спектр каонного азоту. Надтонка структура та ймовірності радіаційних переходів

Каонний атом азоту ( $^{14}\text{N}$ ) належить до легких КА. Його дослідження представляє великий інтерес, перш за все, з точки зору розробки нових стандартів рентгенівського випромінювання. В якості моделі розподілу заряду в ядрі ми використали модель рівномірно зарядженої кулі, модель Гауса та модель Фермі [281, 291, 295].

Детально досліджено також вплив вибору потенціалу, що описує вплив поляризації вакууму на енергетичні параметри КА. Для врахування радіаційних ефектів використано радіаційний потенціал FGPR типу Flambaum-Ginges. Також було враховано релятивістські КЕД-поправки вищих порядків, у тому числі релятивістську поправку на віддачу.

У таблиці 4.1 представлені результати розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) для енергії переходу  $8k-7i$  спектру каонного азоту: дані розрахунків на основі теорій Indelicato et al. та наші теоретичні дані [43, 50, 51, 295]. Крім того, у таблиці також показано помилку, що спричинена неточністю визначення маси  $K^-$ -каона. Наші значення, що наведені в таблиці 4.1, відповідають гаусовій моделі розподілу заряду в ядрі азоту.

За оцінками Indelicato et al. [43, 50], які провели повний розрахунок параметрів поправки на поляризацію вакууму (з урахуванням вищих порядків), шуканий внесок становить 0,01 eV.

Аналіз даних показує, що використання радіаційного потенціалу FGPR типу Flambaum-Ginges виявляється більш ефективним у порівнянні зі стандартним наближенням Юлінга-Сербера, його можна ефективно використовувати для розрахунку як звичайних (суто багатоелектронних), так і екзотичних атомних систем.

Таблиця 4.1 - Внесок енергії (в еВ) до енергії переходу 8k-7i у спектрі каонного азоту

Внески	8k-7i, Теорія [43,50]	8k-7i Теорія [51]	8k-7i Наша теорія
Кулонівський внесок	2968.4565	2968.4492	2968.4532
Поляризація вакууму	1.1789	1.1778	1.1784
Релятивістський ефект віддачі	0.0025	0.0025	0.0025
Надтонкий зсув	-0.0006	-0.0007	-0.0006
Повна енергія	2969.6373	2969.6288	2969.634
Помилка	0.096	0.096	0.096

З іншого боку, для атомів з малим зарядом ядра шуканий внесок поправки на поляризацію вакууму залишається незначним. Зі збільшенням ядерного заряду при переході до важких каонних атомів цей внесок значно зростає. Формалізм теорії збуджень для оцінки поправки на поляризацію вакууму (з урахуванням вищих порядків) з точки зору елементів для  $Z\alpha$ , безумовно, перестає бути правильним, і тут потрібен непертурбативний підхід.

У таблиці 4.2 представлено результати розрахунку енергій (в еВ) переходів між компонентами надтонкої структури 8k-7i в спектрі каонного азоту: 1) теоретичні дані, що отримані в рамках теорії Inelicato et al. [43, 50] та 2) наш теоретичний підхід.

Таблиця 4.2 - Енергії (в еВ) переходів між компонентами надтонкої структури 8k-7i в спектрі каонного азоту

F-F'	$\Delta E$ , Теорія [43, 50]	$\Delta E$ , Наша теорія
8-7	2969.6365	2969.6289
7-6	2969.6383	2969.6298
7-7	2969.6347	2969.6264
6-5	2969.6398	2969.6345
6-6	2969.6367	2969.6284
6-7	2969.6332	2969.6248

Аналогічно в таблиці 4.3 представлені результати розрахунку ймовірностей  $A$  (в  $10^{13} \text{ c}^{-1}$ ) переходів між компонентами надтонкої структури  $8k-7i$  у спектрі каонного азоту: 1) теоретичні дані, що отримані на основі розрахунку в рамках теорії Indelicato et al. [43-50, 51] з використанням теорії Клейна-Гордона-Фока та стандартного радіаційного потенціалу Юлінга-Сербера та дані, отримані на основі нашого теоретичного підходу.

Таблиця 4.3 - Імовірності  $A$  ( $10^{13} \text{ c}^{-1}$ ) переходів між компонентами надтонкої структури  $8k-7i$  у спектрі каонного азоту

F-F'	A Теорія [43,50]	A Теорія [51]	A Наша теорія
8-7	$1.54 \times 10^{13}$	$1.51 \times 10^{13}$	$1.50 \times 10^{13}$
7-6	$1.33 \times 10^{13}$	$1.32 \times 10^{13}$	$1.31 \times 10^{13}$
7-7	$1.31 \times 10^{13}$	$1.29 \times 10^{13}$	$1.28 \times 10^{13}$
6-5	$1.15 \times 10^{13}$	$1.12 \times 10^{13}$	$1.11 \times 10^{13}$
6-6	$0.03 \times 10^{13}$	$0.02 \times 10^{13}$	$0.02 \times 10^{13}$
6-7	-	-	$0.005 \times 10^{13}$

Аналіз представлених даних показує, в принципі, розумну узгодженість між результатами обох теорій. Слід зазначити, що радіаційні поправки враховуються в нашій теорії в рамках комбінованого узагальненого підходу і методу Юлінга-Сербера [295, 402].

З одного боку це пояснює різницю в результатах, з іншого боку, на даний момент отримані нами дані слід вважати найбільш точними. Те саме стосується аналізу отриманих значень ймовірностей переходів між компонентами надтонкої структури  $8k-7i$  у спектрі каонного азоту.

Розглянуті переходи в спектрі каонного азоту фактично належать до так званих рідбергівських переходів, які значною мірою демонструють водневоподібні властивості.

Хоча слід мати на увазі, що для деяких високозбуджених рідбергівських станів у випадку наявності багатоелектронного остову атомної системи досить великий вплив може мати ефекти некуловніського



групування. Але в нашому випадку цього нема, й тому результати різних теорій таких переходів, як правило, добре узгоджуються між собою.

У таблиці 4.4 наведені результати нашого розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) щодо енергії переходу  $8i-7h$  в спектрі каонного азоту.

Таблиця 4.4 - Внесок енергії (в eV) до енергії переходу  $8i-7h$  в спектрі каонного азоту

Внески	$8i-7h$ Наша теорія
Кулонівський внесок	2968.5356
Поляризація вакууму	1.8762
Релятивістський ефект віддачі	0.0025
Надтонкий зсув	-0.0008
Помилка	0.097

Відповідні значення для вакуум-поляризаційної поправки отримані на основі моделі радіаційного потенціалу радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges.

Аналіз показує, що використання радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges виявляється більш ефективним у порівнянні зі стандартним наближенням Юлінга-Сербера. Наведені у таблиці вище дані отримані з використанням моделі Фермі розподілу заряду в ядрі.

Подібно до даних, що наведені вище в таблиці 4.1, помилка, що вказується в таблиці 4.4, виникла через неточність визначення маси каону.

Далі, в таблиці 4.5 представлені результати нашого розрахунку енергій (в eV) переходів між компонентами надтонкої структури  $8i-7h$  у спектрі каонного азоту.

Таблиця 4.5 - Енергії (в еВ) переходів між компонентами надтонкої структури  $8i-7h$  в спектрі каонного азоту

F-F'	$\Delta E$ , Наша теорія
7-6	2970.4111
6-5	2970.4138
6-6	2970.4089
5-4	2970.4196
5-5	2970.4116
5-6	2970.4075

Відповідно, у таблицях 4.6 та 4.7 представлені результати нашого розрахунку ймовірностей  $A$  (in  $10^{13} \text{ c}^{-1}$ ) переходів між компонентами надтонкої структури  $8i-7h$  та  $7h-6g$  у спектрі каонного азоту.

Таблиця 4.6 - Ймовірності  $A$  ( $10^{13} \text{ c}^{-1}$ ) переходів між компонентами надтонкої структури  $8i-7h$  у спектрі каонного азоту

F-F'	$P$ , Наша теорія
7-6	$1.14 \times 10^{13}$
6-5	$0.97 \times 10^{13}$
6-6	$0.93 \times 10^{13}$
5-4	$0.79 \times 10^{13}$
5-5	$0.02 \times 10^{13}$
5-6	$0.004 \times 10^{13}$

Таблиця 4.7 - Ймовірності  $A$  ( $10^{13} \text{ c}^{-1}$ ) переходів між компонентами надтонкої структури  $7h-6g$  у спектрі каонного азоту

F-F'	$P$ , Наша теорія
6-5	$0.81 \times 10^{13}$
6-6	$0.74 \times 10^{13}$
5-4	$0.41 \times 10^{13}$
5-5	$0.01 \times 10^{13}$
5-6	$0.0008 \times 10^{13}$

4.6.2 Спектроскопія важких каонних атомів  $^{184}\text{W}$ ,  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{238}\text{U}$  :  
Енергетичні внески радіаційних поправок, поправок за рахунок наявності електронних оболонок

Каонний атом свинцю ( $^{207}\text{Pb}$ ) відноситься до важких каонних атомів і викликає значний теоретичний інтерес, перш за все, з теоретичної точки зору, оскільки дає відмінну можливість для тестування коректного урахування радіаційних поправок та авжеж ефектів, обумовлених сильною каон-ядерною взаємодією, які надто важливі особливо для нижніх станів в спектрі.

У випадку переходів між високо розташованими станами навпаки ефектів, обумовлених сильною каон-ядерною взаємодією, різко зменшується з очевидних фізичних причин.

В останньому випадку є можливість тестування коректності “електромагнітної” частини відповідної теорії.

На основі розвинутого у розділі 2 формалізму релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим нульовим наближенням ODF [250-251] ми провели дослідження внеску в енергетичні характеристики важких каонних атомів (на прикладі свинцю) наявності багатоелектронної оболонки (в каскадних процесах за участю негативного каону частина електронів залишає атомну систему, але певна частина зберігається в оболонках), а також незначного внеску за рахунок міжчастинкових кореляцій. Використана методика докладно описана в розділі 2.

У таблиці 4.8 надані значення внеску в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в каонному атомі свинцю Pb внаслідок наявності двох ([He]), чотирьох ([Be]), десяти ([Ne]) вісімнадцяти ([Ar]) електронів:

- (a) – дані розрахунку методом DF Indelicato et al. [51, 53],
- (b) – дані теорії з використанням наближення DKS Khetselius et al.,
- (c) – наша теорія.

Таблиця 4.8 - Внесок в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в КА Pb, що обумовлений наявністю двох ([He]), чотирьох ([Be]), десяти ([Ne]) електронів: (a) – дані розрахунку методом DF Indelicato et al. [51, 53], (b) – дані теорії DKS Khetselius et al., (c) – наша теорія

Метод	[He]	[Be]	[Ne]	[Ar]
(a)	-40.917	-47.419	-47.484	-
(b)	-39.345	-45.286	-45.172	-
(c)	-39.682	-46.983	-47.025	-53.986

Слід зазначити, що не дивлячись на відносно невеликі значення відповідних поправок, тем не менш, вони фактично перевершують величину, обумовлену невизначеністю експерименту й, таким чином, в прецизійній теорії їх урахування виявляється принципово важливим.

Отже, при каскадних процесах за участю каона в атомній системі ці електрони виживають в атомі. Таким чином, їх урахування в загальному розгляді є правомірним.

Стосовно внеску, обумовленого міжчастинковими кореляціями, слід зазначити, що цей внесок в енергію переходу має порядок не більше десятка еВ й, таким чином, його урахування представляється доречним лише в надто прецизійній теорії та при істотному збільшенні точності вимірювань.

У таблиці 4.9 наведені енергетичні внески (в кеВ) в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного атому свинцю: дані теорій Indelicato et al., Cheng et al., Kunzelman et al. (каскадні моделі), Khetselius et al. (модель на основі рівняння Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uhling-Serber), а також нашої теорії; експеримент – Cheng et al. [41, 46, 51, 53].

Таблиця 4.9 - Енергетичні внески (в кеВ) в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного атому свинцю: дані теорії Indelicato et al., Cheng et al., Kunzelman et al. (каскадні моделі), Khetselius et al (модель на основі рівняння Klein-Gordon-Fock), дані нашої теорії; експеримент – Cheng et al. [41, 46, 51, 53]

Внески в енергію переходу	Indelicato et al.	Kunzelman et al.	Khetselius et al.	Cheng et al.	Our data
Кулонівський вклад	116.5666	116.600	116.5644	116.575	116.5658
Поляризація вакуума	0.4134	0.410	0.4067	0,412	0.4138
$\alpha(Z\alpha)$	0.4203	-	-	0.421	0.4209
$\alpha(Z\alpha)^3 + \alpha^2(Z\alpha)$	-0.0069	-	-	-0.009	-0.0071
Поправка на віддачу + інші	0.0004	-0.050	-0.0126	-0.044	-0.0022
Сума:	116.9804	116.960	116.9585	116.943	116.9774
Експ.	-	-	-	116.952(10)	-

Різниця в методах обчислення величин енергетичних внесків в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного свинцю (зокрема в межах теорій Indelicato et al., Cheng et al., Kunzelman et al., Khetselius et al. й нашої) обумовлена, по-перше, використанням різних процедур урахування радіаційних, релятивістських та інших поправок, по-друге, використанням різних потенціалів самоузгодженого поля, й авжеж різних моделей для розподілу заряду в ядрі атому.

Загальний висновок полягає у тому, що для досягнення фізично розумної згоди між теорією та експериментом дуже важливо використовувати ефективні послідовні й кількісно прецизійні процедури перелічених вище ефектів.

Й хоча, як видно з таблиці 4.8, найбільший внесок в енергію переходу природно визначається основним електромагнітним

кулонівським членом, в той же час, внесок радіаційних КЕД поправок, зокрема, поправки на поляризацію вакууму (з урахуванням вищих порядків), включаючи радіаційні поправки на віддачу та ін. (див. розділ 2), є суттєвим для прецизійного визначення відповідної енергії переходу.

Більш того, ефективне урахування поправки на сильну каон-ядерну взаємодію дає фінальне значення енергії переходу 116.9592, що в принципі достатньо добре узгоджується з експериментальним значення.

Але, зазначимо, що для нас більш важливою метою була розробка ефективної моделі урахування радіаційних поправок в релятивістській теорії спектрів важких каонних атомів.

В таблиці 4.10 наведені результати розрахунку енергій  $E_c$  (в кеВ) різних рентгенівських переходів  $(n, l = n - 1) \rightarrow (n - 1, l = n - 2)$  в атомі свинцю  $K^{-207}\text{Pb}$ :

- (a) – дані теорій Indelicato et al.;
- (b) – Cheng et al., Kunzelman et al. (каскадні моделі),
- (c) – Khetselius et al (модель на основі рівняння Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uhling-Serber),
- (d) – дані нашої теорії (з урахуванням поправки на сильну взаємодію);

$E_{\text{exp}}(E_m)$  – експериментальні дані – Cheng et al., Kunzelman et al. [41, 46, 51, 53].

Аналіз всіх наведених в таблиці даних дозволяє заключити, що теоретичні та експериментальні дані (останні мають відносно величезну розбіжність) знаходяться у розумному узгодженні, в той же час, є очевидною необхідність подальших більш прецизійних експериментальних досліджень даного важкого каонного атому. Авжеж одночасне коректне урахування релятивістських, радіаційних, ядерних ефектів є принципово необхідним для отримання прецизійних теоретичних даних.

Нижче ми представляємо деякі важливі результати наших розрахунків енергетичних та спектроскопічних характеристик важких каонних атомів  $^{184}\text{W}$ ,  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{238}\text{U}$ .

У таблиці 4.11 наведені теоретичні ( $E_{\text{th}}$ ) та експериментальні ( $E_{\text{exp}}$ ) енергії рентгенівського випромінювання для вказаних важких каонних атомних систем.

Таблиця 4.10 - Енергії  $E_c$  (кеВ) рентгенівських переходів  $(n, l = n - 1) \rightarrow (n - 1, l = n - 2)$  в  $^{207}\text{Pb}$ : а) – дані теорій Indelicato et al.; (b) – Cheng et al., Kunzelman et al. (каскадні моделі); (c) – Khetselius et al. (модель Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uhling-Serber); (d) – дані нашої теорії (верхнє число – чисто електромагнітні дані, нижнє – з урахуванням поправки на сильну взаємодію); Exp ( $E_m$ ) – експеримент: Cheng, Kunzelman et al [41, 46, 51, 53]

Перехід $n_i \rightarrow n_f$	$E_c$ (a)	$E_c$ (b)	$E_c$ (c)	$E_c$ (d)	$(E_m)$ Exp
9 → 8	291.626	291.621 291.59	291.5952	291.6197 291.5688	291.577 (13) 291.74 (21)
10 → 9	208.298	208.280 208.34	208.2671	208.2939 208.2512	208.252 (8) 208.69 (21)
11 → 10	153.944	153.916 153.94	153.9013	153.9398 153.9003	153.892 (11)
12 → 11	116.9804	116.943 116.960	116,9585	116.9774 116.9592	116.952 (10)
13 → 12	90.970	90.924	90.93375	90.9668 90.9548	90.929 (15)

Таблиця 4.11 - Теоретичні ( $E_{th}$ ) та Експериментальні ( $E_{exp}$ ) значення енергії рентгенівського випромінювання каонних атомів (в кеВ): (a), (b) – теоретичні дані Batty et al. з використанням найпростішої каскадної моделі Фермі-Теллера [40, 45] та Леон-Секі [11], (c) – результати Indelicato et al. [43], (d) – результати Khetselius et al. (модель Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uhling-Serber, EM4), (e) – дані нашої теорії

КА	Tran- sition	$E_{th}$ (a)	$E_{th}$ (b)	$E_{th}$ (c)	$E_{th}$ (d)	$E_{th}$ (e)	$E_{exp}$ [41,45]
W	8-7	346.54	-	346.571	346.586	346.598	346.624(25)
Pb	8-7	426.15	426.201	426.180	426.175	426.195	426.221(57)
U	8-7	538.72	538.013	537.440	538.520	538.472	538.315(100)

## 4.7 Висновки до розділу 4

Основні результати і висновки даного розділу зводяться до наступного:

1. Розвинуто новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних характеристик важких каонних атомних систем на основі рівняння Клейна-Гордона-Фока з одночасним урахуванням електромагнітної та сильної каон-ядерної взаємодій з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу.

2. В теоретичній спектроскопії важких каонних атомів розвинуті нові процедури прецизійного урахування всієї сукупності релятивістських, ядерних ефектів (у т.ч. ефект Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow), радіаційних КЕД поправок (зокрема, поправка на поляризацію вакууму, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки вищих порядків, у тому числі, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ,  $n=3$ ), а також ефектів екранування за рахунок наявності електронних оболонок в рамках формалізму комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock нульовим наближенням, а також релятивістського енергетичного підходу.

3. Показано, що ефективний потенціал рівняння Клейна-Гордона-Фока складається з суми: релятивістського кулонівського потенціалу, що описує взаємодію каону з ядром з урахуванням скінченного розміру ядра (було використано моделі Гауса і Фермі розподілу заряду в ядрі), узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges, який враховує ефект поляризації вакууму, самоузгодженого потенціалу внутрішніх електронних оболонок для урахування ефектів екранування.

4. З метою тестування нової релятивістської теорії наведені результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик різних каонних атомів, зокрема, наведені дані розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також, відповідно, дані розрахунку ймовірностей вказаних радіаційних переходів.

5. Виконані докладні розрахунки різноманітних електромагнітних внесків (основна кулонівська поправка, радіаційні поправки, у т.ч.



поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та інші) в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного свинцю, проведено порівняння з альтернативним підходами. Показано, що найбільший внесок в енергію переходу визначається основним кулонівським членом, а внесок радіаційних поправок, зокрема, поправки за рахунок поляризації вакууму (включаючи вищі порядки) суттєво впливає на точність визначення відповідної енергії переходу.

6. З метою отримання нової інформації про важкі каонні атоми, а також тестування нової релятивістської теорії виконані докладні розрахунки енергетичних та спектроскопічних характеристик важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану  $^{238}\text{U}$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії; проведено порівняння з експериментальними та альтернативними теоретичними даними, зокрема, отриманими з використанням найпростішої каскадної моделі Fermi-Teller з використанням коду Leon-Seki, послідовних теоретичних методів Batty et al., Indelicato et al. та Khetselius et al.; показано, що для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією та експериментом дуже важливо використовувати ефективні послідовні й кількісно прецизійні процедури перелічених вище релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів.

Основні наукові результати, викладені в даному розділі, опубліковано в роботах: [247-253, 271, 281, 283, 287, 289, 291, 295].

**РОЗДІЛ 5**  
**ЕЛЕКТРОННО- $\beta$ -ЯДЕРНА СПЕКТРОСКОПІЯ АТОМНИХ**  
**СИСТЕМ:**  
**ПІДХІД НА ОСНОВІ БАГАТОЧАСТИНКОВОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ З**  
**ОПТИМІЗОВАНИМ ДІРАК-ФОКІВСЬКИМ НАБЛИЖЕННЯМ**  
**ДО РОЗРАХУНКУ ПАРАМЕТРІВ  $\beta$ -РОЗПАДУ**

**5.1 Сучасні концепції фізичної природи ядерного  $\beta$ -розпаду**

В цьому розділі розвинутий нами новий формалізм релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF адаптовано для до розрахунку характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем (ядер). Важливими особливостями нового підходу є коректне одночасне урахування релятивістських, ядерних, радіаційних та обмінно-кореляційних поправок.

У рамках представленої теорії проведено розрахунки характеристик цілого ряду дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів, а саме для  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  розпадів. До електронної підсистеми запропоновано використовувати ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF, а для ядерної підсистеми – ядерну релятивістську модель середнього поля. Враховано всі кореляційні поправки другого порядку та домінуючих класів діаграм вищих порядків.

Досліджено вплив хімічного середовища атома на характеристики (інтегральна функція Фермі, період напіввиведення) бета-переходів. Представлені результати точного розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду, які порівняно з альтернативними теоретичними даними, та результати обчислення функції Фермі в теорії  $\beta$ -розпаду з різними визначеннями цієї функції.

Обчислено вплив вибору типу атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також вплив урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функцій Фермі та інтегральних функцій Фермі. Проведено аналіз та порівняння отриманих даних з наявними в літературі.

Має сенс нагадати, що, як відомо, ядерний  $\beta$ -розпад – це прояв фундаментальної слабкої взаємодії елементарних частинок (див.,

наприклад, [401-457]). Відповідно до сучасних концепцій, бета-розпад відбувається за рахунок перетворень кварків: при  $\beta^-$ -розпаді один d-кварк нуклона перетворюється на u-кварк, при  $\beta^+$ -розпаді відбувається зворотне перетворення.

Основними квантами слабкої взаємодії є так звані проміжні бозони – частинки великої маси: 81,8 ( $W^\pm$ ) та 91,2 ( $Z^0$ ) Гев /  $c^2$ . Вони були відкриті в 1983 році в Європейському центрі ядерних досліджень (CERN, Швейцарія). Слабка взаємодія, що обумовлена великими значеннями мас віртуальних проміжних бозонів  $W^\pm$  та  $Z^0$ , по суті, є короткочасною.

Радіус  $R$  дії слабких сил, який характеризується часом (непостереження)  $\Delta t$  порушення закону збереження енергії на величину енергії  $\Delta E = mc^2$  (енергія віртуального бозону, який є носієм усіх типів взаємодій між частинками), можна легко оцінити, як:

$$R_{W,Z} = \frac{\hbar c}{M_{W,Z} \cdot c^2} \cong \frac{200 \text{ МеВ} \cdot \text{фм}}{100 \cdot 10^3 \text{ МеВ}} \cong 2 \cdot 10^{-3} \text{ фм}, \quad (5.1)$$

де  $\Delta E \approx M_W c^2 \approx M_Z c^2 \approx 100$  Гев.

Слабка взаємодія – це єдина взаємодія, в якій може змінюватися, як електричний заряд ферміонів, так і їх аромат. Зміна заряду ферміонів зумовлена наявністю електричного заряду у квантах  $W^\pm$  поля. Класична теорія слабкої взаємодії розглядала лише процеси зі зміною заряду, такі як  $\beta$ - та  $\mu$ -розпади (рис. 5.1).

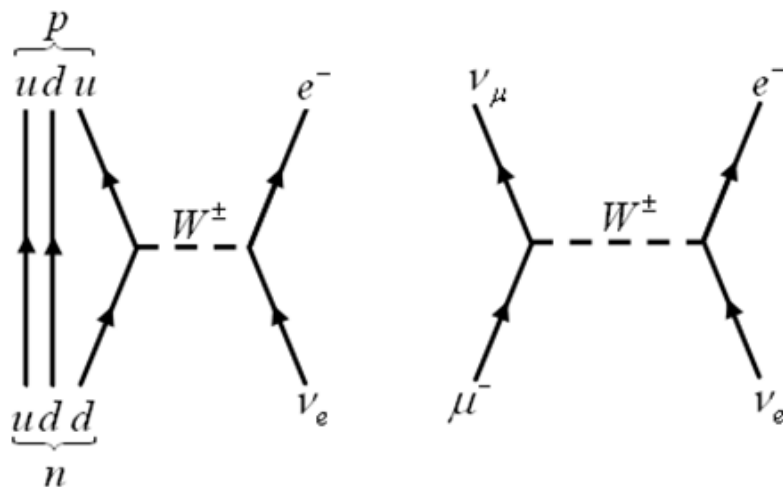


Рисунок 5.1 - Діаграми Фейнмана для  $\beta$ - та  $\mu$ -розпадів

У сучасній теорії слабкої взаємодії Вайнберга-Глешоу-Салама, яка поєднує слабкі та електромагнітні взаємодії, крім заряджених W-бозонів, існує також нейтральний  $Z^0$ -бозон. Це відповідає протіканню процесів, в яких електричний заряд ферміонів не змінюється. Звичайно, тут мова йде про нейтральні струми, які дають внесок, наприклад, у  $\nu_e e$ -розсіювання (рис. 5.2).

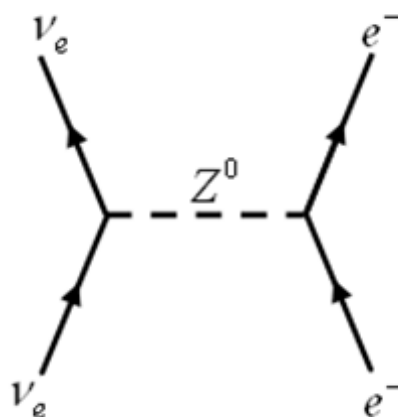
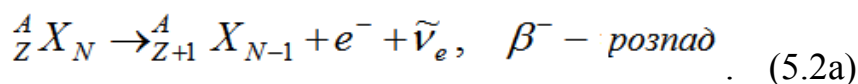


Рисунок 5.2 - Внесок нейтральних струмів у  $\nu_e e$ -розсіювання

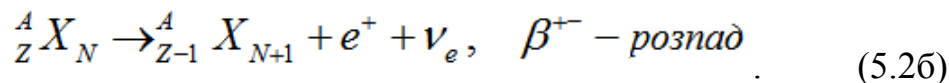
Далі для подальшого розгляду корисно нагадати загальновідомі стандартні дані щодо видів бета розпаду, які досить докладно викладені у багатьох монографічних виданнях (див., наприклад, [247, 284, 285, 402-405]).

При електронному ( $\beta^-$ ) розпаді один з нейтронів ядра перетворюється на протон з випромінюванням електрона та електронного антинейтрино  $\tilde{\nu}_e$  :

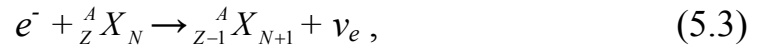


Тут  $A$  – масове число,  $Z$  – заряд ядра,  $N$  – число нейтронів.

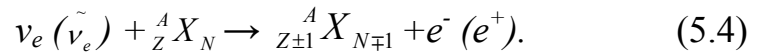
При позитронному ( $\beta^+$ ) розпаді один з протонів ядра перетворюється на нейтрон з випромінюванням позитрона та електронного нейтрино  $\nu_e$ :



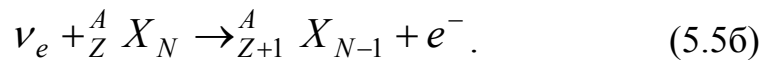
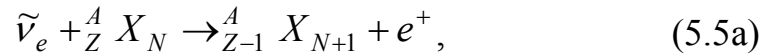
З бета-розпадом тісно пов'язані так звані зворотні  $\beta$ -процеси: захоплення електрона з  $K$ -оболонки атома ( $K$ -захоплення) або з меншою ймовірністю його захоплення з  $L$ - та інших оболонок (електронне захоплення):



а також зворотний  $\beta$ -розпад:



Ці процеси пов'язані з нейтринними процесами:



Очевидно, якщо не брати до уваги структуру ядра, то на рівні нуклонних процесів, описані вище переходи фактично є:



$\beta$ -розпад ядер можливий у тому випадку, коли різниця між масами початкового  $N$  та кінцевого  $N'$ -ядер перетворює суму мас електрона  $m_e$  та нейтрино  $m_\nu$ .

Енергетичні умови для  $\beta^-$ ,  $\beta^+$ -розпадів та електронного захоплення різняться.

Далі дамо відповідні співвідношення для визначення енергій розпаду для різних каналів відповідного процесу (див., наприклад, такі роботи як [247, 402-405]):

1).  $\beta^-$ -розпад. Енергія  $\beta^-$ -розпаду  $Q_{\beta^-}$  має вигляд:

$$\begin{aligned} Q_{\beta^-} &= [m(Z, A) - Zm_e]c^2 - [(m(Z + 1, A) - (Z + 1)m_e + m_e)]c^2 = \\ &= [m(Z, A) - m(Z + 1, A)]c^2. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Так звана величина  $Q_{\beta^-}$  у  $\beta^-$ -розпаді відповідає різниці мас батьківського та дочірнього атомів.

2)  $\beta^+$ -розпад. Подібним чином для  $\beta^+$ -розпаду запишемо:

$$\begin{aligned} Q_{EC} &= [m(Z, A) - Zm_e]c^2 + mc^2 - [m(Z - 1, A) - (Z - 1)m_e]c^2 = \\ &= [m(Z, A) - m(Z - 1, A)]c^2. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Оскільки враховуються атомні маси, треба також взяти до уваги енергію спокою електрона та позитрона.

3) Електронне захоплення (*Electron capture EC*). При електронному захопленні маємо:

$$\begin{aligned} Q_{EC} &= [m(Z, A) - Zm_e]c^2 + mc^2 - [m(Z - 1, A) - (Z - 1)m_e]c^2 = \\ &= [m(Z, A) - m(Z - 1, A)]c^2. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Для того, щоб відбувся  $\beta$ -перехід, відповідна величина  $Q$  повинна задовольняти умові:

$$Q_i > 0, \quad i = \beta^-, \beta^+, EC. \quad (5.10)$$

Як бачимо, електронне захоплення з енергетичної точки зору має більше переваг, ніж  $\beta^+$ -розпад:

$$Q_{\beta^+} = Q_{EC} - 2m_e c^2. \quad (5.11)$$

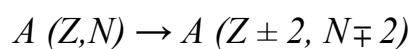
Варто нагадати, що процес  $\beta$ -розпаду можливий у тому випадку, коли різниця між масами початкового  $N$  та скінченного  $N'$  -ядер перетворює суму мас електрона  $m_e$  та нейтрино  $m_\nu$ .

Енергетичні умови для  $\beta^-$ ,  $\beta^+$ -розпадів та електронного захоплення різняться.

Треба розуміти, що у багатьох випадках в результаті  $\beta$ -переходу замість основного стану дочірнього ядра формується його збуджений стан. Збуджене ядро, як правило, переходить у основний стан за рахунок випромінювання  $\gamma$  -квантів або збуджених електронів. Якщо енергія збудження перевищує енергію зв'язку нейтрона або бар'єр ділення, то може відбуватися  $\beta$ -уповільнене випромінювання нейтрона (протона) або  $\beta$ -затримане ділення ядра.

Ці процеси дуже важливі для фізики реакторів (запізнілих нейтронів), а також синтезу важких елементів у Всесвіті тощо [401-422].

Коли енергетично можливим є  $\beta^+$ -розпад, виникає вірогідність електронного захоплення. У деяких випадках може статися так званий подвійний бета-розпад:



із випромінюванням двох  $\beta$ -частинок і нейтринної пари, або без випромінювання нейтрино.

Енергія, що виділяється під час  $\beta$ -розпаду, розподіляється між електроном, нейтрино та скінченим ядром, але переважна частина припадає на легкі частинки. Тому спектр випромінюваних  $\beta$ -частинок є безперервним, при цьому їх кінетична енергія приймає значення від 0 до певної граничної енергії  $E_0$ , яка визначається співвідношенням [402-405]:

$$E_0 / c^2 = M (A,Z) - M (A, Z+1) - m_e - m_\nu, \quad (5.12)$$

де  $M$  – маси початкового та скінченного ядер.

Основи теорії бета-розпаду були створені Е. Фермі в 1934 р., який виходив із 4-ферміонної взаємодії нуклонів та лептонів за аналогією з ефективною електрон-нуклонною взаємодією в електродинаміці. При цьому важливо, щоб, на відміну від електромагнітної взаємодії, яка є далеко діючою, 4-ферміонна взаємодія Фермі була контактною

(локальною). Гамільтоніан нуклон-лептонної взаємодії Фермі можна записати у вигляді [401,403]:

$$H_{\beta} = G_{\beta} (\bar{\psi}_p \gamma_{\mu} \psi_n) (\bar{\psi}_e \gamma^{\mu} \psi_{\nu}). \quad (5.13)$$

де  $G_{\beta}$  – константа взаємодії (постійна Фермі);

$\Psi$  – 4-компонентні хвильові функції взаємодіючих частинок, які задовольняють рівнянню Дірака;

$\bar{\psi}_e = \Psi + \gamma_0$  – спряжені хвильові функції;

$\gamma^{\mu}$  – діраківські матриці,  $\mu=0,1,2,3,4$ ;

$\gamma^0 = \gamma_0$ ;

$\gamma^i = -\gamma_i$  ( $i=1,2,3$ ).

В оригінальній версії теорії Фермі нуклон-лептонна взаємодія мала суто векторну форму. Пізніше стало ясно, що гамільтоніан слабкої взаємодії може бути комбінацією релятивістсько-інваріантних складових, що утворені зі скаляра (S), псевдоскаляра (P), вектору (V), аксіального вектору (A) та тензора (T).

Відкриття властивості незбереження просторової парності, дослідження кореляційних зв'язків між напрямками випромінювання  $\beta$ -частинок та нейтрино при  $\beta$ -розпаді ядер  $^{35}\text{A}$  та  $^6\text{He}$ , а також кутового розподілу електронів та нейтрино при розпаді поляризованих нейтронів показали, що у  $\beta$ -розпаді в основному реалізується V–A-варіант.

Ефективний гамільтоніан  $\beta$ -розпаду, який був запропонований Р.Ф. Фейнманом та М. Гелл-Манном у 1958 р., в сучасних обчисленнях використовується у наступному вигляді:

$$H_{\beta} = \frac{G_{\beta}}{\sqrt{2}} J^{\mu}(x) L_{\mu}(x) + \text{h.c.}, \quad (5.14)$$

де h.c. – це ермітові сполучені члени;

$J^{\mu}$  – нуклонний струм;

$L_{\mu}$  – лептонний струм;

$x$  – просторово-часова координата;

$G_{\beta} = G_{\mu} \cdot \cos \vartheta_c$ , де  $G_{\mu}$  – універсальна константа слабкої взаємодії; множник  $\cos \vartheta_c$  реагує на процеси без зміни незвичайності ( $\vartheta_c$  – так званий кут Кабіббо); постійна  $G_{\beta} = 1,40 \cdot 10^{-49}$  ерг·см<sup>3</sup> була знайдена



експериментально.

Лептонний струм  $L_\mu$ , який є комбінацією V–A-складових з однаковими вагами, можна виразити через хвильові функції електрона та нейтрино:

$$L_\mu(x) = \bar{\psi}_e(x) \gamma^\mu (1 + \gamma_5) \psi_\nu, \quad (5.15)$$

де  $\gamma_5 = i \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3$ .

Нуклонний струм  $J^\mu$  також є комбінацією векторної та аксіально-векторної складових:

$$J^\mu = V^\mu(x) - A^\mu(x). \quad (5.16)$$

Він не може бути записаний у явному вигляді через хвильові функції нуклонів, проте матричні елементи від  $V^\mu$  та  $A^\mu$  між нуклонними станами, які визначають характеристики бета-розпаду, можуть бути виражені через невелику кількість констант зв'язку  $g_V$ ,  $g_M$ ,  $g_S$ ,  $g_P$ ,  $g_T$  (див., наприклад, такі роботи як [247, 282, 297, 402-405]):

$$\langle N' | V^\pm(0) | N \rangle = \bar{U}_{N'} [ g_V(q^2) \gamma_\mu + \frac{g_M(q^2)}{2Mc} \sigma_{\mu\nu} q^\nu + g_S(q^2) q_\mu ] \tau^\pm U_N, \quad (5.17a)$$

$$\langle N' | A_\mu^\pm(0) | N \rangle = \bar{U}_{N'} [ g_A(q^2) \gamma_\mu + g_P(q^2) q_\mu + \frac{g_T(q^2)}{2Mc} \sigma_{\mu\nu} q^\nu ] \gamma_5 \tau^\pm U_N, \quad (5.17b)$$

$$q_\mu = (P_{N'} - P_N)_\mu \quad (5.17b)$$

де  $N, N'$  – початковий і кінцевий нуклони;

$U$  – дираковський біспіно́р (розв'язок вільного рівняння Дірака);

$\tau^\pm$  – збільшуючий та зменшуючий ізоспінні оператори, що перетворюють нейтрон у протон та протон у нейтрон;

$\sigma_{\nu\mu} = 1/2 (\gamma_\nu \gamma_\mu - \gamma_\mu \gamma_\nu)$ ;  $N = 0, 1, 2, 3$ ;

$q_\mu$  – переданий 4-й імпульс;

$P_{N'}$  та  $P_N$  – імпульси початкового та кінцевого станів нуклона.

З гіпотези збереження векторного струму випливає, що (див., наприклад, [247, 282, 297, 402-405]):

$$\begin{aligned}
g_V &\equiv g_V(0) = 1, \\
g_S(q^2) &= 0, \\
g_M(0) &= \mu_p - \mu_n = 3,70,
\end{aligned}$$

де  $\mu_p, \mu_n$  – аномальні магнітні моменти протона та нейтрона в одиницях ядерного магнітону.

Експериментальні дослідження  $\beta$ -розпаду ядер підтвердили гіпотезу збереження векторного струму та отримали обмеження на константу  $g_T$ , яка характеризує аксіальний струм другого роду:

$$|g_T / g_A| \leq 10^{-4}.$$

Енергії, що виділяються під час  $\beta$ -розпаду, є малими у порівнянні з  $m_N c^2$  ( $m_N$  – маса нуклона), отже, слід вважати, що переданий 4-й імпульс  $q_M$  дорівнює нулю. Тоді одноядерний гамільтоніан  $H_\beta$  буде мати наступний вигляд:

$$H_\beta = \frac{G_\beta}{\sqrt{2}} \{g_V (1L_0 - \alpha L) - g_A (\gamma_5 L_0 - \sigma L_0)\} \tau^\pm. \quad (5.18)$$

У (5.18)  $g_V$  та  $g_A$  – векторні та осьові константи нуклон-лептонової взаємодії,  $L$  – одиничний оператор;

$\alpha = \gamma_0 \gamma$  – матриці Дірака;

$\sigma = -\gamma_0 \gamma \gamma_5$  – спінові матриці Паулі.

В результаті ефективний гамільтоніан  $\beta$ -розпаду може бути визначений двома константами зв'язку – векторною  $g_V$  та аксіально-векторною  $g_A$ .

Подальший розвиток теорії призвів до створення єдиної теорії слабких та електромагнітних взаємодій (у подальшому – до Стандартної моделі), однак існування проміжних бозонів практично не впливає на теорію бета-розпаду через малу енергію  $E \leq 10$  MeV у порівнянні з  $m_W c^2$ .

З цієї причини теорія електрослабких взаємодій для  $\beta$ -розпаду фактично зводиться до теорії Фейнмана та Гелл-Манна [401-406].

## 5.2 Основні характеристики $\beta$ -розпаду. Класифікація $\beta$ -переходів. Правила відбору

Як відомо, до основних характеристик  $\beta$ -розпаду належать період напіврозпаду  $T_{1/2}$ , форма  $\beta$ -спектрів,  $\beta^\pm$ - $\gamma$ -кутові кореляції тощо. Аналіз значень  $fT_{1/2}$  разом із врахуванням правил відбору (див. нижче), дозволяє визначити шукані значення ядерних спінів і парностей, тобто є одним із важливих методів ядерної спектроскопії [403].

Оскільки значення  $fT_{1/2}$  безпосередньо пов'язані з матричними елементами  $\beta$ -переходів, то з цього випливає, що вони містять інформацію про ядерну структуру.

Для визначення характеристик бета-розпаду спочатку необхідно визначити амплітуду процесу, яка визначається матричним елементом переходу між початковим  $i$  та скінченним  $f$  ядерними станами:

$$M_{fi} = \langle f | H_\beta | i \rangle. \quad (5.19)$$

У разі  $\beta$ -розпаду нуклона шуканий матричний елемент має вигляд:

$$M_{fi} = \int \psi_f^+(r_1, \dots, r_A) H_\beta(r_1, \dots, r_A) \Psi_i(r_1, \dots, r_A) d^3 r_1, \dots, d^3 r_A, \quad (5.20)$$

де ефективний гамільтоніан процесу  $H_\beta$  дорівнює сумі членів, що описують  $\beta$ -розпад окремих нуклонів, з яких складається ядро:

$$H_\beta(r_1, \dots, r_A) = \sum_{i=1}^{i=A} H_\beta^i(r_i), \quad (5.21)$$

де  $r$  – просторова координата нуклонів в ядрі.

Слід підкреслити, що теоретичний опис стосується не лише одностанових переходів.

У хвильових функціях початкового та скінченного станів ядер можна враховувати ефекти багатонуклонної структури, включаючи можливість колективних збуджень ядра [402-420].

Безперечно, в такому наближенні не враховуються так звані міжзонні обмінні струми, що описують випромінювання пари  $e\tilde{\nu}_e$  ( $e^+ \nu_e$ ) віртуальними мезонами, якими обмінюються нуклони в ядрі. Також не

враховується випромінювання лептонної пари нуклонами, яке відбувається внаслідок обміну віртуальними мезонами.

Фактично врахування мезонних обмінних струмів призводить до багаточастковості оператора  $H_\beta$ . Слід також додати, що внесок шуканих мезонних обмінних струмів у  $\beta$ -спектри та періоди напіврозпаду можуть досягати декількох відсотків.

Зв'язок спектру  $\beta$ -частинок з матричним елементом  $M_{fi}$  можна описати за допомогою наступного виразу [247, 404]:

$$N(E) dE = \frac{G_\beta^2}{2\pi^2 c^5 \hbar^7} |M_{fi}|^2 p E (E_0 - E)^2 dE, \quad (5.22)$$

де  $p$  і  $E$  – імпульс та енергія випромінюваної  $\beta$ -частинки.

При виводі виразу (5.11) було зроблено припущення, що  $m_\nu = 0$ , а енергією віддачі скінченного ядра, яка є досить незначною у порівнянні з  $E_0$ , можна знехтувати. Якщо  $M_{fi}$  не залежить від енергії, тоді форма  $\beta$ -спектру визначається лише “статистичним” множителем:

$$N(E) \sim p E (E_0 - E)^2. \quad (5.23)$$

При розрахунку матричних елементів  $M_{fi}$ , як правило, використовуються ряд наближень, а саме [403]:

1) граничні енергії  $E_0$  відносно малі, тому довжини хвиль де Бройля випромінюваних лептонів великі, порівняно з розміром  $R$  ядер:  $pR \ll \hbar$ ,  $qR \ll \hbar$ , отже, хвильові функції лептонів досить незначно змінюються всередині ядра;

2) деякі оператори, що входять до формули для  $H_\beta$ , та які взяті між ядерними станами, мають матричні елементи порядку 1, тоді як інші мають матричні елементи порядку  $v_N / c$ , де  $v_N$  – характерна швидкість нуклона в ядрі.

Для легких та середніх ядер параметр  $Ze^2 \ll \hbar c$ ; при обчисленні  $M_{fi}$ , як правило, використовується розширення цих малих параметрів. Хвильова функція нейтрино  $\Psi_\nu$ , що входить у лептонну частину матричного елемента  $L\mu(r)$ , описується плоскою хвилею, тобто:

$$\Psi_\nu(r) \sim \exp(-iqr / \hbar) \approx 1 - iqr / \hbar - 1/2(qr / \hbar)^2 + \dots \quad (5.24)$$

Оскільки очевидно, що  $qR | \hbar \ll 1$ , то всередині ядра ( $r < R$ ) маємо  $\Psi_\nu(r) \approx \text{const}$  (при інтегруванні по об'єму ядра хвильова функція нейтрино не призводить до залежності  $M_{fi}$  від  $E$ ). У наближенні, коли можна знехтувати взаємодією випромінюваної  $\beta$ -частинки з кулонівськими полями ядра та електронною оболонкою атома, її хвильова функція може бути представлена у вигляді плоскої хвилі, тобто:

$$\Psi_e(r) = \exp(-ipr | \hbar). \quad (5.25)$$

Врахування кулонівських полів ядра та електронної оболонки атома дозволяє встановити різницю між хвильовою функцією та плоскою хвилею; в результаті хвильова функція стає залежною від енергії  $E$  навіть при  $pr | \hbar \ll 1$ . Зауважимо, що спочатку дана обставина ігнорувалась, через що це часто зумовлювало значну помилку при обчисленні характеристик бета-розпаду [404].

Для того, щоб врахувати вплив кулонівської взаємодії випромінюваних  $\beta$ -частинок на їх енергетичний спектр, вводиться так званий кулонівський поправочний фактор, який визначається відомою функцією Фермі  $F(Z, E)$ . Коли  $pr | \hbar \ll 1$ , цей фактор визначається, як квадрат відношення хвильових функцій  $\beta$ -частинки, які обчислюються з врахуванням ( $Z \neq 0$ ) та без врахування ( $Z = 0$ ) кулонівського поля ядра в центрі ( $r = 0$ ) або на периферії ( $r = R$ ) ядра [247, 401-405, 412, 413], тобто:

$$F(Z, E) = | \Psi_e |^2_z / | \Psi_e |^2_0. \quad (5.26)$$

В теорії бета-розпаду наближення, в якому враховуються лише головні нуклонні внески у гамільтоніан  $H_\beta$ , а лептонні хвильові функції всередині ядра вважаються незалежними від координат, називається дозволим. У цьому наближенні спектр  $\beta$ -частинок описується виразом:

$$N(E) dE = \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} G_\beta F(Z, E) \left\{ n^2 V | \int | 1 |^2 + g^2 A | \int \sigma |^2 \right\} \times \\ \times E \sqrt{E^2 - 1} (E_0 - E)^2 dE. \quad (5.27)$$

У (5.27) енергія виражена в одиницях  $m_e c^2$  ( $m_e$  – маса електронів).

Запишемо співвідношення, які відповідають векторній взаємодії  $C_V$

та аксіально-векторній взаємодії  $C_A$ :

$$\int 1 \equiv \left\langle f \left| \sum_{i=1}^A \tau_{\pm}^{(i)} \right| i \right\rangle ,$$

$$\int \sigma \equiv \left\langle f \left| \sum_{i=1}^A \sigma^{(i)} \tau_{\pm}^{(i)} \right| i \right\rangle . \quad (5.28)$$

Перше співвідношення називається матричним елементом Фермі, а друге – матричним елементом Гамова-Теллера.

У загальному випадку неможливо визначити  $| i \rangle$ ,  $\langle f |$ , які відповідають початковому та скінченному станам ядра. Однак, якщо взяти за основу для розгляду спин  $I$  та парність  $\pi$  станів ядра, між якими спостерігається  $\beta$ -перехід, то можна отримати правила відбору (див. нижче) для ядерних матричних елементів, що виникають при розкладанні в ряд гамільтоніана взаємодії та, зокрема, вище наведених ядерних матричних елементів.

Функції  $| i \rangle$  and  $\langle f |$  допускають формальне представлення:

$$| i \rangle = \langle \tilde{I}_i(M_i) \rangle , \quad (5.29a)$$

$$\langle f | = \langle I_f(M_f) \tilde{f} \rangle , \quad (5.29b)$$

де  $I_i$ ,  $I_f$  – початковий і скінченний спін станів материнського та дочірнього ядер, між якими відбувається  $\beta$ -перехід;  $M_i$ ,  $M_f$  – їх відповідні проекції;  $\tilde{i}$ ,  $\tilde{f}$  – величини, що включають усі інші характеристики ядер.

Цей підхід дозволяє переписати вираз для ядерних матричних елементів у вигляді:

$$\int 1 = \left\langle I_f(M_f) \tilde{f} \left| \sum_{s=1}^A \tau_{\pm}^s \right| \tilde{I}_i(M_i) \right\rangle , \quad (5.30a)$$

$$\int \sigma = \left\langle I_f(M_f) \tilde{f} \left| \sum_{s=1}^A \sigma^s \tau_{\pm}^s \right| \tilde{I}_i(M_i) \right\rangle . \quad (5.30b)$$

Є очевидним, що кулонівське поле ядра збільшує ймовірність випускання електронів та зменшує ймовірність випускання позитронів в області низьких енергій.

Крім того, при врахуванні фактору Фермі  $F(Z,E)$  ймовірність випускання електронів під час бета-розпаду на нижній межі  $\beta$ -спектру не перетворюється у нуль, а прагне досягти кінцевого значення. Вплив кулонівського фактору на  $\beta$ -спектри та ймовірність бета-розпаду зростає зі збільшенням  $Z$  та зменшенням  $E_0$ .

При обчисленні  $F(Z,E)$  також необхідно враховувати екранування заряду ядра атомними електронами (це особливо важливо у випадку  $\beta^+$ -розпаду).

Підкреслимо, що цей ефект досі не знайшов адекватного кількісного опису у сучасних обчисленнях. У багатьох роботах (наприклад, [401-430]) була розглянута можливість впливу на процеси розпаду ядер за участю електронів атомної оболонки ( $K$ -захоплення та внутрішня конверсія) шляхом іонізації атома.

У дослідницькому центрі GSI (Німеччина) було експериментально показано, що вплив присутності або відсутності електронних оболонок в атомі може суттєво змінити всю схему розпаду і, відповідно, кількісні характеристики [403].

Повну ймовірність  $W$  бета-розпаду за одиницю часу можна отримати шляхом інтегрування (5.27) по енергії:

$$W = \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} G_\beta \left\{ g^2 V \left| \int 1 \right|^2 + g^2 A \left| \int \sigma \right|^2 \right\} f, \quad (5.31a)$$

$$f = \int_1^{E_0} F(Z, E) E \sqrt{E^2 - 1} (E_0 - E)^2 dE. \quad (5.31b)$$

Якщо знехтувати взаємодією випромінюваної  $\beta$ -частинки з кулонівським полем атома, то можна отримати:

$$\begin{aligned} f|_{Z=0} &= \int_1^{E_0} E \sqrt{E^2 - 1} (E_0 - E)^2 dE = \\ &= \sqrt{E^2 - 1} \left[ \frac{E_0^4}{30} - \frac{3E_0^2}{20} - \frac{2}{15} \right] + \frac{E_0}{4} \ln(E_0 + \sqrt{E_0^2 - 1}). \end{aligned} \quad (5.32)$$

Величина  $f$  обчислюється за допомогою табульованих значень функції Фермі  $F(Z,E)$ , які в той же час нерідко не є достатньо коректними [405, 412]. У загальному випадку  $F(Z,E)$  визначається, як відношення ймовірностей знаходження електрона в певній точці з урахуванням ( $Z = 0$ ) та без урахування ( $Z \neq 0$ ) поля атома:

$$F(E, Z) = |\psi|_{Z \neq 0}^2 / |\psi|_{Z=0}^2. \quad (5.33)$$

Дивовижною особливістю дозволених переходів є той факт, що всі ядерні  $\beta$ -моменти зосереджені в одному множнику, а енергетична залежність зумовлена лише статистичним множником та функцією  $F(Z,E)$ .

Таким чином, у виразі для нормованих  $\beta$ - та  $\tilde{\nu}$ -спектрів можна вийняти множник

$$\left[ C_V^2 \langle 1 \rangle^2 + C_A^2 \langle \sigma \rangle^2 \right]$$

з-під знаку інтегралу; після скорочень неважко отримати кінцеві вирази для обчислення спектрів дозволених переходів.

За визначенням, період напіврозпаду  $T_{1/2}$  пов'язаний з імовірністю бета-розпаду  $W$  стандартним співвідношенням:

$$W = \ln 2 / T_{1/2}. \quad (5.34)$$

Тоді можна записати:

$$f T_{1/2} = k / \left\{ g^2 V \int |1|^2 + g^2 A \int |\sigma|^2 \right\}, \quad (5.35)$$

$$k = 2\pi^3 \ln 2 \hbar^7 / m_e^5 c^4 G_\beta^2 = G_\beta^{-2} \cdot 12306 \text{ s}, \quad (5.36)$$

де  $f T_{1/2}$  – порівняльний період напіврозпаду (ця величина відіграє важливу роль у класифікації  $\beta$ -переходів (див. нижче)); функція  $f$  враховує залежність ймовірності бета-розпаду від  $E_0$  та кулонівських ефектів, тому  $f T_{1/2}$ , на відміну від стандартного періоду напіврозпаду  $T_{1/2}$ , залежить лише від  $M_{fi}$ .



Далі коротко розглянемо основну класифікацію  $\beta$ -переходів. Зазначимо, що бета-розпад характеризується широким діапазоном змін періодів напіврозпаду  $T_{1/2}$ , як правило, від  $10^{-2}$  с до  $10^{16}$  років. Така значна варіація величин  $T_{1/2}$  пояснюється кількома причинами.

Перш за все, це пов'язано з тим, що період напіврозпаду сильно залежить від  $E_0$  (при  $E_0 \gg m_e c^2$ ,  $W \sim E_0^5$ ), а величина  $E_0$  коливається в широких межах від 2,64 кеВ для переходу  $^{187}\text{Re} \rightarrow ^{187}\text{Os}$  до 13,43 МеВ для переходу  $^{12}\text{B} \rightarrow ^{12}\text{C}$ . З іншого боку, залежно від спінів та парностей початкового та скінченного ядерних станів, внесок в амплітуду процесу дають різні складові в ефективному гамільтоніані бета-розпаду, матричні елементи яких мають різний порядок величини.

Нарешті, лептонна пара, яка випромінюється під час бета-розпаду, може нести різний орбітальний момент.

Зі збільшенням цього моменту внаслідок відцентрового ефекту зменшується значення хвильових функцій лептонів у внутрішньоядерній області, а отже, також інтеграл перекриття хвильових функцій, який визначає матричний елемент  $M_{fi}$ . Відповідно до цього, усі  $\beta$ -переходи поділяються на дозволені та заборонені.

Спочатку розглянемо дозволені переходи. У дозволеному наближенні хвильові функції лептонів всередині ядра є постійними, і лептони не несуть орбітальний кутовий момент. При цьому, якщо спін ядра не змінюється, то загальний спін, віднесений лептонною парою, також дорівнює нулю. Такі переходи отримали назву ферміївських.

У випадку, якщо векторна зміна спіна ядра (сумарний спін, що несе лептонна пара) дорівнює 1, тоді за визначенням ці переходи називають Гамов-Теллеровськими.

Парність ядерних станів у дозволених  $\beta$ -переходах не змінюється. В результаті правила відбору, що обмежують зміну повного моменту  $I$  та парності  $\pi$  ядра, у разі дозволених переходів ферміївського типу записуються у вигляді:  $\Delta I = |I_f - I_i| = 0$ ;  $\Delta \pi \equiv \pi_f \pi_i = +1$ .

Для Гамов-Теллеровських переходів аналогічні правила вибору мають вигляд:  $\Delta I = 1$ ,  $\Delta \pi = +1$ .

У сучасній класифікації дозволені переходи поділяються на понад дозволені та ускладнені. До перших належать переходи між ядерними станами з подібними хвильовими функціями, внаслідок чого інтеграли їх перекриття великі ( $\int \sim 1$ ,  $\int \sigma \sim 1$ ), а величини  $fT_{1/2}$  приймають мінімальні

значення. До понад дозволених переходів належать, зокрема, переходи між станами, що належать одному і тому ж ізомультиплету (між аналогічними станами ядер).

Для понад дозволених  $\beta^\pm$ -переходів  $\int 1$  може бути точно обчислена [401-405]. У рівнянні  $\sum_{i=1}^A \tau_{\pm}^i = T_{\pm}$  параметр  $T$  – це ізотопний спіні початкового ядра. При цьому:

$$\int 1 = [40(T \mp T_3) \cdot (T \pm T_3 + 1)]^{1/2}, \quad (5.37)$$

де  $T_3$  – проекція ізоспіну для початкового ядра, яка чисельно дорівнює  $\frac{1}{2}(Z - N)$ ; передбачається, що  $\beta$ -перехід відбувається між чистими ізоспіновими станами, а врахування мезонних обмінних струмів не змінює цього результату, що обумовлено збереженням ізоспіну.

У разі понад дозволених переходів  $0^+ \rightarrow 0^+$  між сусідніми членами ізомультиплета:  $\int \sigma = 0$ ; при  $T = 1$  маємо  $\int 1 = \sqrt{2}$ . Для таких понад дозволених переходів значення  $f T_{1/2}$  повинні бути однаковими, що добре узгоджується з експериментальними даними (табл. 5.1) [402, 403]. Співвідношення (5.35) дозволяє визначити значення  $G_\beta$  за вимірними значеннями  $f T_{1/2}$  для  $0^+ \rightarrow 0^+$  переходів:

$$G_\beta = (1,4057 \pm 0,0016 \pm 0,0070) \cdot 10^{-49} \text{ ерг} \cdot \text{см}^3. \quad (5.38)$$

Зазначимо, що Гамов-Теллеровські переходи  $0^+ \rightarrow 1^+$  характеризуються єдиним матричним елементом  $\int \sigma \neq 0$  і можуть бути використані для отримання інформації про величину аксіально-векторної константи зв'язку  $g_A$ . Найбільш точне значення  $g_A = -1,250 \pm 0,007$  було отримано з даних по  $\beta$ -розпаду нейтрона (див., напр., [401-407]).

Так звані ускладнені переходи відрізняються від понад дозволених переходів відносно слабким перекриттям хвильових функцій початкового та скінченного ядерних станів, в результаті чого матричні елементи виявляються малими порівняно з матричними елементами понад дозволених переходів (див., напр., [401-407]).

Прикладом ускладнених переходів є переходи  $0^+ \rightarrow 0^+$  між станами, що належать до різних ізоспінових мультиплетів. Такі переходи задовольняють правилам відбору ферміївського типу  $\Delta I = 0, \Delta \pi = +1$  та описуються єдиним матричним елементом  $\int 1$ .

Таблиця 5.1 - Характеристики деяких понад дозволених  $\beta$ -переходів

Перехід	$I_i^{\pi_i} \rightarrow I_f^{\pi_f}$	$T_{1/2}$	$E_0$ , кеВ	$ft'_{1/2}$
n $\rightarrow$ p	$\frac{1}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	11,7 $\pm$ 0,3 м	782 $\pm$ 1	1187 $\pm$ 35
$^3\text{H} \rightarrow ^3\text{He}$	$\frac{1}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	3,87 $\cdot 10^8$ s	18,65 $\pm$ 0,	1132 $\pm$ 40
$^6\text{He} \rightarrow ^6\text{Li}$	$0^+ \rightarrow 1^+$	0,813 $\pm$ 0,7 s	3500 $\pm$ 2,0	808 $\pm$ 32
$^{17}\text{F} \rightarrow ^{17}\text{O}$	$5 / 2^+ \rightarrow 5 / 2^+$	66,0 $\pm$ 0,5 s	1748 $\pm$ 6	2380 $\pm$ 40
$^{35}\text{Cl} \rightarrow ^{35}\text{Ar}$	$3 / 2^+ \rightarrow 3 / 2^+$	1,804 $\pm$ 0,21 s	4948 $\pm$ 30	5680 $\pm$ 400
$^{14}\text{O} \rightarrow ^{14}\text{N}$	$0^+ \rightarrow 0^+$	71,36 $\pm$ 0,09 s	1012,6 $\pm$ 1,4	3066 $\pm$ 10
$^{34}\text{Cl} \rightarrow ^{34}\text{S}$	$0^+ \rightarrow 0^+$	1,565 $\pm$ 0,07 s	4460 $\pm$ 4,5	3055 $\pm$ 20
$^{42}\text{Sc} \rightarrow ^{42}\text{Ca}$	$0^+ \rightarrow 0^+$	0,6830 $\pm$ 0,0015 s	5409 $\pm$ 2,3	3077 $\pm$ 9
$^{46}\text{V} \rightarrow ^{46}\text{Ti}$	$0^+ \rightarrow 0^+$	0,4259 $\pm$ 0,0008 s	6032,1 $\pm$ 2,2	3088 $\pm$ 8
$^{50}\text{Mn} \rightarrow ^{50}\text{Cr}$	$0^+ \rightarrow 0^+$	0,2857 $\pm$ 0,0006 s	6609,0 $\pm$ 2,6	3082 $\pm$ 9

Якщо початковий і скінченний ядерні стани є чистими ізоспіновими станами, що належать до різних ізомультиплетів, тоді  $\int 1=0$ , а ймовірність переходу  $W=0$ .

Слід пам'ятати, що кулонівська взаємодія в ядрах порушує ізотопічну інваріантність (див., напр., [401-407]). Тому ядерні стани (особливо у важких ядрах) слід вважати не чистими, так як вони містять домішки станів з іншим ізоспіном. Як наслідок, матричні елементи таких переходів не дорівнюють нулю. Вони малі у порівнянні зі звичайними дозволеними матричними елементами, хоча правила відбору по спіну та парності задовольняються.

Інший тип  $\beta$ -переходів отримав назви заборонених переходів (див., напр., [401-407]). Правила відбору для матричних елементів заборонених переходів виводяться аналогічно до випадку дозволених переходів, при цьому вираз для матричного елемента після застосування процедури виділення приведених матричних елементів ( $\beta$ -моментів) має досить складний та незручний вигляд для практичного використання.

Для його спрощення використовується так зване нормальне наближення, яке засновано на тому, що ядерні  $\beta$ -моменти мають різний порядок малості (див., напр., [401-407]).

Малими параметрами, за якими проводиться оцінка цих величин, є: швидкість нуклона  $V_N$ , радіус ядра  $R$ , параметр кулонівської малості  $aZ$ .

Порядок малості  $\beta$ -моментів, що входять до розкладання матричного елемента, визначає ступінь заборони  $\beta$ -переходів.

До заборонених переходів належать переходи, в яких лептонна пара забирає орбітальний кутовий момент та (або) основний внесок в амплітуду процесу вносять малі матричні елементи від операторів  $\gamma_5, \alpha$  в ефективному гамільтоніані  $H_\beta$ .

Заборонені переходи класифікуються за ступенем малості матричного елемента.

До переходів першого порядку заборони відноситься переходи, що описані матричними елементами

$$\int \alpha, \int r, \int \gamma_5, \int [\sigma r], \int (\sigma r), \int B_{ij},$$

$$\text{де } \int \alpha = \langle f | \sum_{a=1}^A \alpha^a \tau_{\pm}^a | i \rangle; \int r = \langle f | \sum_{a=1}^A r^a \tau_{\pm}^a | i \rangle; \dots,$$

$$B_{ij} \equiv \sigma_i x_j + \sigma_j x_i / 2 / 3(\sigma r) \sigma_{ij}; i, j = 1, 2, 3; x_i - \text{компонента вектора } r.$$

Перші два матричні елементи обумовлені векторним струмом, решта – аксіальним. Матричні елементи, що містять значення  $r$ , виникають у тому випадку, коли лептонна пара забирає орбітальний кутовий момент 1.

Правила відбору матричних елементів для  $\int \gamma_5, \int (\sigma r)$  мають вигляд:

$$\Delta I = 0,$$

$$\Delta \pi = -1.$$

Для  $\int \alpha, \int r$  та  $\int [\sigma r]$  правила відбору:

$$\Delta I^{\Delta \pi} = 1^-, 0^-$$

(переходи  $0 \leftrightarrow 0$  заборонені).

У переходах, описуваних матричними переходами першої заборони, лептонна пара забирає повний момент 2, і правила відбору мають вигляд:

$$\Delta I^{\Delta \pi} = 2^-, 1^-, 0^-$$

(заборонені переходи  $0 \leftrightarrow 0, 0 \leftrightarrow 1, 1 / 2 \leftrightarrow 1/2$ ).

Матричні елементи  $\int \gamma^5$  та  $\int \alpha$  мають порядок малості  $(v_N / c)$ . Для матричних елементів, що містять величину  $r$ , природно очікувати малості порядку  $pR/\hbar \leq E_0 R/\hbar c$ . Однак це вірно тільки для унікальних переходів.

Для решти матричних елементів у випадку, коли заряд ядра  $Z$  задовольняє так званому  $\xi$ -наближенню:

$$\xi \equiv (Ze^2 / rE_0) \gg 1$$

(див., напр., [401-407]), кулонівські ефекти призводять до зростання хвильової функції електрона всередині ядра, внаслідок чого ці матричні елементи мають порядок малості  $Z / 137$ , а не  $pR/\hbar$ . Зауважимо, що умова  $\xi \gg 1$  виконується для більшості  $\beta$ -переходів.

Зі збільшенням порядку заборони збільшується кількість відповідних матричних елементів, що визначають ймовірність переходу, і зростає складність аналізу експериментальних даних; при цьому самі матричні елементи зменшуються по порядку величини (див., напр., [401-407]). Правила відбору при  $\beta$ -переходах  $n$ -го порядку заборони:  $\Delta\pi = (-1)^n$ ,  $\Delta I \leq n$  для звичайних переходів та  $\leq n + 1$  для унікальних переходів.

Зі збільшенням  $n$  та зменшенням матричних елементів величина  $fT_{1/2}$  зростає. Хоча діапазон її зміни вузький, ніж для  $T_{1/2}$ , він виявляється досить великим, тому тут зручно характеризувати  $\beta$ -переходи величиною  $\lg fT_{1/2}$  (таблиця 5.2).

Далі, перш ніж, переходити до детального аналізу сучасного стану розрахунків характеристик бета-розпаду, зазначимо деякі експериментальні аспекти проблеми (див., напр., [401-407]). Зазвичай  $\beta$ -спектри експериментально досліджуються за допомогою бета-спектрометрії, у разі дозволених переходів вони описуються виразом:

$$N(E)dE \sim F(Z,E)pE(E_0 - E)^2 dE. \quad (5.39)$$

Для дослідження  $\beta$ -спектрів використовують так звані графіки Кюрі, які зображують залежність величини  $K \equiv [40N(E)F(Z,E)pE]^{1/2}$  від  $E$ .

Таблиця 5.2 - Правила відбору для  $\beta$ -переходів різних типів

Тип переходу	Правила відбору	$lg fT_{1/2}$	$lg fnT_{1/2}$
Дозволені	{	$3,5 \pm 0,2$	
Понад дозволені ускладненні			
Заборонені першої заборони ....	$\Delta \pi = +1$	$7,5 \pm 1,5$	
унікальні першої заборони ....	$\Delta I = 1,0$		$8,5 \pm 0,7$
другої заборони	$\Delta \pi = -1$		
унікальні другої заборони ....	$\Delta I = 2$	$12,1 \pm 1,0$	$11,7 \pm 0,9$
третьої заборони	$\Delta \pi = +1$		
унікальні третьої заборони ....	$\Delta I = 3$	$18,2 \pm 0,6$	$15,2(^{40}\text{K})$
четвертої заборони	$\Delta \pi = -1$		
	$\Delta I = 4$	$22,7(^{115}\text{In})$	
	$\Delta \pi = +1$		

Для дозволених переходів графік Кюрі має вигляд відрізка прямої, що перетинає вісь абсцис у точці  $E = E_0$ . Більш точний опис форми спостережуваного спектру має вигляд (див., напр., [401-407]):

$$N(E_e) = \frac{V^2}{2\pi^3 c^5 \hbar^7} \overline{| \langle f | H_\beta | i \rangle |^2} E_e p_e (E_0 - T_e)^2. \quad (5.40a)$$

Даний вираз якісно пояснює форму спостережуваного  $\beta$ -спектру і, як

правило, використовується для експериментального визначення граничної енергії  $\beta$ -розпаду.

Графік цієї функції (графік Кюрі) описується загальновідомим рівнянням (див., напр., [401-407]):

$$\left(\frac{N(E_e)}{E_e p_e}\right)^{1/2} = \text{const} \cdot \overline{|\langle f | H_\beta | i \rangle|^2} (E_0 - T_e). \quad (5.406)$$

Графік буде мати вигляд прямої лінії лише у випадку, якщо матричний елемент дійсно не залежить від імпульсу електрона, що має місце у разі дозволених  $\beta$ -переходів. За допомогою графіка дуже зручно знаходити граничну енергію  $\beta$ -розпаду, оскільки функція повинна перетворюватись в нуль саме при  $E_0$  (див., напр., [401-407]).

За відхиленнями від лінійної залежності можна з дуже хорошою точністю досліджувати вплив поправок, зумовлених ненульовою масою нейтрино. До сих пір спектр обчислювався в припущенні, що  $m_\nu=0$ . При скінченній масі спокою нейтрино слід очікувати зміну форми спектра в області максимальних значень енергетичної змінної, так як маса нейтрино мала ( $m_\nu \ll m_e$ ).

Зокрема, кінцева точка  $\beta$ -спектру  $E_{\max}$ , яка дорівнює максимально можливій кінетичній енергії електрона, буде зрушена на величину енергії спокою нейтрино (див., напр., [401-407]):

$$E_{\max} = E_0 - m_\nu c^2. \quad (5.41)$$

Відмінності переходу від дозволеного, призводять до порушення лінійності графіка Кюрі.

Варто нагадати, що спектри бета заборонених переходів можуть значно відрізнятись від дозволених спектрів через наявність залежних від енергії членів в матричному елементі (докладніше див., напр., [401-407]).

Цей ефект зазвичай враховується шляхом введення в праву частину відповідного спектрального формфактору  $S(E)$ , який залежить від енергії. Для унікальних переходів першої заборони (за умови нехтування кулонівськими ефектами) цей фактор має вигляд:

$$S \sim [(E^2 - m_e c)^2 + (E_0 - E)^2].$$

Унікальні переходи  $n$ -ї заборони зазвичай характеризуються не величинами  $fT_{1/2}$ , а значеннями  $f_n T_{1/2}$ , де  $f_n$  визначається формулою, наведеною [401-407] (див. також табл. 5.2).

Енергетичні спектри звичайних (не унікальних) перших заборонених переходів, як правило, близькі до дозволених. Добре відомо, що відповідні матричні елементи  $\int \gamma_5$  та  $\int \alpha$  практично не містять залежності від енергії лептонів; для матричних елементів  $\int r$ ,  $\int (\sigma r)$  та  $\int [\sigma r]$ , у випадку  $\xi \gg 1$  через кулонівські ефекти спектральний формфактор не залежить від енергії. Виняток становлять деякі  $\beta$ -переходи першої заборони, в яких енергонезалежні члени в матричному елементі взаємно скорочуються, і малі поправки, що залежать від енергії, починають відігравати суттєву роль (див., напр., [401-407]). Яскравий приклад описаної ситуації дається, напр., випадком  $\beta$ -розпаду  $^{210}\text{Bi}$  (Ra E) [403, 405].

У багатьох випадках бета-розпад перетворюється не в один якийсь стан дочірнього ядра, а в два або кілька станів. В цьому випадку експериментально спостережуваний  $\beta$ -спектр складається з двох або декількох парціальних спектрів з різними значеннями граничних енергій. Такі  $\beta$ -спектри зазвичай називають складними.

Дослідження  $\beta$ -спектрів поблизу  $E_0$  дозволяє отримати інформацію про масу нейтрино  $m_\nu$ .

У разі  $m_\nu \neq 0$  опис спектру дозволених переходів повинен відрізнитися і має вигляд (див., напр., [401-407]):

$$N(E)dE \sim F(ZE)pE(E_0 - E)[40(E_0 - E)^2 - (m_\nu c^2)^2]^{1/2}. \quad (5.42)$$

Звідси випливає, що форма спектра поблизу  $E_0$  суттєво залежить від  $m_\nu$ . Відмінність  $m_\nu$  від 0 може призвести до відхилення від лінійної залежності графіку Кюрі в області  $E_0$ . Фактично для того, щоб визначити  $m_\nu$ , необхідно порівняти графік Кюрі із залежностями  $K(E)$ , обчисленими при різних значеннях  $m_\nu$ . Наприклад, дослідження  $\beta$ -спектру  $^3\text{H}$  ( $E_0 = 18$ - $61$  кеВ) показали, що  $m_\nu < 35$  еВ /  $c^2$ . Результати, отримані при вивченні випромінювання  $\beta$ -спектру  $^3\text{H}$  ( $14$  еВ  $< m_\nu < 46$  еВ), потребують подальшого підтвердження. Поточний стан цієї проблеми описаний у наступних джерелах [247, 402-405].



### 5.3 Теоретичний метод. Релятивістська багаточастинкова теорія збурень

5.3.1 Визначення ймовірності  $\beta$ -розпаду. Дозволені та понад дозволені переходи

Згідно з [403], в розрахунках ймовірності розпаду, як правило, застосовується метод теорії збурень, оскільки відповідна константа взаємодії характеризується дуже малими значеннями. З цієї причини в практичних розрахунках достатньо обмежуватись урахуванням лише членів лише першого порядку, які відповідають прямим переходам з початкового стану у скінченний. Ймовірність переходу системи з початкового стану  $|\xi\rangle$  з енергією  $E_\xi$  у певний кінцевий стан  $\langle f|$  з енергією  $E_f$  за одиницю часу за умови  $E_0 = E_f - E_\xi$  описується загальновідомим виразом (див., напр., [401-407]):

$$dW_{\xi f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H | \xi \rangle|^2 \left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}, \quad (5.43)$$

в якому матричний елемент визначається формою взаємодії гамільтоніана  $H_\beta$  та хвильовими функціями початкового  $\psi_\xi$  та скінченного  $\psi_f$  станів ядра:

$$\langle f | H | \xi \rangle = \int \psi_f H_\beta \psi_\xi d^3r_1 \dots d^3r_A. \quad (5.44)$$

Визначення квадрата матричного елемента зводиться до інтегрування за об'ємом ядра та усереднення за всіма неспостережуваними змінними. Величина  $\left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}$  визначає щільність скінченних станів системи

на одиницю енергії. Вираз для числа  $\beta$ ,  $\tilde{\nu}$ -частинок з енергіями в діапазоні від  $E$  до  $E + dE$  має вигляд (див., напр., [401-407]):

$$dW_{\xi f} = \frac{1}{2\pi^3 \hbar^7 c^5} |\langle f | H_\beta | \xi \rangle|^2 \sqrt{E_e^2 - m^2 c^4} E_e (E_0 - E_e)^2 dE_e, \quad (5.45a)$$

$$dW_{\xi f} = \frac{1}{2\pi^3 \hbar^7 c^5} |\langle f | H_\beta | \xi \rangle|^2 \sqrt{(E_0 - E_{\bar{\nu}})^2 - m^2 c^4} (E_0 - E_{\bar{\nu}}) E_{\bar{\nu}}^2 dE_{\bar{\nu}}. \quad (5.456)$$

В даному підрозділі ми обмежимося розглядом дозволених та понад дозволених переходів. Загальновідомо, що дозвалені переходи вносять найсуттєвіший внесок в сумарний спектр  $\beta$ -розпаду ядра, тоді як внесок заборонених переходів зазвичай становить лише кілька відсотків повної інтенсивності [247]. Конкретний внесок цих та інших переходів у ймовірність  $\beta$ -розпаду описується з використанням виразу для гамільтоніана взаємодії та ймовірності  $\beta$ -розпаду розкладання лептонного струму в ряд по характерним для  $\beta$ -розпаду малим параметрам (див. [402-405]), причому нульовий член такого розкладання описує найбільш інтенсивні дозвалені  $\beta$ -переходи, а наступні члени розкладання відповідають забороненим переходам різного ступеня заборони.

Розглянемо далі дозвалені переходи більш докладно. Розподіл енергії  $\beta$ -частинок у цьому випадку має стандартний вигляд:

$$dW_\beta(E) / dE = \frac{1}{2\pi^3} G_F^2 \cdot F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 \cdot |M|^2. \quad (5.46)$$

У виразі (5.46)  $G_F$  – це константа слабкої взаємодії;  
 $E, p = (E^2 - 1)^{1/2}$  – повна енергія та імпульс  $\beta$ -частинки;  
 $E_0 = 1 + (E_{zp} / m_e c^2)$ , ( $E_{zp}$  – гранична енергія  $\beta$ -спектра);  
 $|M|$  – енергонезалежний матричний елемент для дозволених  $\beta$ -переходів.

$F$  – відома функція Фермі, яка за визначенням дорівнює:

$$F(E, Z) = \frac{1}{2p^2} (g_{-1}^2 + f_{+1}^2), \quad (5.47)$$

де позначки  $\pm 1 = \kappa$ ,  $\kappa = (l-j) / (2j+1)$ .

У (5.47) фігурують функції  $f_{+1}$  та  $g_{-1}$ -релятивістські електронні радіальні хвильові функції, які обчислюються на межі сферичного ядра радіусом  $R_0$  [4, 402] або використовуються значення цих функцій в нулі (амплітуди розкладання функцій в ряд в нулі), як це зроблено в [12, 13, 403]). У наших розрахунках ми всюди використовуємо останній варіант.

Відповідна інтегральна функція Фермі  $f$  задається визначенням:

$$f(E_0, Z) = \int_1^{E_0} F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 dE. \quad (5.48)$$

Період напіврозпаду бета-розпаду в цих позначеннях дорівнює:

$$T_{1/2} = 2\pi^3 \ln 2 / [40G^2 |M|^2 f(E_0, Z)]. \quad (5.49)$$

Важливим моментом теорії є правильне нормування релятивістських електронних радіальних функцій  $f_k$  та  $g_k$ , для яких при великих значеннях радіальної змінної

$$g_l(r) \rightarrow r^{-1} [40(E+1) / E]^{1/2} \sin(pr + \delta_l), \quad (5.50a)$$

$$f_l(r) \rightarrow r^{-1} (l / |l|) [40(E-1) / E]^{1/2} \cos(pr + \delta_l). \quad (5.50b)$$

Детальний опис методології розрахунку електронних та нуклонних хвильових функцій у рамках формалізму релятивістської ядерної та RMBPT, а також інших різноманітних теоретичних підходах наведено, напр., в [403-460]. Зауважимо, що чисельний розв'язок усіх рівнянь, а також весь розрахунок характеристик  $\beta$ -розпаду та атомних поправок були проведені на основі модифікованого числового комплексу "Superatom".

Для досягнення необхідної точності рівняння Дірака інтегрувалися (напівлогарифмічною шкалою) до відстаней від ядра, при яких функція континууму проходить 6-8 періодів. При розрахунку інтегралів від сильно коливальних функцій вводився фактор загасання  $\exp(-dr)$ , значення параметра  $d$  в якому вибиралося виходячи з вимоги точності на рівні  $\sim 0,005\%$ .

Функції безперервного спектра знаходились ітераційним шляхом в полі дочірнього атома. Умова самоузгодженості функцій неперервного спектру зводиться до того, що нормовані функції на двох сусідніх ітераціях відрізняються менш ніж на  $10^{-5}$  відносно їх значень у точці максимуму функції. Для різних енергій з метою досягнення необхідної точності знадобилось від 3 (при вищій енергії) до 11 (при низькій енергії) ітерацій.

### 5.3.2 Комбінована ядерна та релятивістська багаточастинкова теорія збурень

В даному підрозділі буде представлений короткий опис ключових моментів нашого підходу (більш детальну інформацію можна знайти в посиланнях [247-254]. Фундаментальні аспекти врахування радіаційних КЕД-поправок і фізична природа цих поправок описані у достатньо величезній кількості побіт (див. напр., [1-3, 60, 61, 247, 249-251, 255-260, 341-343, 355-364, 392] та джерела в них).

В рамках нашого підходу нульовий базис хвильових функцій електрона знаходиться шляхом рішення узагальненого рівняння Dirac-Fock -ODF (див. розділ 2) з деякими особливостями, зокрема [247].

Функцію певного стану атомної системи із сумарним кутовим моментом  $J$ , з його  $z$ -проекцією  $M$  і парністю  $p$  звичайно записується у вигляді:

$$\Psi_s(JM^p) = \sum_m c_m(s) \Phi(\gamma_m JM^p) \quad , \quad (5.51a)$$

$$\Phi(\gamma_m JM^p) = \sum_i d_i \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \cdots & \psi_1(N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad , \quad (5.51b)$$

де  $c$  – коефіцієнти змішування конфігурації для стану  $s$ ;

$\Phi(\gamma_m JM^p)$  – функції стану певної конфігурації, тобто детермінант Слейтера 4-компонентних діраківських біспінів;

$\psi_i$  – одноелектронні релятивістські хвильові функції.

Одноелектронна хвильова функція може бути визначена, як

$$\psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \\ iQ_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{-\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad , \quad (5.52)$$

де  $\Omega_{\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi)$  – кутовий 2-компонентний спіно́р,  $P(r)$  і  $Q(r)$  – , як й завжди, велика і мала радіальні частини хвильової функції відповідно

Далі, як й раніше, в нульовому наближенні РМВРТ (з дірак-фоківським «0» наближенням) можна розв'язувати як систему нелокальних ДФ радіальних рівнянь, так й використовувати модель локального дірак-фоківського потенціалу, наприклад, по аналогії з методом [28]:

$$V_{\text{CH}}(r) = V_{\text{nuc}}(r) + \alpha \int_0^{\infty} dr' \frac{1}{r'} \rho_c(r'), \quad (5.53)$$

$$\rho_c(r) = \sum_{n_c} (2j_c + 1) [G_c^2(r) + F_c^2(r)],$$

Тут перший член описує ядерний потенціал, а другий містить електронну густину умовного остову атомної системи (у наших визначеннях нижче компоненти діраківського спіно́ру  $F=P$ ,  $G=Q$ ). Слід зауважити, що у випадку дозволених переходів (а саме такі розглядаються нами далі) зазвичай обчислення ядерних матричних елементів різко спрощується.

У подальшому розгляді ми будемо порівнювати наші нові результати з даними розрахунків на основі релятивістської ТЗ з дірак-кон-шемівським DKS нульовим наближенням [3, 15]. Головний блок цього методу базується на використанні ряду функціоналів густини. Зокрема, стандартний обмінний потенціал Кона-Шема визначається у вигляді (див., напр., [3, 107-116]):

$$V_X^{KS}(r) = -(e^2 / \pi) [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3} \quad (5.54)$$

У наближенні локальної густини релятивістський потенціал:

$$V_X[\rho(r), r] = \frac{\delta E_X[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (5.55)$$

де  $E_X[\rho(r)]$  – обмінна енергія багатоелектронної системи, відповідна

однорідній густині  $\rho(r)$ , яка виводиться з гамільтоніану, що містить поперечний векторний потенціал фотонів.

Відповідно, релятивістський обмінний потенціал записується у вигляді, (див., напр., [3, 107-116]):

$$V_X[\rho(r), r] = V_X^{KS}(r) \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\},$$

$$\beta = 3\pi^2 \rho(r)^{1/3} / c, \quad (5.56)$$

де  $c$  – швидкість світла.

В якості кореляційного потенціалу в релятивістському ТЗ з дірак-коншемівським DKS нульовим наближенням [3,15] використовується відомий потенціал Гуннарсона-Лундквіста, добре зарекомендував себе в численних розрахунках спектральних властивостей атомів (див., напр. [3]) і узагальнений нами вперше на випадок релятивістського наближення:

$$V_{cor}[\rho(r), r] = -0.0333 \cdot b \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (5.57)$$

де  $b$  – параметр оптимізації [3]. Для його визначення також застосовують часто відому калібрувальну-інваріантну КЕД-процедуру Глушкова-Іванова [21].

Повний релятивістський гамільтоніан Дірака для багатоелектронної системи має наступний вигляд [247]:

$$H = \sum_i \{ \alpha c p_i - \beta c^2 - Z / r_i \} + \sum_{i>j} \exp(i | \omega | r_{ij}) (1 - \alpha_i \alpha_j) / r_{ij}, \quad (5.58)$$

де  $\alpha_i, \alpha_j$  – матриці Дірака,

$\omega_{ij}$  – частота переходу.

Слід зазначити, що магнітна взаємодія в найнижчому порядку за параметром константи тонкої структури  $\alpha^2$  ( $\alpha$  - константа тонкої структури), а також ефект сповільнення враховується в релятивістському потенціалі міжелектронної взаємодії.

Як зазначалося раніше, всі кореляційні поправки другого порядку та домінуючих класів діаграм вищих порядків враховуються в рамках

формалізму багаточастинкової теорії збурень [247, 249-251, 255-260].

Процедуру визначення ядерного потенціалу в рамках нашої нової теорії збурень з оптимізованим (див. нижче) ДФ нульовим наближенням є абсолютно ідентична описаній вище у випадку як звичайних багатоелектронних атомів, так й каонних атомних систем. Як показують конкретні розрахунки, дуже важливим є акуратний облік поправки на скінченний розмір атомного ядра.

Дійсно, як вже зазначалося, найбільш послідовний підхід щодо врахування ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядер, ефекти Bohr-Weisskopf і Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.) складається з вирішення відповідних рівнянь релятивістської моделі середнього поля для атомного ядра, однак в теоретичній атомній спектроскопії прийнято використовувати кілька відомих моделей, які забезпечують спектроскопічну точність при проведенні розрахунків широкого набору характеристик атомів [1-3, 274, 275].

Зокрема, мова йде про такі моделі розподілу електричного заряду в атомному ядрі, як моделі Гауса і Фермі, а також однорідно зарядженої кулі (сфери). До речі, ця модель використана практично у всіх альтернативних методах розрахунку, результати яких наведені далі при аналізі конкретних бета розпадів.

Але у загальному виді для будь яких бета-переходів для опису ядерної підсистеми треба використовувати відому релятивістську модель середнього поля, описану в [403]. Для конкретних розрахунків найбільшу перевагу має так звана версія NL3-NLC цієї моделі [403, 446].

Перехід до наближення, що враховує скінченний розмір, виконується стандартним чином. Дійсно [138], якщо точкове ядро атома створює певний центральний електричний потенціал  $V(R)$ , то перехід до потенціалу скінченного ядра здійснюється заміною на  $V_{FS}(r|R)$ :

$$V_{FS}(r|R) = V(r) \int_0^r dr r^2 \rho(r|R) + \int_r^\infty dr r^2 V(r) \rho(r|R). \quad (5.59)$$

У разі конкретно кулонівського потенціалу ядра зі сферично симетричною щільністю  $\rho(r|R)$  шукане співвідношення має вигляд [1, 7, 124]:

$$V_{FS}(r|R) = -\left(\frac{1}{r}\right) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr' r' \rho(r'|R). \quad (5.60)$$

У випадку релятивістського розгляду бета-распадних атомних систем на наш погляд, також використання гладкої функції розподілу заряду типу Гауса має перевагу у порівнянні, наприклад, з розривною функцією розподілу заряду в ядрі у вигляді однорідно зарядженої кулі. З іншого боку, наявність відповідного програмного блоку обчислення розподілу Гауса (Фермі) методом диференціальних рівнянь Іванова-Іванової-Глушкова в РС комплексі “Superatom” [202-226] є мотивацією для імплементації в нашу теорію моделі Гауса (Фермі).

Головний важливий принцип загального підходу – це використання узагальненого релятивістського енергетичного підходу для побудови оптимізованого базисного набору електронних хвильових функцій. Відповідно до методу Glushkov-Ivanov-Ivanova [3, 21-26] оптимізація набору електронних хвильових функцій та характеристики калібрувальної інваріантності може бути досягнута за рахунок мінімізації внеску в уявну частину ширини  $\text{Im } \delta E$  для мульти-електронної системи на основі КЕД-теорії збурень четвертого порядку діаграм Фейнмана. Деталі всієї процедури вище у розділі 2.

Важливим аспектом повної процедури є максимально коректне та послідовне урахування КЕД або радіаційних поправок. В роботі використано розвинутий нами послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до бета-распадних атомних систем, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризації вакууму тощо. Як вказувалося вище, підхід базується на використанні методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges (у стандартній версії FGRP визначається як сума потенціалу Uhling-Serber, внесків від електричного і магнітного форм-факторів, членів, що враховують внески поправок вищих порядків типу Källen-Sabry та Wichmann-Kroll тощо) в рамках формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF. Всі обчислення виконуються з використанням цифрових кодів SuperAtom (Nucleus) (модифіковані версії) [2-10, 21-26, 247, 249, 255-260].



## 5.4 Результати розрахунку функції Фермі для $\beta$ -розпаду

5.4.1 Характеристика ряду дозволених  $\beta$ -переходів і результати розрахунку характеристик  $\beta$ -розпаду

В якості об'єктів вивчення були обрані бета-розпади:  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ . Результати їх дослідження будуть представлені нижче (характеристики наведені в таблиці 5.3).

Більшість розглянутих бета-розпадів належать до числа переходів з низькою граничною енергією і відповідають різним діапазонам значень заряду атомного ядра  $Z$  (табл. 5.1). Майже всі переходи, характеристики яких наведені в таблиці 5.1, є дозволеними (а також понад дозволеними). Вибір таких переходів визначається важливою обставиною, яка полягає в тому, що для таких переходів формули ймовірності розпаду є точними.

У той же час, для заборонених бета-переходів відповідні формули є більш складними, ніж у випадку дозволених переходів, так як вони, як правило, повинні містити шість ядерних матричних елементів. Детальний виклад теоретичних аспектів щодо їх розрахунку наведено у [402-405]. У відомому в теорії бета-розпаду так званому  $\xi$ -наближенні не враховуються малі складові, проте та сума ядерних матричних елементів, що залишається (вона записана у вигляді постійного множника  $|M|^2$ ), не враховує додаткову залежність від енергії лептонів і виявляється аналогічною дозволеному випадку.

Нагадаємо, що у випадку виконання умови  $\xi$ -наближення  $\xi \gg 1$ , кулонівські ефекти призводять до зростання електронної хвильової функції всередині атомного ядра, внаслідок чого ці матричні елементи мають порядок малості  $\sim Z / 137$ , а не  $pR/\hbar$ .

У той же час добре відомо, що шукана умова  $\xi \gg 1$  виявляється виконаною для більшості  $\beta$ -переходів. Слід додати, що параметр  $\xi$ , можна визначити за допомогою виразу:

$$\xi = \alpha Z / 2R_0 \gg 1,$$

де  $Z$  – ядерний заряд,  $R_0$  – радіус (див. [402-405]).

Для випадку переходу  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  зазначимо, що цей перехід не є

унікальним першої заборони (параметр  $\xi$  для розпаду плутонію  $\xi = 18$  (тобто,  $\xi \gg 1$ )).

Як відомо, для переважної більшості таких переходів першої заборони формули для ймовірності розпаду застосовуються з досить високим ступенем точності. Для понад дозволених  $\beta^\pm$ -переходів інтеграл  $\int I$  може бути розрахований точно (див. [402-405]):

$$\int I = [40(T \pm T_3) \cdot (T \pm T_3 + 1)]^{1/2},$$

де  $T_3$  – проекція ізоспіну для початкового ядра, що чисельно дорівнює  $\frac{1}{2}(Z - N)$ .

Якщо  $\beta$ -перехід відбувається між чистими ізоспіновими станами, то врахування мезонних обмінних струмів (як правило, внесок дає до кількох відсотків) не змінює цього результату, що обумовлено збереженням ізоспіну.

У випадку понад дозволених переходів  $0^+ \rightarrow 0^+$  між сусідніми членами ізомультиплета  $\int \sigma = 0$ , при  $T=1$ ,  $\int I = \sqrt{2}$ .

Для таких понад дозволених переходів значення  $f T_{1/2}$  майже однакові (табл. 5.3).

Таблиця 5.3 - Характеристики ряду дозволених  $\beta$ -переходів  $\lg ft$

Розпад	$Z_{\text{mat}} \rightarrow Z_{\text{daught}}$	$I_i^{\pi_i} \rightarrow I_f^{\pi_f}$	Тип	$E_0$ , кеВ	$T_{1/2}$	$\lg ft$
$^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$	15 → 16	1 / 2 <sup>+</sup> → 3 /	Дозволені	249	25,3 днів	5,0
$^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$	16 → 17	2 <sup>+</sup>	«»	167,4	87,4 днів	5,0
$^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$	20 → 21	3 / 2 <sup>+</sup> → 3 /	Понад	253	165 днів	6,0
$^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$	28 → 29	2 <sup>+</sup>	«»	65,8	100 днів	6,6
$^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$	44 → 45	7 / 2 <sup>-</sup> → 7 /	«»	39,4	367 днів	4,3
$^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$	63 → 64	2 <sup>-</sup>	«»	140,7	4,9 років	7,4
$^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$	94 → 95	1 / 2 <sup>-</sup> → 3 / 2 <sup>-</sup> 0 <sup>+</sup> → 1 <sup>+</sup> 5 / 2 <sup>+</sup> → 3 / 2 <sup>+</sup> 5 / 2 <sup>+</sup> → 3 / 2 <sup>-</sup>	Першої заборони	20,8	14,4 років	5,8

Проведені обчислення (для визначення розподілу заряду в ядрі була використана відома модель Гауса) дозволили отримати наступні значення періодів напіврозпаду: 1,55 с для переходу  $^{34}\text{Cl} \rightarrow ^{34}\text{S}$ , 0,67 с для переходу  $^{42}\text{Sc} \rightarrow ^{42}\text{Ca}$ . Шукані дані добре узгоджуються з експериментальними значеннями (відповідно:  $1,565 \pm 0,007$  с;  $0,683 \pm 0,002$  с). Для порівняння ми представляємо аналогічні дані, обчислені в рамках стандартної моделі атома Дірака-Фока (відповідно: 1,52; 0,64), а також в рамках методу Хартрі-Фока-Слейтера (відповідно: 1,4; 0,6) [412, 413].

Таким чином, можна вважати, що у запропонованому нами підході [247] більш коректно враховані обмінно-кореляційні та інші ефекти. Як бачимо, точність розрахунків у рамках стандартного та оптимізованого методу ДФ є цілком прийнятною. Здається важливим більш детально дослідити вплив вибору атомного поля на значення функції Фермі.

#### 5.4.2 Результати розрахунку впливу вибору виду атомного поля на характеристики $\beta$ -розпаду

У цьому підрозділі ми представляємо результати оцінки впливу на функцію Фермі вибору типу атомного поля, яке визначається у кожному методі обчислення по різному. Зауважимо, що в ряді робіт [247, 403, 412-440] для розрахунку характеристик бета-розпадів використовувались різні методи, зокрема, метод самоузгодженого нерелятивістського атомного поля NFS-ХФС<sub>нерел</sub>, метод релятивістського самоузгодженого поля RHFS-ХФС<sub>рел</sub> (з урахуванням релятивістських поправок у наближенні Брейта-Паулі), стандартний метод Дірака-Фока (ДФ+ДФ) та вдосконалений варіанти методу Дірака-Фока (ОДФ=ODF).

Для порівняння різних підходів розрахунок функції Фермі  $F(E,Z)$  проведено в умовах, подібних до розглянутих в роботах [405, 412, 413], а саме, у всіх випадках значення функцій вибираються на межі ядра  $R_0 = 1,202 A^{1/3}$  Фм при однаковому  $A$ . Відповідні чисельні результати розрахунку впливу вибору поля (ХФС<sub>рел</sub>, ХФС<sub>нерел</sub>, ODF) на функцію Фермі  $F(E,Z)$  для різних бета-розпадів наведені в таблицях 5.4, 5.5. В якості тестових величин розраховувалися параметри:

$$\Delta_1 = \{ [40 F_{ХФС}^{рел}(E,Z) / F_{ХФС}^{нерел}(E,Z) ] - 1 \} \cdot 100\%, \quad (5.61a)$$

$$\Delta_2 = \{[40 F_{\text{ОДФ}}^{\text{рел}}(E,Z) / F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.616)$$

в яких  $F_{\text{ХФС}}^{\text{рел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ХФС<sub>рел</sub>;

$F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ХФС<sub>нерел</sub>;

$F_{\text{ОДФ}}^{\text{рел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ОДФ.

Таблиця 5.4 - Вплив на функцію Фермі  $F(E,Z)$  для  $\beta$ -розпаду вибору поля (ХФС<sub>рел</sub>, ХФС<sub>нерел</sub>, ОДФ): значення  $\Delta_1$  (%)

$E_{\text{кін}}, \text{кеВ}$	$Z=20$	$Z=80$	$Z=95$
10	-0,05	-0,34	-0,56
50	-0,03	-0,34	-0,55
100	+0,01	-0,34	-0,45
500	+0,08	-0,30	-0,40

Примітка.  $\Delta_1 = \{[40 F_{\text{ХФС}}^{\text{рел}}(E,Z) / F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)] - 1\} \cdot 100\%$ , де  $F_{\text{ХФС}}^{\text{рел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ХФС<sub>рел</sub> [402,12];  $F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ХФС<sub>нерел</sub> [247, 412, 413, 418].

Таблиця 5.5 - Вплив на функцію Фермі  $F(E,Z)$  для  $\beta$ -розпаду вибору поля (ХФС<sub>рел</sub>, ХФС<sub>нерел</sub>, ОДФ): значення  $\Delta_2$  (%)

$E_{\text{кін}}, \text{кеВ}$	$Z=20$	$Z=44$	$Z=63$	$Z=80$	$Z=95$
10	-0,08	-0,10	-0,24	-0,56	-0,79
50	-0,06	-0,08	-0,23	-0,55	-0,77
100	+0,04	-0,07	-0,18	-0,54	-0,68
500	+0,13	-0,06	-0,14	-0,51	-0,61

Примітка.  $\Delta_2 = \{[40 F_{\text{ОДФ}}^{\text{рел}}(E,Z) / F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)] - 1\} \cdot 100\%$ , де  $F_{\text{ХФС}}^{\text{нерел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ХФС<sub>нерел</sub>;  $F_{\text{ОДФ}}^{\text{рел}}(E,Z)$  – функція Фермі в атомному полі ОДФ [247, 412, 413, 416-420].

Зауважимо також, що у всіх трьох розрахунках вплив скінченного розміру ядра враховувався в рамках моделі рівномірно зарядженої кулі. Як свідчать розрахунки, використання альтернативної моделі Гауса практично не позначається на точності отриманих результатів, хоча це більш зручно в обчислювальному відношенні.

Аналіз отриманих даних показує, що для малих і середніх значень заряду ядра, зокрема  $Z = 20$ , різниця між даними, отриманими на основі релятивістських методів ХФС та ОДФ, виявляється незначною, складаючи соті частки відсотка.

При великих значеннях  $Z$  (аж до  $Z = 95$ ), розрахунки в полі ХФС<sub>рел</sub> дали на 0,5% меншу величину для  $F(E,Z)$ , а в полі ОДФ – на 0,8%, порівняно з нерелятивістськими значеннями ХФС<sub>нерел</sub>. Причина такої різниці, очевидно, пов'язана з добре відомим ефектом релятивістського стиснення орбіталей.

Хвильова функція безперервного спектра (континууму) в більшій мірі екранується від заряду атомного ядра релятивістським полем атомних електронів, ніж нерелятивістським, і чим точніше враховані релятивістські ефекти, тим більше ефект.

#### 5.4.3 Результати розрахунку функції Фермі для $\beta^-$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції

У даному підрозділі проведена чисельна оцінка відмінностей значень функції Фермі  $F(E,Z)$  для  $\beta^-$ -розпаду при виборі різних визначень для шуканої величини. Як було зазначено вище, функція Фермі  $F(E,Z)$  обчислювалась нами, як на межі ядер, так і поблизу нуля. У першому випадку розрахунок функції Фермі  $F(E,Z)$  проводився за допомогою значень радіальних електронних хвильових функцій

$$f_{+l}^2(R_0) + g_{-l}^2(R_0)$$

на межі ядра (рівномірно зарядженого сферичного ядра), у другому – функція Фермі розраховувалась за допомогою квадратів амплітуд розкладання  $(N_{\kappa=+l}^2 + N_{\kappa=-1}^2)$  радіальних електронних хвильових функцій  $f_{+l}^2(0) + g_{-l}^2(0)$  при  $r \rightarrow 0$  [247, 412, 413, 420].

Зручною величиною, що характеризує шукану різницю, є параметр,

визначаємий як:

$$\Delta_3 = \{[40F(E,Z,R = 0) / F(E,Z,R = R_0)] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.62)$$

в якому  $F(E,Z,R=R_0)$  – значення функції Фермі, розраховане за значеннями радіальних електронних хвильових функцій на межі ядра;  $F(E,Z,R=0)$  – значення функції Фермі, розраховане з використанням амплітуд розкладання хвильових радіальних функцій поблизу нуля.

Результати розрахунку відмінностей значень функції Фермі  $F(E,Z)$  для  $\beta$ -розпаду при виборі двох різних визначень цієї величини наведені у таблиці 5.6. Вказана таблиця також містить результати нашого розрахунку в рамках методу ОДФ, а також, з метою порівняння, дані розрахунків в рамках релятивістської ХФС для ряду значень кінетичної енергії [247, 412, 413].

Таблиця 5.6 - Відмінності у функції Фермі  $F(E,Z)$  для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень для цієї величини:  $\Delta_3 = \{[40F(E,Z,R=0) / F(E,Z,R=R_0)] - 1\} \cdot 100\%$ , де  $F(E,Z,R=R_0)$  розрахована за значеннями радіальних електронних хвильових функцій на межі ядра, а  $F(E,Z,R=0)$  – за допомогою амплітуд розкладання радіальних електронних хвильових функцій поблизу нуля ( $R_0 = 1,2 A^{1/3}$  фм); ХФС – дані роботи; ОДФ – дані розрахунку в рамках теорії ОДФ [247, 402, 403, 405, 412, 413, 418]

$E_{kin}$ , кеВ	$\Delta_3$ , %				
	Z=20 HFS ODF	Z=44 ODF	Z=63 ODF	Z=80 ODF	Z=95 HFS ODF
0,1	1,35 1,39	5,44	12,72	23,25	33,9 36,8
1,0	1,37 1,42	5,53	12,84	23,36	34,1 37,2
50	1,38 1,45	5,58	12,95	23,58	34,2 37,6
500	1,50 1,58	5,84	13,10	24,61	35,5 39,88

Аналіз результатів показує, що зі збільшенням атомного числа  $Z$  різниця у значеннях функції Фермі, яка визначалась різними методами, різко зростає. Зміна інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$  виявляється подібною. Зокрема, розрахунок показав, що при переході від визначення  $F(E,Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $F(E,Z)$ , що обчислюється

за амплітудами при нулі, функція Фермі  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0=167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0=65,8$  кеВ) – на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0=140,7$  кеВ) – 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0=20,8$  кеВ) – на 32%. Зауважимо, що в літературі існують різні точки зору на правильність та прийнятність того чи іншого підходу щодо визначення функції Фермі. На наш погляд [247, 402-407, 412, 413], визначення функції Фермі з використанням амплітуд розкладання радіальних електронних хвильових функцій поблизу нуля є більш виправданим та раціональним.

Як зазначено у [247, 402-407, 412, 413, 420], додатковим фактором на користь цього твердження є той факт, що, виходячи з амплітуд розширення електронних хвильових функцій в нулі, зазвичай розраховують, наприклад, електронний фактор ЕО-конверсії  $\Omega(\text{EO})$ , поправки до коефіцієнтів внутрішньої конверсії для урахування аномалій тощо.

Розглянемо тепер питання щодо області утворення інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$ . Зручним параметром для цієї оцінки є величина, що використана в ряді робіт [247, 412]:

$$y = \int_0^x F(E, Z) E p (E_0 - E)^2 dE / \int_0^{E_0} F(E, Z) E p (E_0 - E)^2 dE. \quad (5.63)$$

У таблиці 5.7 наведені наші розрахункові дані щодо області формування інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$  для серії  $\beta$ -розпадів, зокрема, розпадів:  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ .

Таблиця 5.7 - Область формування інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$  (наші дані)

$E_0$ , кеВ	$\beta$ -розпад	$y$ , %			
		$x / E_0$ =0,3	0,5	0,7	0,9
20,8	$^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$	67	89	99	100
39,4	$^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$	66	88	98	100
65,8	$^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$	65	87	97	100
140,7	$^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$	63	84	96	100
167,4	$^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$	58	81	95	100
249	$^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$	53	78	93	100
253	$^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$	52	77	91	100

Аналіз даних таблиці 5.7 показує, що для значень енергії, починаючи з  $x=0,7E_0$ , і далі до  $x = 0,9E_0$ , набирається 100% інтегралу для функції  $f(E_0, Z)$ .

При значенні енергії  $x = 0,5E_0$  набирається приблизно  $\sim 80\%$  інтегралу для функції  $f(E_0, Z)$ . В результаті виявляється, що на інтегральну функцію Фермі впливають поправки, які є значущими для малих значень енергії випромінюваної  $\beta$ -частинки.

Далі буде досліджено питання щодо кількісної оцінки впливу обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функцій Фермі.

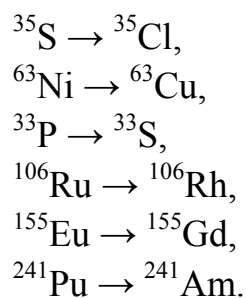
#### 5.4.4 Результати розрахунку впливу обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях на значення інтегральної функції Фермі

Розроблений нами підхід допускає повне врахування обмінних, а також кореляційних ефектів.

У даному підрозділі ми розглянемо вплив урахування зазначених ефектів в електронних хвильових функціях на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі.

Слід зауважити, що питання врахування обмінних ефектів вже розглядалося раніше в літературі [402-407, 412, 413, 418]. Вивчення питання щодо урахування впливу кореляційних ефектів тут розглядається вперше.

У таблиці 5.8 наведені результати обчислення внеску величини повного урахування обміну в електронних хвильових функціях дискретного та неперервного спектрів на значення інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$ ; на основі різних підходів [247, 251, 402-407, 412, 413, 418-420] були розглянуті переходи:





Таблиця 5.8 - Внесок величини повного урахування обміну в електронно-хвильових функціях дискретного та неперервного спектрів до значень інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$  для деяких переходів

Розпад	$E_0$ , кеВ	$f(E_0, Z)$ ODF	$f(E_0, Z)$ DF	$f(E_0, Z)$ HFS <sub>rel</sub>	$\Delta_4$ , %	$\Delta_5$ , %
$^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$	167,4	$1,3461 \cdot 10^{-2}$	$1,3556 \cdot 10^{-2}$	$1,3682 \cdot 10^{-2}$	-1,6	-0,9
$^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$	39,4	$6,2375 \cdot 10^{-4}$	$6,4304 \cdot 10^{-4}$	$6,6304 \cdot 10^{-4}$	-5,9	-3,0
$^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$	140,7	$8,6124 \cdot 10^{-2}$	$8,7025 \cdot 10^{-2}$	$8,8817 \cdot 10^{-2}$	-3,0	-2,0
$^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$	20,8	$1,5896 \cdot 10^{-3}$	$1,6424 \cdot 10^{-3}$	$1,7208 \cdot 10^{-3}$	-7,6	-4,6

Примітка.  $\Delta_4 = \{[40 f(E_0, Z) \text{OD}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1\} \cdot 100\%$ , де  $f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  – інтегральна функція Фермі, обчислена в наближенні  $\text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  з неповним урахуванням обмінних ефектів;

$\Delta_5 = \{[40 f(E_0, Z) \text{D}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1\} \cdot 100\%$ , де  $f(E_0, Z) \text{D}\Phi$  – інтегральна функція Фермі, обчислена в наближенні  $\text{D}\Phi$  з повним урахуванням обмінних (обмінно-кореляційні) ефектів.

В якості характерних параметрів, що визначають внесок шуканих ефектів, взяті величини:

$$\Delta_4 = \{[40 f(E_0, Z) \text{OD}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.64a)$$

$$\Delta_5 = \{[40 f(E_0, Z) \text{D}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.64b)$$

де  $f(E_0, Z) \text{OD}\Phi$  – інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні ODF з повним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів;  $f(E_0, Z) \text{D}\Phi$  – інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні  $\text{D}\Phi$  з повним урахуванням обмінних ефектів;  $f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  – інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні  $\text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  з неповним врахуванням обмінних ефектів.

В якості ODF значень використані результати нашого розрахунку з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів ( $\Delta_4$ ), а також для порівняння –

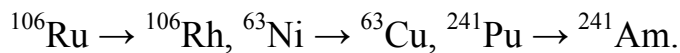
результати класичного DF розрахунку Band-Listengarten-Trzhakovskaya ( $\Delta_5$ ) та аналогічні дані DKS розрахунку Glushkov-Dubrovskaya et al. з урахуванням обмінних ефектів [247, 402, 412, 413, 418-420]

Аналіз отриманих даних свідчить про те, що із збільшенням повноти урахування обмінних (і в подальшому обмінно-кореляційних) ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру поправка на енергію зростає із зменшенням граничної енергії. Відносна зміна інтегральної функції Фермі, наприклад, для переходу  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  становить 7,6%.

#### 5.4.5 Результати розрахунку впливу обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях на значення функції Фермі

В даному підрозділі буде розглянуто питання щодо впливу врахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі.

У таблицях 5.9, 5.10, 5.11 наведені дані наших ODF обчислень значень функції Фермі  $F(E, Z)$  для розпадів:



Таблиця 5.9 - Функція Фермі  $F(E, Z)$  та вплив на неї повного урахування обміну (кореляції) у хвильових функціях ДФ дискретного та неперервного спектрів (перехід:  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ )

$E_{\beta^-}$ кін, кеВ	Z=45 ODF	$F(E, Z) ^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}; E_0 = 39,4 \text{ кеВ}$			- $\Delta_6$ , %	- $\Delta_7$ , %	- $\Delta_8$ , %
		DF	HFS <sub>rel</sub>	Coulomb			
0,51404	84,0894	86,3579	93,6620	95,3163	10,2	7,8	1,7
2,6582	38,7465	39,6767	41,2162	42,0030	6,0	3,7	1,9
6,3456	25,6136	26,1625	26,8605	27,3434	4,6	2,6	1,8
16,767	16,0977	16,3667	16,6530	16,9466	3,3	1,7	1,7
28,233	12,6721	12,7921	12,9745	13,2067	2,3	1,4	1,8
39,314	10,8741	10,9863	11,1218	11,3237	2,2	1,2	1,8

Для порівняння також наведені деякі значення функції  $F(E,Z)$ , розраховані методом  $HFS_{rel}$ , стандартним методом DF, а також у наближенні кулонівського поля (Coulomb approximation) з урахуванням кінцевих розмірів ядра (дані взяті з [247, 251, 402-407, 412, 413, 418-420]).

В якості характерних параметрів, що визначають внесок шуканих ефектів, зручно оперувати величинами:

$$\Delta_6 = \{[40 F(E,Z)ODF / F(E,Z)HFS_{rel}] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.65a)$$

$$\Delta_7 = \{[40 F(E,Z)DF_{обм} / F(E,Z)HFS_{rel}] - 1\} \cdot 100\%, \quad (5.65б)$$

$$\Delta_8 = \{[40 F(E,Z)HFS_{rel} / F(E,Z)_{Coulomb}] - 1\} \cdot 100\%. \quad (5.65в)$$

де  $F(E,Z)KЭД$  – функція Фермі, обчислена в оптимізованому наближенні ODF з повним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів;  $F(E,Z)DF_{обм}$  – функція Фермі, обчислена в апроксимації DF з повним урахуванням обмінних ефектів;  $F(E,Z)HFS_{rel}$  – функція Фермі, обчислена в наближенні  $HFS_{rel}$  з неповним врахуванням обмінних ефектів;  $F(E,Z)_{Кулон}$  – функція Фермі (Coulomb approximation).

Таблиця 5.10 - Функція Фермі  $F(E,Z)$  та вплив на неї повного урахування обміну (кореляції) у хвильових функціях ДФ дискретного та неперервного спектрів (перехід:  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ )

$E_{\beta^-}$ кін, кеВ	$F(E, Z) ^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}; Z = 29; E_{gp} = 65,8 \text{ кеВ}$			$\Delta_6,$ %	$\Delta_8,$ %
	ODF	$HFS_{rel}$	Coulomb		
0,85858	29,3481	31,5491	31,8710	-7,0	-1,0
4,4394	13,4118	13,9167	14,0385	-3,6	-0,9
10,547	8,8123	9,0867	9,1751	-3,0	-1,0
28,002	5,6136	5,7411	5,8094	-2,2	-1,2
47,159	4,5388	4,6076	4,6644	-1,5	-1,2
65,657	4,019	4,0652	4,1132	-1,1	-1,2

Аналіз даних, наведених в таблицях 5.9-5.11, показує, що поправка, пов'язана з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях дискретного та безперервного спектрів, при низькій енергії суттєво перевищує поправку на екранування (відносно до кулонівського поля), яка виявляється за допомогою методу  $XFC_{\text{рел}}$ , однак із зростанням енергії поправка на екранування поступово зрівнюється з обмінним внеском.

Таблиця 5.11 - Функція Фермі  $F(E,Z)$  та вплив на неї повного урахування обміну (кореляції) у хвильових функціях ДФ дискретного та неперервного спектрів (перехід:  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ )

$E_{\beta^-}$ кін, кеВ	Z=95	$F(E,Z) ^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}; E_0 = 20,8 \text{ кеВ}$			$\Delta_6$ , %	$\Delta_7$ , %	$\Delta_8$ , %
	ODF	DF	HFS <sub>rel</sub>	Coulomb			
0,27137	2014,23	2075,86	2316,49	2431,60	-13,0	-10,4	-4,7
1,4033	944,398	961,517	1018,29	1069,57	-7,3	-5,6	-4,8
3,3341	621,733	634,238	661,040	694,165	-5,9	-4,1	-4,0
8,8517	391,341	394,909	406,591	426,528	-3,8	-2,9	-4,7
14,907	303,167	306,220	313,858	329,084	-3,4	-2,4	-4,6
20,755	259,001	260,587	266,528	279,230	-2,8	-2,2	-4,5

З цього можна зробити висновок, що графік Кюрі, побудований за нашими обчисленими даними  $F(E,Z)$  або за даними стандартного розрахунку ДФ (напр., [247, 251, 402-407, 412, 413, 418-420]), у порівнянні з результатами аналогічних даних на основі методу  $XFC_{\text{рел}}$ , в області малих значень енергії буде мати перевищення над прямою, яка проведена по точках з більшою енергією. Такий надлишок може імітувати масивне нейтрино з ненульовою масою у кількості 1,8% від числа розпадів.

## 5.5 Висновки до розділу 5

1. Для розрахунку характеристик  $\beta$ -розпаду атомних систем (ядер) з ефективним коректним одночасним урахуванням обмінно-кореляційних, ядерних, радіаційних поправок адаптовано новий формалізм релятивістської калібрувальної-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF; закладені основи нового напрямку у сучасній комбінованій атомно-бета-ядерній спектроскопії.

2. На основі нового підходу отримані дані по характеристикам цілої серії дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів, а саме – дані для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ .

3. Кількісно досліджено вплив хімічного оточення атома на характеристики (інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду) дозволених  $\beta$ -переходів; отримано результати точного розрахунку параметрів бета-розпаду, проведено їх порівняння з альтернативними теоретичними даними; показано, що при переході від визначення  $F(E,Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $F(E,Z)$ , що обчислюється за амплітудами при нулі, функція  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0 = 167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0 = 65,8$  кеВ) – на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0 = 140,7$  кеВ) – на 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0 = 20,8$  кеВ) – на 32%.

4. Отримані результати обчислення функції Фермі для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції; розраховано вплив вибору виду атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також вплив урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функцій Фермі та інтегральних функцій Фермі; показано, що поправка, пов'язана з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях дискретного та безперервного спектрів, при низькій енергії суттєво перевищує поправку на екранування (відносно до кулонівського поля), однак із зростанням енергії поправка на екранування поступово зрівнюється з обмінним внеском.

Основні наукові результати, викладені в даному розділі, опубліковано в роботах: [247, 249-251, 255-260, 274, 275, 282, 284, 285, 297].

## ВИСНОВКИ

У данній монографії наведено нове вирішення наукової проблеми, що виявляється в розробці теоретичних основ нової прецизійної релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних адронних (каонних) систем з одночасним коректним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів на основі формалізму комбінованої калібрувальної-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу, нового ефективного релятивістського підходу до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких систем в межах прецизійної кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем. Розвинені в даній роботі вперше в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії принципово нові підходи і отримані на їх основі в переважній більшості із спектроскопічною точністю вперше оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в сучасній теоретичній оптиці і спектроскопії важких атомних систем.

Основні узагальнені результати і висновки до представленого матеріалу зводяться до наступного:

1. На основі методології апарату КЕД теорії збурень та фейнманівської діаграмної техніки та адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розвинуто теоретичні основи нового ефективного методу комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу для послідовного опису та розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних атомних систем з послідовним, максимально прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів (включаючи ефекти Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також Bohr-Weisskopf) та радіаційних КЕД поправок (у т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ, зокрема, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  тощо).

2. На основі адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розвинуто теоретичні основи нової послідовної калібрувальної-інваріантної *ab initio*

версії релятивістського енергетичного підходу з метою подальшої побудови оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів за принципом мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з дірак-фоківським нульовим наближенням ODF.

3. Розроблено теоретичні основи нової калібрувально-інваріантної версії релятивістського енергетичного підходу до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) характеристик важких релятивістських багатоелектронних атомів з використанням формалізму калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF й ефективним прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів.

Вперше в межах RMBPT-ODF адаптована узагальнена техніка обчислення матричних елементів оператора релятивістської міжелектронної взаємодії, що включає кулонівську, брейтівську магнітну взаємодію, з використанням методу диференціальних рівнянь.

4. В рамках нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим ODF нульовим наближенням розвинуто і теоретично обґрунтовано новий прецизійний підхід до урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (як при обчисленні енергетичних спектрів після діагоналізації секулярної матриці, так й амплітуд, сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів з урахуванням багаточастинкових обмінно-поляризаційних поправок), як ефектів другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків ТЗ, у т.ч. поляризаційної міжквазічастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по неозорому набору конфігурацій та суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та урахуванню станів континууму в межах узагальненої релятивістська ODF версії методу штурмовських розкладань.

5. В рамках формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням

ODF удосконалено послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів (зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризації вакууму тощо) з використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges (у стандартній версії FGRP визначається як сума потенціалу Uhling-Serber, внесків від електричного і магнітного форм-факторів, членів, що враховують внески поправок вищих порядків типу Källen-Sabry та Wichmann-Kroll тощо).

6. З метою апробації нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу виконано розрахунки енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та E2 переходу  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі  $Hg^+$ , енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$  (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) важкого атому свинцю Pb, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{9/2,7,2}$  атому Європію Eu I; отримано нову інформацію щодо надважкого елемента ніхонія  $^{278}_{113}Nh$  (виконано розрахунок спектру низько розташованих рівнів з урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних та обмінно-кореляційних поправок).

В роботі зроблено висновок, що розвинутий підхід у порівнянні зі стандартними неоптимізованими релятивістськими методами HF та DF дозволяє отримати більш точні дані як по енергіях, так й амплітудам та ймовірностям радіаційних переходів, що обумовлено використанням оптимізованого нульового наближення ODF, досить повним ефективним урахуванням складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (внесок за рахунок поляризації остову досягає 30% від значення сили осцилятора; величина калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційну ширину складає долі проценту на відміну від усіх існуючих методів сучасної атомної спектроскопії, для яких внесок досягає 5-50%).

7. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського



енергетичного підходу отримано нові дані для енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ , енергії і сили осциляторів переходів  $6s^2 6p^2 P_{1/2} - 6s^2 nd^2 D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^2 6p^2 P_{1/2} - 6s^2 ns^2 S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ).

Показано, що у порівнянні з методом HF, а також загальновідомим кулонівським наближенням, які дають недостатньо точні дані як по енергіях, так і ймовірностям радіаційних переходів, розроблений підхід забезпечує фізично розумну узгодженість з експериментальними даними за рахунок використання оптимізованого нульового наближення ODF та досить повного урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів.

8. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові прецизійні дані для енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  атому ітербію Yb, сил осциляторів радіаційних переходів, зокрема,  $4f^{14} 6s^2 {}^1S_0 - 4f^{14} 6s6p$ ,  $4f^{14} 6s^2 {}^1S_0 - 4f^{14} 6s7p$ , енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13} [{}^2F_{7/2}] 6s^2 np [5/2]_2$ ,  $4f^{14} [{}^2F_{7/2}] 6s^2 nf [5/2]_2$ , причому вперше для деяких рідбергівських резонансів вперше передбачені значення їх енергій та ширин.

Показано, що точність опису спектроскопічних характеристик залежить від ключових факторів: одночасного прецизійного врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів та використання оптимізованих базисів орбіталей.

9. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові прецизійні дані для енергій та ширин збуджених, у т.ч. автоіонізаційних станів атома тулію Tm  $4f_{j}^{-1} 6s(J12)nsnp[J]$  з квантовим числом  $n=25-50$ , зокрема, наведені значення енергій, ширин автоіонізаційних станів  $4f_{7/2}^{13} 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13} 6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{7/2}^{13} 6s_{1/2}(3)np_j[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13} 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13} 6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (розпад проходить як по стандартному каналу Бейтлера-Фано (BFD), так й новому для сучасної атомної спектроскопії каналу реорієнтаційного типу ROD, або по обидва каналам одночасно), а також – нові дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1} 6s_{1/2}(J')n_R 1_R j_R [J]$  ( $j, J', j_R, J$ ) = 1/2-5/2.

Вперше виявлено унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії ітербію та тулію, пов'язані з аномально малими ширинами автоіонізаційних, рідбергівських резонансів, що може бути пояснено виключно надто складною некулонівською енергетикою відповідних атомних систем і одночасно дає суттєві переваги при пошуку нових оптимальних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів (той же уран, плутоній тощо); узагальнено інформацію щодо важких атомів типу лантаноїдів та актиноїдів, урану, та можливо трансуранових елементів тощо.

10. За результатами розрахунку енергій орбіталей для атому урану (ізоп  $^{92}\text{U}$ ) в роботі зроблено висновок про високу ефективність релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим нульовим наближенням ODF у порівнянні з альтернативними та найбільш ефективними підходами сучасної атомної спектроскопії (стандартний релятивістський метод Hartree-Fock, стандартні версії Dirac-Fock, Dirac-Kohn-Sham etc.).

Вперше отримано прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня  $32899.790 \text{ cm}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5880-5890) \text{ \AA}$ ), нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790 \text{ cm}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137) \text{ \AA}$ ), рівня  $32857.449 \text{ cm}^{-1}$  ( $5f36d7s8s \ ^7L_5^0$ ); послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914) \text{ \AA}$ ), а також рівня  $33083.3 \text{ cm}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951) \text{ \AA}$ ).

На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість значень енергії *встановлено*, що наведена у літературі фактично єдина інформація по вказаним вище рідбергівським серіям  $^{92}\text{U}$  (групи Solarz et al. (Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory, University of California)) містить певні неточності, що пояснюється вкрай високою складністю шуканих рідбергівських серій.

11. Вперше в рамках релятивістської спектроскопії важких екзотичних адронних (каонних) атомних систем запропоновано та розвинуто новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку їх спектрів та спектроскопічних характеристик на основі релятивістських рівнянь Klein-Gordon-Fock (каон) та Dirac (електронна підсистема) з одночасним урахуванням електромагнітної (шляхом побудови ефективного самоузгодженого потенціалу, який складається з суми

релятивістського кулонівського потенціалу, електричного потенціалу скінченно-розмірного ядра, узагальненого радіаційного потенціалу FGPR типу Flambaum-Ginges) та сильної каон-ядерної взаємодії з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу.

12. Проведено тестування нової релятивістської теорії екзотичних багатоелектронних каонних атомних систем шляхом порівняння з альтернативним підходами на основі отриманих результатів розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також відповідно ймовірностей вказаних радіаційних переходів, енергії переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного свинцю.

Показано, що найбільший внесок в енергію переходу визначається основним кулонівським членом, але внесок радіаційних поправок, зокрема, поправки за рахунок поляризації вакууму (включаючи вищі порядки) є суттєвим для отримання спектроскопічної точності визначення відповідної енергії переходу.

13. З метою отримання нової інформації про важкі каонні атоми, а також тестування нової релятивістської теорії виконано докладні розрахунки енергетичних та спектроскопічних характеристик важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану  $^{238}\text{U}$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії.

Порівняння експериментальних та альтернативних теоретичних даних (зокрема, отриманих на основі каскадної моделі Fermi-Teller з використанням коду Leon-Seki, послідовних теоретичних Klein-Gordon-Fock методів Indelicato et al., Batty et al., Khetselius et al.) вказує на принципову необхідність прецизійного урахування перелічених вище груп поправок для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією й дуже складним експериментом.

14. В рамках кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем розвинуто новий ефективний релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких атомних систем, який базується на основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським наближенням ODF та узагальненого релятивістського енергетичного

підходу.

Реалізовані процедури обчислення функції Фермі для  $\beta^-$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції, оцінки впливу вибору виду самоузгодженого атомного поля на характеристики  $\beta^-$ -розпаду, а також впливу урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі.

15. Вперше на основі нового підходу отримано результати щодо характеристик цілої серії дозволених (понад дозволених)  $\beta^-$ -розпадів, а саме – дані для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ ; кількісно досліджено вплив хімічного оточення атома на характеристики (інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду) дозволених  $\beta^-$ -переходів і проведено порівняння отриманих даних з результатами альтернативних обчислень з використанням неоптимізованих методів релятивістського Hartree-Fock, стандартних версій Dirac-Fock, Dirac-Kohn-Sham.

Встановлено, що при переході від визначення  $F(E,Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $F(E,Z)$ , що обчислюється за амплітудами при нулі, функція  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0 = 167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0 = 65,8$  кеВ) – на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0 = 140,7$  кеВ) – 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0 = 20,8$  кеВ) – на 32%.

Підтверджено, що поправка, пов'язана з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях дискретного та безперервного спектрів, при низькій енергії суттєво перевищує поправку на екранування (відносно до кулонівського поля), однак із зростанням енергії поправка на екранування поступово зрівнюється з обмінним внеском.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Grant I. Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules. Oxford: Oxford Univ. Press, 2007. 650p.
2. Glushkov A.V. Relativistic and Correlation Effects in Spectra of Atomic Systems. Odessa: Astroprint, 2006.
3. Glushkov A.V. Relativistic quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems. Odessa: Astroprint, 2008. 900p.
4. Glushkov A.V. Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field. // Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Hotokka M., Brändas E., Maruani J., Delgado-Barrio G. Springer, Cham, 2013. Vol. 27. Pp 161-177.
5. Glushkov A.V. Optimal laser methods for the separation of isotopes and nuclear isomers (physics of processes). Odessa: Astroprint, 2013. P. 350.
6. Glushkov A.V. Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field // Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry; edited by: M.Hotokka, J.Maruani, E. Brändas, G.Delgado-Barrio. Berlin, Springer, 2013. Vol.28. Part2. Chapter9. Pp.71-96.
7. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge // Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry.; edited by: P.Hoggan, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch. Berlin: Springer, 2011. Vol.22. Pp.51-70.
8. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the  $\beta$ -Decay parameters // Advances in the Theory of Atoms, Molecular Systems and Condensed Matter. Berlin: Springer, 2009. Vol.19. Pp.301-328.
9. Glushkov A.V. Advanced relativistic energy approach to radiative decay processes in multielectron atoms and multicharged ions // Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Progress in Theoretical Phys.and Chem.; edited by: K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch. Berlin: Springer., 2012. Vol.26. Pp.231-248.

10. Khetselius O.Yu. Relativistic energy approach to cooperative electron-gamma-nuclear processes: NEET Effect // Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry.; edited by: K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch Berlin, Springer., 2012. Vol.26. Pp.217-230.
11. Badnell N.R. Calculations for electron-ion collisions and photoionization processes for plasma modeling // J. of Phys.: C Ser. (IOP)., 2007. Vol.88. Pp.012070 (12p.).
12. Dirac *R*-matrix calculations of electron-impact excitation of neon-like krypton / Griffin D.C., Balance C.P., Mitnik D.M., et al // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2008. Vol.41. Pp.215201.
13. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Filatov V.V. S-Matrix formalism calculation of atomic transition probabilities with inclusion of polarization effects. // Sov Phys Journal 32 №12., 1989. Pp. 1010-1014.
14. Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. Approaches to development of gamma ray lasers // Rev.Mod.Phys. 1981. Vol.53. №.4. Pp.687-742.
15. Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., et al., Odessa: TEC., 2015.
16. Летохов В.С. Применение лазеров в ядерно-физических исследованиях // Применение лазеров в атомной, ядерной и молекулярной физике. Ред. Прохоров А.М., Летохов В.С. Москва.: Наука,1979. С.413-426.
17. Басов Н.Г., Летохов В.С. Оптические стандарты частоты // УФН, 1968. Т.96 .С. 12
18. Glushkov A.V., Ivanov L., Letokhov V. Nuclear quantum optics // Preprint of Inst.of Spectroscopy. USSR Acad.Sci.(ISAN), 1991. AS4. Pp.1-16.
19. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах. Москва.: Наука,1983. С.408.
20. Импульсные СО2-лазеры и их применение для разделения изотопов / Велихов Е.П., Баранов В.Ю., Летохов В.С. и др. Москва : Наука, 1983. С. 380.
21. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P. Radiation decay of atomic states: Generalized energy approach // Autoionization Phenomena in Atoms. Moscow: Moscow State Univ., 1986. Pp.58-160.
22. Glushkov A., Ivanov L. N. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions P.Lett.A, 1992. Vol.170(1). Pp.33-38.

23. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics // *Europ.Phys.Journ.*, 2008. Vol.160. Pp.195-204.
24. Dietz K., Heß B.A. Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics // *Phys.Scripta.*, 1989. Vol.39. Pp.682-688.
25. Ivanova E.P., Grant I. Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling // *J.Phys.B.*, 1998. Vol.31. Pp. 2871-2883.
26. Glushkov A.V., Ivanov L.N. DC Strong-Field Stark-Effect: consistent quantum-mechanical approach // *J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 1993. Vol.26. № 16. Pp.L379-L386.
27. Ivanov L.N., Ivanova E.P. Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra // *Atom.Data Nucl. Data Tab.*, 1979. Vol.24. Pp.95-121.
28. High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions / Ivanova E., Ivanov L., Glushkov A., et al // *Phys.Scripta.*, 1985. Vol.32. № 4. Pp.512-524.
29. Glushkov A.V., Ivanova E.P. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of F-, Ne-Isoelectronic Sequences // *Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer. (USA).*, 1986. Vol.36. № 2. Pp.127-145.
30. Spectrum of plasma containing Ne-and Na-like ions: Consistent account for Rydberg and autoionization Rydberg series / Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.V., et al // *Phys. Scripta*, 1996. Vol.53. Pp.653-667.
31. Глушков А.В. Релятивистский поляризационный потенциал многоэлектронного атома // *Изв.вузов.Сер.Физика.*, 1992. Т.41. №9. С.3-8.
32. Иванов Л.Н., Летохов В.С. Селективная ионизация атомов в электрическом и лазерном по-лях // *Квантовая эл-ка.*, 1975. Т.2. С.585-590.
33. Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths // *Phys.Rev.A.*, 1993. Vol.48. Pp.4365-4374.
34. Иванов Л.Н., Иванова Е.П. Метод штурмовских орбиталей в расчетах физических характеристик излучения атомов // *ЖЭТФ.*, 1996. Т.110. С.483-498.

35. Глушков А.В. Отрицательные ионы инертных газов // Письма в ЖЭТФ., 1992. Т.55. № 2 С.104-107.
36. Глушков А.В. Квазичастичный подход в теории функционала плотности при конечных температурах и динамика эффективного бозе-конденсата // Укр. Физ. журн., 1993. Т.38. №8. С.152-157.
37. Cooperative laser-electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multi-charged ion in laser field / Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Svinarenko A.A. et al // Int. Journal of Quantum Chemistry., 2004. Vol.99. №5. Pp.889-893.
38. Atomic data for radioactive elements Ra I, Ra II, Ac I and Ac II and application to their detection in HD 101065 and HR 465 / Quinet P., Argante C., Fivet V., et al // Astronomy & Astrophys., 2007. Vol.474. Pp.307-314.
39. Рагозин Е.Н., Собельман И.И. Лазерные источники в мягкой рентгеновской области спектра // УФН., 2005. Т.175. С.1139-1141
40. Bieron J., Pyykkö, P. Degree of accuracy in determining the nuclear electric quadrupole moment of radium // Phys.Rev.A., 2005. Vol.71. Pp.032502.
41. Drake G.W.F. High precision calculations and QED effects for two-and three-electron atoms // Phys.Scripta T. ,1993. Vol.46. Pp.116-124.
42. Quantum-electrodynamics corrections in pionic hydrogen / Schlessler S., Le Bigot E.-O., Indelicato P., et al // Phys.Rev.C., 2011. Vol.84. Pp.015211 (8p.).
43. Khetselius O.Yu., Relativistic Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure Parameters for Some Heavy-Element Isotopes // Int. Journ. of Quantum Chemistry., 2009. Vol.109. №14. Pp. 3330-3335.
44. Glushkov A., Malinovskaya S. Co-operative laser nuclear processes: border lines effects // New projects and new lines of research in nuclear physics.; edited by: G.Fazio and F.Hanappe, Singapore: World Sci., 2003. Pp.242-268.
45. Excitation dependence of resonance line self-broadening at different atomic densities / Li H., Sautenkov V.A., Rostovtsev Yu.V., et al // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2009. Vol.42. Pp.065203.
46. Stochastic dynamics of the atomic systems in the crossed electric and magnetic field: the rubidium atom recurrence spectra / Rusov V.D., Glushkov A.V., Korchevsky D., et al // Вісник Київського унів-ту. Сер.фіз.-мат., 2004. №4. С.524-529.
47. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum / Glushkov A.V., Lepikh



- Ya.I., Fedchuk A.P., et al // Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine), 2008. №4. Pp.5-11.
48. Ivanova E., Zinoviev N. The possibility of X-ray lasers based on inner-shell transitions of Ne-like ions // Phys. Lett. A., 2000. Vol.274. Pp.239-246.
49. Derevianko A., Porsev S.G. Dressing lines and vertices in calculations of matrix elements with the coupled-cluster method and determination of Cs atomic properties // Phys.Rev. A., 2005. Vol.71. Pp.032509.
50. Lifetime and hyperfine structure of  $^3D_2$  state of radium / Bieron J, Froese-Fischer C., Fritzsche S., et al // J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys., 2004. Vol.37. Pp.L305-311.
51. Safronova U.I., Safronova M.S. Third-order relativistic many-body calculations of energies, transition rates, hyperfine constants, and blackbody radiation shift in  $^{171}\text{Yb}^+$  // Phys. Rev. A., 2009. Vol.79. Pp.022472.
52. Volz U. Precision lifetime measurements on alkali atoms on helium by beam-gas-laser spectroscopy // Phys.Scr., 1996. Vol.65. № 1. Pp.48-56.
53. Extensive double-excitation states in atomic helium / Domke M., Xue C., Puschmann A., et al // Phys. Rev. Lett., 1991. Vol.66. Pp. 1306-1309.
54. Blumell R., Reinhardt W.P. Quantum Chaos in atomic spectra // Quantum Chaos.; edited by: Casati G., Chirikov B. Cambridge: Cambridge Univ. Press., 1995. Pp.301-318.
55. Zakrzewski J., Dupret K., Delande D. Statistical Properties of Energy Levels of Chaotic Systems: Wigner or Non-Wigner // Phys. Rev. Lett., 1995. Vol.74. Pp.522-525.
56. Quantum stochastic modeling energy transfer and effect of rotational and v-t relaxation on multi-photon excitation and dissociation for  $CF_3Br$  molecules / Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Shpinareva I.M., et al // Journ.Quant.Chem., 2005. Vol.104. №4 . Pp. 512-516.
57. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant resonances in analysis of reaction ( $\mu$ -n) on nucleus  $^{40}\text{Ca}$  / Glushkov A.V., Lovett L., Khetselius O.Yu., et al // Internat. J. of Modern Physics A. Particles, Nucl.Phys., 2009. Vol.24. № 2-3 Pp.611-615.
58. Observation of a Large Atomic Parity Violation Effect in Ytterbium / Tsigutkin K., Dounas-Frazer D., Family A., et al // Phys.Rev.Lett., 2009. Vol.103. Pp.071601 (5p).
59. Blundell S.A. Ab initio Calculations of QED Effects in Li-like, Na-like and Cu-like Ions // Phys.Scripta., 1993. Vol.46. № 1.Pp.144-150.

60. Ivanov L., Ivanova E., Driker M.N. Precision calculation of the energies of heavy hydrogen-like ions // *Opt. Spectr.*, 1983. T.55. № 2. Pp. 224-229.
61. Ivanov L.N., Ivanova E.P., Driker M.N. Taking into account the polarization of vacuum in the spectra of heavy hydrogen-like ions // *Opt.Spectr.*, 1981. T.50. №. 4 . Pp.551-555.
62. Ivanov L., Letokhov V. Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements atoms // *At.Mol.Phys.*, 1985. Vol.4. Pp.169-184.
63. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models / Glushkov A., Ambrosov S., Khetselius O., et al // *Nucl. Phys.A.: Nucl.and Hadr. Phys.*, 2004. Vol.734. Pp.21-28.
64. Глушков А.В., Иванов Л.Н. КЭД теория сдвига и деформации радиационных атомных линий в поле лазерного излучения // Труды 3 сем. по Атом. Спектр. - Черногоровка: ФИХФ, 1992. С.113-114; Пре-принт Института Спектроскопии. №AS-3. Москва-Троицк, 1991.
65. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V. Modern Trends in Spectroscopy of multi-charged Ions // *Physics Rep.*, 1988. Vol.166. №6. Pp.315-390.
66. Temkin A., Autoionization // *Atomic, Molecular and Optical Handbook.*; edited by: Drake G.W. Ney-York: AIP Press., 1996. Pp.310-318.
67. Johnson W., Sapistein J., Blundell S. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines // *Phys.Rev.A.*, 1988. Vol.37. Pp.307-315.
68. Madden R., Codling K. New Autoionization atomic energy levels in He, Ne, Ar // *Phys.Rev.Lett.*, 1963. Vol.10. Pp.516-520.
69. Ho Y.K., Autoionizing  $^1P^0$  states of He between the N=2 and 3 threshold of  $He^+$  // *Phys.Rev.A.*, 1991. Vol.44. Pp.4154-4161.
70. Calculations of  $(nl)^2$  and  $(3lnl')$  autoionizing states in two-electron systems / SakhoI., Konté K., Ndao A.S., et al // *Physics Scripta.*, 2010. Vol.82. Pp. 035301 (8pp).
71. Aggarwal K.M., Keenan F.P. Energy levels, radiative rates and electron impact excitation rates for transitions in He-like Kr XXXV // *Physics Scripta. GRASP FAC AS.*, 2012. Vol.86. Pp.035302 (12p.)
72. Dzuba V., Flambaum V., Gribakin G. Fine structure of negative ions of alkaline–earth metal atoms // *Phys.Rev.A*, 1991. Vol.44. Pp.1013-1018.
73. Fine structure of negative ions of alkaline–earth metal atoms / Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., et al // *Phys. Rev.A*, 1991. Vol.44. Pp.2823-2831.

74. Van Leuwen R., Ubachs W., Hogervorst W. Autoionization of low-lying 5dng states in barium // *J.Phys.B. Atom.Mol.Opt.Phys.*, 1994. Vol.27. Pp.3891-3904.
75. Polarization effects in Autoionization processes: The 5d5g states in barium / Luc Koenig E., Aymar M., Van Leeuwen R., et al // *Phys.Rev.A.*, 1995. Vol.52. Pp.208-215.
76. Eigenchannel R-matrix study of two-photon processes including above-threshold ionization in Mg / Luc-Koenig E., Lyras A., Lecomte J.M., et al // *J.Phys.B:At. Mol. Opt. Phys.*, 1997. Vol.30. Pp.5213-5232.
77. Wesdorp C., Noordam L.D., Robicheaux F. Dynamics of forced Autoionization // *Phys.Rev.A.*, 1999. Vol.60. Pp.R3377-R3380.
78. Klose J. Z., Fuhr J. R. Critically Evaluated Atomic Transition Probabilities for Ba I and Ba II // *J.Phys. Chem. Ref. Data.*, 2002. Vol.31. Pp.217-230.
79. Bokor J., Freeman R., Cooke W. Autoionization - pumped laser // *Phys. Rev.Lett.*, 1982. Vol.48. Pp.1242-1247.
80. Chernenko A.A., Beterov I.M., Permyakova O.I. Modeling of amplification without inversion near transitions from Autoionization levels of ytterbium atom // *Laser Phys.*, 2000. Vol.10. Pp.133-138.
81. Karaçoban B., Özdem L. Energies, Landé Factors, and Lifetimes for Some Excited Levels of Neutral Ytterbium ( $Z = 70$ ) // *Acta Phys. Polonica. A.*, 2011. Vol.119. Pp.342-353.
82. Jong-hoon Yi., Lee J., Kong H.J. Autoionizing states of the ytterbium atom by three-photon polarization spectroscopy // *Phys. Rev. A.*, 1995. Vol.51. Pp.3053-3057.
83. Jong-hoon Yi., Park H., Lee J.J. Investigation of even parity autoionizing states of ytterbium atom by two-photon ionization spectroscopy // *of Korean Phys.Soc.*, 2001. Vol.39. Pp.916-920.
84. Laser spectroscopy of narrow doubly excited autoionization states of the ytterbium atom / Bekov GI, Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., et al // *JETF.*, 1981. T. 80. №3. Pp.866-878.
85. The nature of narrow and anomalously narrow resonances in rare-earth atoms and their negative ions / Vidolova-Angelova E.P., Ivanov L.N., Ivanova E.P., et al // *Izv. Academy of Sciences of the USSR. Ser. Phys.*, 1981. T.45. № 12. Pp.2300-2304.
86. Relativistic perturbation method for investigating the radiation decay of highly excited many electron atoms: Tm atom / Vidolova-Angelova E., Ivanov

- L.N., Ivanova E.P., et al // J.Phys.B At. Mol. Opt. Phys., 1986. Vol.19. Pp.2053-2069.
87. Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N. Autoionizing Rydberg states of thulium. Re-orientation decay due to monopole interaction // J.Phys.B. At. Mol. Opt.Phys., 1991. Vol.24. Pp.4147-4158.
88. Glushkov A.V., Methods of a chaos theory Odessa: OSENU. , 2012. 320P.
89. Lichtenberg A., Liebermann A. Regular and chaotic dynamics. N.-Y.: Springer, 1992. 690p.
90. Abarbanel H., Analysis of observed chaotic data. N.-Y.: Springer, 1996. 340p.
91. Kennel M.B., Brown R., Abarbanel H. Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction // Phys.Rev.A., 1992. Vol.45. Pp.3403-3411.
92. Resonances in quantum systems in strong external fields: nonlinear effects.Autoionization resonances in Tm / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Borik S.A., et al // Journ. of Techn. Phys., 1997. Vol.38. Pp.211-214.
93. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Lovett L. Spectroscopy of atoms and nuclei in a strong laser field // AC Stark effect and multiphoton resonances. Photoelectronics 23., 2014. Pp. 38-43.
94. Manifestation of the new laser-electron nuclear spectral effects in the thermalized plasma: QED theory of co-operative laser-electron-nuclear processes. / Glushkov A.V., Malinovskaya S., Prepelitsa G., et al // J.Phys: Conf.Ser. 2005., Vol. 11. Pp. 199-206.
95. Glushkov A.V. True effective molecular valency hamiltonian in a logical semiempirical theory. Journal of Structural Chem., 1988. №29(4). Pp. 495-501.
96. Glushkov A.V. Correction for exchange and correlation effects in multielectron system theory. // Journ of Struct Chem., 1990. № 31(4). Pp. 529-532.
97. Glushkov A.V., Multiphoton Spectroscopy of Atoms and Nuclei in a Laser Field: Relativistic Energy Approach and Radiation Atomic Lines Moments Method. Advances in Quantum Chemistry., Elsevier, Amsterdam. Vol. 78. Pp. 249-285.
98. Spectroscopy of multielectronatomic system in a DC electric field. Advances in Quantum Chemistry, / Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., et al. // Amsterdam: Elsevier, 2019. Vol. 78. Pp. 287-306.

99. Flambaum V.V., Gribakina A.A., Gribakin G.F. Narrow chaotic compound autoionizing states in atomic spectra // *Phys.Rev.A.*, 1996. Vol.54. Pp. 2066-2079.
100. Connerade J.P., Quantum chaos and many electron atoms // *J.Phys.B Atom.Mol.Opt .Phys.*, 1997. Vol.30. Pp.L31-38.
101. Calculation of spectroscopic characteristics of alkali-metal dimers on the basis of a model perturbation theory. *Optics and Spectr* / Glushkov A.V., Efimov V.A., Gopchenko E.D.et al ., 1998. Vol. 84(5). Pp. 670-678.
102. Khetselius O.Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. // *J Phys Conf Ser.*, 2012. Vol. 397. Pp. 012012.
103. Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross-sections and strengths: Ne-like ions. *Int J. Quant Chem* / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V. et al., 2005. Vol. 104(4). Pp. 562-569.
104. The Auger (autoionization) decay of excited states in spectra of multicharged ions: Relativistic theory. *AIP Conf Proc* / Svinarenko A.A., Nikola L.V., Prepelitsa G.P., 2010. vol. 1290. Pp. 94-98.
105. Glushkov A.V., Svinarenko A.F., Ignatenko A.V. Spectroscopy of autoionization resonances in spectra of the lanthanides atoms. // *Photoelectronics*, 2011. Vol. 20. Pp. 90-94.
106. Khetselius O.Yu. Optimized relativistic many-body perturbation theory calculation of wavelengths and oscillator strengths for Li-like multicharged ions. // *Advances in Quantum Chemistry*, Amsterdam: Elsevier, 2019. Vol. 78. Pp.223-247.
107. Kohn W., Sham S. Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas // *Phys. Rev.A.*,1965. Vol.137. Pp.1697-1710.
108. 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*; edited by: Wilson, S., 2004. Vol.14. Pp.1-244.
109. Zangwill A.,Soven P. Density-functional approach to local field effects in finite systems.Photoabsorption in rare gases // *Phys.Rev.A.*, 1980. Vol.21. Pp.1561-1572.
110. Lagowski J.B., Vosko S.H., Analysis of local and gradient- correction correlation energy functionals using electron removal energies // *J.Phys.B At. Mol. Opt. Phys.*, 1988. Vol.21, №1. Pp.203-208.

111. Kobayashi K., Kurita N., Kumahora H., Kuzatami T. Bond-energy calculations of Cu, Ag, CuAg with generalized gradient approximation // *Phys. Rev. A.*, 1991. Vol.43. Pp.5810-5813.
112. Vosko S.H., Lagowski J., Mayer I.L. Prediction of stable Sr, Ba, Ra from density-functional theory // *Phys. Rev.A.*, 1989. Vol.39. Pp.446-449.
113. Guo Y., Whitehead M. Effect of correlation correction on ionization potential and electron affinity in atoms // *Phys.Rev.A.*, 1989. Vol.39. № 1. Pp.28-34.
114. Глушков А.В. Универсальный квазичастичный энергетический функции-онал в теории функционала плотности для релятивистского атома // *Опт. спектр.*, 1989. Т.66. С.31-38.
115. Глушков А.В., Приближенный квазичастичный функционал в теории функционала плотности // *УФЖ.*, 1989. Т34. С.1422-1425.
116. Глушков А.В. Эффективный учет энергетических эффектов обмена и корреляции в теории многоэлектронных систем // *Журн. Структ.Химии.*, 1990. Т.31. №4. С.3-7.
117. Kunisz M.D., Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths. // *Acta Phys.Polon.*, 1982. Vol.62. Pp.285-296.
118. Kotochigova S.A., Identification of VUV absorption spectra of EuI 1. Calculation of states 4f75d (9D) np // *Opt.Spectr.*, 1983. Vol.55 Pp.422-428.
119. Anderson E.K., Anderson E.M. Calculation of the parameters of some E1, E2, E3, M1, M2 transitions in the isoelectronic sequence Zn // *Opt. Spectrum*, 1983. Vol.54. Pp.955-960.
120. Florko T.A., Theoretical determination of oscillator strengths of some transitions in the rare-earth atom of Eu // *Photoelectronics*, 2007. №16. Pp.98-101.
121. Indelicato P., Desclaux J.P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method // *Phys.Scripta.*, 1993. Vol.46. Pp.110-115.
122. Band I.M., Listengarten A., Trzhaskovskaya M.V., Calculation of hyperfine structure constants for heavy ion spectra based on the Hartree-Fock-Dirac method *Izv. // of the Acad.of Sci.Ser. Phys.*, 1986. Vol.50. Pp.2240-2244.
123. Ullrich C., Erhard S. *Superintense Laser Atoms Physics* // Gross E.K.U. N.-Y: Acad. Press., 2007. 580p.
124. Akhiezer A.I., Berestetsky V.B. *Quantum electrodynamics*. N-Y.:AIP, 1988. 452p.

125. Vadla C., Horvatic V. Oscillator strength of the strongly forbidden Pb  $6p^2$   $^3P_0$ - $6p^2$   $^3P_1$  transition at 1278.9 nm // Eur. Phys.J. D.,2001. Vol.14. Pp.23-25.
126. Ostrovsky V.N. Sheinerman SA Radiation transitions in the outer shells of the Hg + ion. Opt. Spectrum, 1989. Vol.67. Pp.16-22
127. Khetselius O.Yu., On sensing nuclei of the  $^{207}\text{Bi}$  and  $^{207}\text{Pb}$  isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine // Sensor Electr. and Microsyst. Techn., 2009. № 2. Pp.26-29.
128. 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., et al // Physica Scripta (IOP, London, UK), 2013. Vol.T1.53. Pp.014037 (5p.).
129. Safronova M.S., Johnson W.R., Safronova U.I. Excitation energies, hyperfine constants, E1,E2,M1 transition rates and lifetimes of  $6s^2nl$  states in TlII and PbII // Phys.Rev.A., 2005. Vol.71. Pp.502-506.
130. Martensson A.M., Gouch D.S., Hanaford P. Relativistic coupled-cluster approach to hyperfine structure of Tl atom // Phys. Rev.A.,1993. Vol.49. Pp.3351-3360.
131. Martensson A.M., Magnetic moment distributions in Tl nuclei // Phys.Rev. Lett.,1995. Vol.74. Pp.2184-2188.
132. Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G. Relativistic effects in atoms and molecules. Vancouver: Elseiver,1981. 545p.
133. Relativistic many-body theory calculation of the Stark-induced amplitude of the  $6p$ - $7p$  transition in thalium / Safronova M.S., Johnson W.R., Safronova U.I., et al // Phys.Rev.A.,2006. Vol.74. Pp.022504.
134. Yu. Dmitriev, G.L. Klimchitskaya, L.N. Labzovsky. Relativistic effects in the spectra of atomic systems // Energoatomizdat, 1984. Pp. 230.
135. Sobelman I. Introduction to the theory of atomic spectra Moscow: Nauka, 1977. Pp.334.
136. Кондратенко П.О. Фотохімічна дія світла (Навчальний посібник) Київ: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2005. С. 401
137. Dzuba V., Flambaum V., Safronova M. Breit interaction and parity-nonconservation in many-electron atoms // Phys.Rev.A., 2006. Vol.73. Pp.022112.
138. Khetselius O.Yu. Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems. Astroprint: Odessa., 2011

139. Dzuba V.A., Flambaum V.V. Off-diagonal hyperfine interaction and parity nonconservation in cesium // *Phys.Rev.A.*,2000. Vol.62. Pp.052101.
140. Kuchiev M., Flambaum V.J. Radiative corrections to parity nonconservation in atoms and test of Standard model // *Phys.B.*,2003. Vol.36. Pp. 191-222.
141. Dzuba V., Flambaum V. Relativistic corrections to transition frequencies of Ag I, Dy I, Ho I, YbII, Yb III, AuI and HgII and search for variation of the fine structure constant // arXiv:0712.3621v1 [physics.atom-ph], 21 Dec 2007.
142. Bieron J., Pyykkö P., Jonsson P. Nuclear quadrupole moment of  $^{201}\text{Hg}$  // *Phys. Rev. A.*, 2005. Vol.71. Pp.012502.
143. Grim G. Broadening of spectral lines in plasma. N-Y.: Wiley, 1978. Pp.480.
144. Alexandrov E.B., Popov V.I. The optical pumping of the thallium atoms on the line of 21GHz // *Opt. Spectr.*,1979. Vol.46. Pp.404-408.
145. Migdalek J. Theoretical oscillator strengths: Transitions in principal, diffuse spectral series in Zn,Hg spectra. *Can. J. Phys.*, 1976. Vol.54. Pp.130-136
146. Sensing of nuclei available in little quantities by means of laser spectroscopy of hyperfine structure for isotopes: new theoretical scheme (U, Hg) / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P. et al // *Sensor Electronics and Microsyst. Techn.* , 2007. №3. Pp.8-12.
147. Collisional Shift of the Tl Hyperfine Lines in Atmosphere of Inert Gases / Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., et al // *Spectral Line Shapes (AIP).*, 2008. Vol. 15. Pp.231-233.
148. Svinarenko A., Glushkov A., Mischenko E. Relativistic theory of shift and broadening spectral lines of the hyperfine transitions for heavy atoms in atmosphere of buffer inert gases Odessa: OSENU., 2008. P.120
149. Khetselius O.Yu., Relativistic calculating the hyperfine structure parameters for heavy-elements and laser detecting the isotopes and nuclear reaction products // *Physica Scripta.*,2009. Vol. T.135. Pp. 014023.
150. Vadla C., Horvatic V. Oscillator strength of the strongly forbidden Pb  $6p^2\ ^3P_0-6p^2\ ^3P_1$  tran-sition at 1278.9 nm // *Eur. Phys. J. D.*,2001. Vol.14. Pp. 23-25.
151. A broadening and shift of the strongly “forbidden” lead line at 1278.9 nm / Horvatic V., Veza D., Movre M., et al // *Spectrochimica Acta.Part B.*,2008. Vol.63. Pp.652-656.
152. Franzke J., Impact broadening and shift rates for the  $6p^2\ ^3P_J \rightarrow 7s\ ^3P_J^o$  transitions of lead induced by collisions with argon and helium // *Eur. Phys. J. D.*, 2000. Vol. 8, Pp.23-28 . <https://doi.org/10.1007/s100530050005>



153. Kötteritzsch M., Gries W., Hese A. Foreign gas broadening and shift in the lead resonance line at  $\lambda = 283.3$  nm // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 1992. Vol.25. Pp.913-918.
154. Ehlacher E., Huennekens J. Noble-gas broadening rates for barium transitions involving the metastable  $6s5d \ ^3D_j$  levels // *Phys.Rev.A.*, 1992. Vol.46. Pp.2642-2648.
155. Calculation of diatomic van der Waals systems: inert gas–halogen type inert gas ion in the ground state / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Efimov V.A. et al // *Foundations of Physics Letters: Springer*, 2002. Vol.15. №1. Pp.480-484.
156. *Photonic, Electronic, Atomic Collisions.*; edited by: Aumar F. and Winter H. Singapore: World Sci., 1997. P. 630.
157. *Molecular Photoelectron Spectroscopy* / Turner D., Baker C., Baker A., et al. New York: Wiley., 1997.Pp.540.
158. Chi X., Dalgarno A., Groenenborn G.C., Dynamic polarizabilities of rare-earth-metal atoms and dispersion coefficients for their interaction with helium atoms // *Phys.Rev.A.*, 2007. Vol.75. Pp.032723.
159. Bodo E., Zhang P., Dalgarno A. Ultra-cold ion–atom collisions: near resonant charge exchange // *New Journal of Physics.*, 2008. Vol. 10. Pp.033024.
160. A study of exchange interactions in alkali molecular ion dimers with application to charge transfer in cold Cs / Jamieson M.J., Dalgarno A., Aymar M., et al // *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, 2009. Vol.42. Pp.095203.
161. Jamieson M.J., Drake G.W.F., Dalgarno A. Variational calculation of the dynamic polarizabilities of rare-earth metal atoms // *Phys.Rev. A.*, 1995. Vol.51. Pp.3358-3370.
162. New spectroscopic data on high-lying excited levels of atomic uranium. / Coste, A., Avril, R., Blancard, P., et al, // *J. Opt. Soc. Am.*, 1982. Vol. 72(1). Pp.103-109.
163. Detection of Rydberg states in atomic uranium using time-resolved stepwise laser photoionization *Phys. Rev. A* / Solarz, R., May, C., Carlson, L., et al, 1976. Vol. 14(3). Pp. 1129-1136.
164. 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., et al // *Physica Scripta (IOP, London, UK)*, 2013. Vol. T153. Pp.01437 (5p.).
165. Расчет двухатомных ван-дер-ваальсовых молекул и ионов: атом инертного газа-ион инертного газа типа галогена / Глушков А.В.,

Амбросов С.В., Гопченко Е.Д., и др. // Журн. структ. химии., 1998. Т.39. С.589-594.

166. Spectral broadening of excitation induced by ultralong-range interactions in a cold gas of Rydberg atoms / Singer K., Reetz-Lamour M., Amthor T., et al // Phys. Rev. Lett., 2004. Vol.93. Pp.163001.

167. Fine structure of negative ions of alkaline-earth metal atoms / Dzuba V.A., Flambaum V. V., Gribakin G., et al // Phys.Rev.A, 1991. Vol.44. Pp.2823-2827.

168. Many-body perturbation theory calculations in atoms with open shells / Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., et al // Phys.Rev.A., 1991. Vol.44. Pp.2828-2831.

169. Seely J.F., Ekberg J.O. Brown C.M., Laser-Produced Spectra and QED Effects for Fe-,Cu-like ions of Pb,Bi,Th,U // Phys.Rev.Lett., 1996. Vol.57 Pp.2924-26.

170. Yunfeng Shen, Cheng Gao, Jiaolong Zeng Electron impact collision strengths and transition rates for extreme ultraviolet emission from  $\text{Xe}^{10+}$  // Atom.Data.Nucl.Data.Tabl., 2009. Vol.95.Pp.1–53.

171. DWBA-G calculations of electron impact ionization of noble gas atoms / Kheifets A.S., Naja A., Staicu-Casagrande E.M., et al // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2008. Vol.41. Pp.145-201.

172. Khakoo M.A., Zatsarinny O. and Bartschat K. Near-threshold electron impact excitation of the argon  $3p54s$  configuration - new and revised normalized differential cross sections using recent time-of-flight measurements for normalization // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2011. Vol.44. Pp.015201

173. Aguilar J., Nakamura H. Variable screening model for diatomic molecules // Chem. Phys., 1976. Vol.32. №1. Pp.115-122.

174. Masnou F., Philips N., Valiron P. Model potential calculations of the molecular system Na-Ne // Phys.Chem.Lett., 1978. Vol.41. №3. Pp.395-398.

175. Frauss M., Stevens W. Effective core potentials and accurate energy curves for  $\text{Cs}_2$  and other alkali diatomics // J.Chem.Phys., 1990. Vol.93. Pp.4236-4242.

176. Masnow-Seeuws F., Henriët A. Two-electron calculations for intermediate Rydberg states  $\text{Na}_2$ : quantum defects // J.Phys.B. At.Mol.Phys., 1988. Vol.21. Pp.338-346.

177. Luh W.-T., Bahns J.T. Direct excitation studies of the diffuse bands of alkali metal dimmers // Chem.Phys., 1988. Vol.88. №4. Pp.2235-2244.

178. П.Ф. Груздев, С.Г. Соловьева, А.И. Шерстюк Расчет параметров взаимодействия многоэлектронных атомов с внешними полями с

- использованием разложений по дискретному базису ХФ виртуальных орбиталей штурмовского типа // Изв. вузов. Сер.Физ.,1988. №8. С.73-85.
179. Moore C., NBS Spectra Database // NBS. Washington.,1987.
180. Okutsu H., Sako I., Yamanouchi K. Electronic structure of atoms in laser plasmas: a Debae shielding approach // J.Phys.B.,2005. Vol.38. Pp.917-927.
181. Relativistic effects on resonant interactions between electrons and highly charged ions / Nakamura N., Kavanagh A.P., Watanabe H., et al // of Phys.: C Ser. (IOP),2007. Vol.88. Pp.012066 (6p).
182. Trzhaskovskaya M.B., Nikulin V. K., Clark R. An impact of multipole and relativistic effects on photoionization and radiative recombination cross sections in hot plasmas // Preprint of Petersburg Nuclear Physics Institute (Gatchina ),2007. №13.P.18.
183. Atomic collisions with screened Coulomb interactions: excitation and electron capture in  $H^+ + H$  collisions / Zeng S.L., Liu L., Wang J.G., et al // J.Phys. B. At. Mol. Opt. Phys., 2008. Vol.41. Pp.135202.
184. Influence of hot and dense plasmas on energy levels and oscillator strengths of ions: Be-like ions for  $Z = 26-36$  / Yongqiang Li, Jianhua Wu, Yong Hou, et al // J.Phys.B. At. Mol. Opt. Phys.,2008. Vol.41. Pp.145002.
185. Differential cross-sections and cross-sections ratios for the electron-impact excitation of the neon  $2p^5 3s$  configuration / Khakoo M.A., Wrkich J., Larsen M., et al // Phys.Rev.A.,2002. Vol.65. Pp.062711;
186. Electron-impact excitation of the argon  $3p^5 4s$  configuration: Differential cross-sections and cross-sections ratios / Khakoo M.A., Vandeventer P., Childers J.G., et al // J.Phys.B. At. Mol. Opt. Phys.,2004. Vol.37. Pp.247-281.
187. Guo-Xin Chen, Ong P.P. Electron impact excitation cross sections in F-like selenium // A.Data and Nucl. Data Tabl.,1998. Vol.70. Pp. 93-117.
188. Köppel H., Domcke W., Cederbaum L.S. Green's function method in quantum chemistry // Adv. Chem. Phys., 1984. Vol.57. Pp.59-132.
189. Cederbaum L.S., Domcke W.J. On vibrational structure of photoelectron spectra by the Green's functions method // Chem. Phys., 1984. Vol.60. Pp.2878-2896.
190. Bartlett R.J., Musiał M.N. Coupled-cluster theory in quantum chemistry // Rev. Mod. Phys.,2007. Vol.79. Pp.291-328.
191. Klapish M.A. Program for atomic wavefunction computation by parametric potential method // Comput .Phys.Commun.,1971. Vol.2. Pp.239-260.

192. Nayak M., Chaudhuri R., Das.B. Ab initio calculation of electron-nucleus scalar-pseudo-scalar interaction constant  $W_s$  in heavy polar molecules // *Phys.Rev.A*,2007. Vol.75. Pp.022470.
193. Laughlin C., Victor G.A. Model potential method // *Adv. Atom. Mol. Phys.*,1988. Vol.25. Pp.163-194.
194. Clementi E. and Roetti C. Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions. Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms,  $Z < 54$  // *Atom. Data Nucl. Data Tabl.*,1974. Vol.14. Pp.177-478.
195. Cade D.E., Wahl A.L. Hartree-Fock-Roothaan wave functions for diatomic molecules // *Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.*,1974. Vol.13. Pp.2339-2389.
196. / Durand P., Malrieu J. Ab initio quantum chemistry methods. N-Y.: Wiley, 1987.
197. Wilson W. Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry // Chichester: Wiley, 2003. Pp.680.
198. Li S-M., Berakdar J., Chen J. Laser-assisted (e,2e) reaction in one-electron atoms and ions // *J.Phys.B. At. Mol.Opt.Phys.*,2005. Vol.38. Pp.1291-1303.
199. Joachain C.J., Laser-assisted electron-ion collisions // *Laser Chem.*,1991. Vol.11.Pp.273-277.
200. Fischer C.F., Calculation of negative ions in multiconfiguration Hartree-Fock approximation: Ca, Sr // *Phys.Rev.A*,1989. Vol.39, №3. Pp.963-970.
201. Jupen W.C., Denne B.D., Martinson I.K. Transitions in the Al-like, Mg-like, Na-like Kr, Mo, observed in JET Tokamak // *Phys.Scripta.*,1990. Vol.41.Pp.669-674.
202. Courade E., Anderlini M., Ciampini D. Two-photon ionization of cold rubidium atoms with near resonant intermediate state // *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*,2004. Vol.37. Pp.967-979.
203. Mikhailenko V.I., Kuznetsova A.A. Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external electric field // *Sensor Electronics and Microsyst.Techn.*,2009. №4. Pp.17-22.
204. Плазменные сателлиты рентгеновских спектральных линий ионов в плазме твердотельных мишеней, нагреваемых пк-секундным лазерным импульсом / Беляев В., Виноградов В., Курилов А. и др. // *Письма в ЖЭТФ*,2003. Т.78. С.1216-1220;
205. Safronova U.I., Johnson W., Derevianko A. Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix

- elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms // *Phys.Rev.A.*, 1999. Vol.60. Pp. 476-486.
206. Marinescu M., Vrinceanu D., Sadeghpour H.P. Radiative transitions and van der Waals coefficients for francium // *Phys. Rev. A.*, 1998. Vol.58. Pp.259-262.
207. Safronova M.S., Safronova U.I. Critically evaluated theoretical energies, lifetimes, hyperfine constants, and multipole polarizabilities in  $^{87}\text{Rb}$  // *Phys.Rev.A.*, 2011. Vol.83. Pp.502-508.
208. Low-lying resonances in electron-neon scattering: Measurement at 4-meV resolution and comparison with theory / Bommels J., Franz K., Hoffmann T.H., et al // *Phys.Rev.A.*, 2005. Vol.71. Pp.012074.
209. Absolute cross sections for near-threshold electron-impact excitation of Be-like  $\text{C}^{2+}$ ,  $\text{N}^{3+}$ , and  $\text{O}^{4+}$  ions / Bannister M. E., Djurić N., Voitke O., et al // *Internat. Journ. of Mass Spectrometry.*, 1999. Vol.192. Pp.39-48.
210. Talukder, M. R., Electron impact total ionization cross sections of beryllium and boron isoelectronic ions // *Applied Phys. Lasers and Opt.*, 2008. Vol.93. Pp.576-574.
211. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei during  $\mu^-$  capture / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S., et al // *Recent Advances in Theoretical Physics and Chemistry. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry*; edited by: J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio. Berlin: Springer, 2006. Vol.15. Pp.301-324.
212. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions // *Low Energy Antiproton Phys.*, AIP Serie., 2005. Vol.796. Pp.206-210.
213. Semenov R., Kapel'kina E., Tsygankova G. Semiempirical calculation of atomic Characteristics of the  $2p53d,4d$ ,  $2p5ns$  ( $n=3-10$ ) Configurations of Ne // *Optics and Spectroscopy.*, 2005. Vol.99. №4. Pp.536-539.
214. Korenman G., Yudin S.J. Collisions of cold antiprotonic helium atoms and ions with ordinary He atoms // *of Phys.: C Ser. (IOP).*, 2007. Vol.88. Pp.012060.
215. Experimental study of optical properties of strongly coupled plasmas. *Strongly Coupled Plasma Physics* / Fortov V.E., Bepobov V.E., Kulish M.I., et al // N-Y.: Elsevier Sci.Publ., 1990. P.571

216. Quiney H., *Relativistic Quantum Mechanics of Atoms and Molecules // New Trends in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. Berlin: Springer.,2002. Vol.6. Pp.135-173.
217. 2DRMP: A suite of two-dimensional R-matrix propagation codes / Scott N.S., Scottb M.P., Burkeb P.G., et al // *Computer Phys. Commun.*,2009. Vol.180. Pp.2424-2449.
218. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P. PC atomic complex “Superatom-ISAN”: main possibilities and programs // e-Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences, ASN1.,1991. Pp.96.
219. Cowan D., *Methods of atomic structure calculations // N.-Y.:Acad.*, 1974. Pp280.
220. / Reiher M., Heß B. *New Algorithms of Quantum Chemistry // Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry*, ed. by J. Grotendorst, John von Neumann Inst. for Computing, Julich, NIC Ser.,2000. Vol. 3. Pp.479-505.
221. Parpia F.A., Froese-Fischer, Grant I. Generalized relativistic atomic structure package: GRASP // *Comp.Phys.Commun.*, 1996. Vol.94. №2. Pp.249-270.
222. Jensen H., Saue T., Visscher L. DIRAC Code, a relativistic ab initio electronic structure program.; edited by: Bakken V., Eliav E., Enevoldsen T., Fleig T., Fossgaard O., Helgaker T., Laerdahl J., Larsen C., Norman P., Olsen J., Pernpointner M., Pedersen J., Ruud K., Salek P., van Stralen J., Thyssen J., Visser O., Winther T. // Release PC Program Code DIRAC 04.0.,2004; DIRAC. (<http://dirac.chem.sdu.dk>)
223. BERTHA: 4-Component Relativistic Molecular Quantum Mechanics / Bell K.L., Berrington K., Crothers D., et al // *Supercomputing, Collision Processes, and Application, Series: Physics of Atoms and Molecules*. Berlin: Springer, 2002. Pp.213-224.
224. Grance M. Revised energy levels for neutral atoms and ions // *Atomic Data.*, 1973. Vol.5. Pp.185-220.
225. Martin W., NIST Spectra Database, version 2.0 // NIST.-Washington., 2004. (<http://physics.nist.gov/asd>)
226. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanides atoms // *Physica Scripta (IOP, London, UK)*.,2013. Vol.T153. Pp.01429 (6p.).

227. Svinarenko A.A., Spectroscopy of autoionization states in spectra of helium, barium and lead atoms: New spectral data and chaos effect // Photoelectronics., 2013. Vol.22.
228. Lopatkin Yu.M., Mikhailenko V.I., Svinarenko A.A. Spectroscopy of the spectral lines broadening and shift for heavy elements in the buffer gas // Photoelectronics.,2013. Vol.22.
229. Svinarenko A.A., Spectroscopy of autoionization resonances for the lanthanides atoms: Thullium spectrum, new data and effects // Photoelectronics Ukraine. ,2012. №21. Pp.39-41.
230. Glushkov A. V., Khetselius O., Svinarenko A. Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanide atoms. Phys Scr, 2013. T153 Pp.014029.
231. Svinarenko A.A. Study of spectra for lanthanides atoms with relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances. // J Phys:Conf Ser, 2014. Vol. 548. Pp.012039.
232. Calculation and extrapolation of oscillator strengths in Rb-like, multiply charged ions. / Glushkov A.V., Butenko Yu.V., Serbov N.G.et al, // Russian Phys Journ, 1996. Vol. 39(1). Pp. 81-83.
233. Glushkov A.V. Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions. Journal of Appl Spectroscopy, 1992. Vol. 56(1). Pp. 5-9.
234. Collisional shift of hyperfine line for rubidium in an atmosphere of the buffer inert gas. J of Phys / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lopatkin Y.M.et al, // Conf Ser, 2014. Vol. 548. Pp.012026.
235. Cooperative Laser-Electron-Nuclear Processes: QED Calculation of Electron Satellites Spectra for Multi-Charged Ion in Laser Field / Glushkov A. V., Malinovskaya S., Chernyakova Yu. et al. // Int Journ Quant Chem, 2004. Vol. 99(5). Pp.889-893.
236. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Filatov V.V. S-Matrix formalism calculation of atomic transition probabilities with inclusion of polarization effects. // Sov Phys Journal, 1989. Vol. 32(12). Pp.1010-1014
237. Glushkov A.V. Relativistic polarization potential of a many-electron atom. // Sov Phys Journal, 1990. Vol. 33(1). Pp. 1-4.
238. Khetselius O.Yu. Optimized Perturbation Theory for Calculating the Hyperfine Line Shift and Broadening of Heavy Atoms in a Buffer Gas.; edited by: Nascimento M, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G // Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. Series:

Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Springer, Cham, 2015. Vol. 29. Pp. 55-76.

239. Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas / Malinovskaya S.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu. et al // Int Journ Quant Chem. 2009. Vol. 109. Pp.3325-3329.

240. QED approach to modeling spectra of the multicharged ions in a plasma: Oscillator and electron-ion collision strengths. / Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Loboda A.V. et al // AIP Conf Proc, 2008. Vol. 1058 Pp.175-177.

241. Malinovskaya S.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu. New laser-electron nuclear effects in the nuclear  $\gamma$  transition spectra in atomic and molecular systems.; edited by: Wilson S, Grout PJ, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P // Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics. Springer, Dordrecht, 2008. Vol. 18. Pp. 525-541.

242. Glushkov A.V. Auger Spectroscopy of Multielectron Atoms: Generalized Energy Formalism; edited by: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. // Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer., 2021. Vol.33. Pp.3-26.

243. Advanced computing topological and dynamical invariants of relativistic backward-wave tube time series in chaotic and hyperchaotic regimes. / Ternovsky V.B., Tsudik A.V., Glushkov A.V., et al, // Photoelectronics. 2020. Vol.29. Pp.110-117.

244. Spectroscopy of Rydberg Atomic Systems in a Black-Body Radiation Field. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., et al, // Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics; edited by: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Cham: Springer., 2020. Vol.32. Pp.51-64.

245. Analysis of the beryllium-7 activity concentration dynamics in the atmospheric environment time series after the Fukushima Daiichi nuclear power plants emergency. / Bunyakova Yu.Ya., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., et al // , Sensor Electronics and Microsystems Technologies., 2017. Vol.14. № 4. Pp.73-82

246. A chaos-dynamical approach to analysis, processing and forecasting measurements data of the chaotic quantum and laser systems and sensors. /



Glushkov A.V., Buyadzi V.V., Ternovsky V.B., et al // , Sensor Electronics and Microsystem Technologies., 2018. Vol.15. №4. Pp.41-49.

247. Spectroscopy of Multielectron Atomic Systems in a DC Electric Field / Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Ignatenko A.V., et al, // Advances in Quantum Chemistry (Elsevier), 2019. Vol.78. Ch.12. Pp.287-306.

248. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of atomic systems and Many-Body perturbation theory approach to computing  $\beta$ -Decay Parameters / Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Y.V. et al // Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer. , 2021. Vol.33. Pp. 59-89.

249. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Dubrovskaya Yu.V., Theoretical studying excited states spectrum of the ytterbium within the optimized relativistic many-body perturbation theory. // Photoelectronics., 2020. Vol.29. Pp.118-125.

250. Advanced Laser-Photoionization Scheme of Separation of Heavy Isotopes in the Gases Separator Devices. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuznetsova A.A., et al // , Physics of Aerodispersed Systems., 2021. Vol.59. Pp. 173-183.

251. Relativistic Quantum chemistry and Spectroscopy of some kaonic atoms: Hyperfine and Strong interaction effects. / Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Serga I.N. et al // Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theor. Chemistry and Physics; edited by: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer., 2021. Vol.33. Pp. 91-110.

252. Relativistic Quantum Chemistry and Spectroscopy of Kaonic Atomic Systems with Accounting for Radiative and Strong Interaction Effects. / Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., et al, // Relativistic Quantum Chemistry and Spectroscopy of Kaonic Atomic Systems with Accounting for Radiative and Strong Interaction Effects. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Progress in Theoretical Chemistry and Physics; edited by: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. Cham: Springer., 2020. Vol.32. Pp.33-50.

253. Theoretical studying spectral characteristics of Zn-like ions on the basis of relativistic perturbation theory Photoelectronics. / Cherkasova I.S., Ternovsky V.B., Nesterenko A.A. et al, . 2020. Vol.29. Pp.156-160.
254. Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems With Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects. / Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., et al, // Advances in Quantum Chemistry (Elsevier), 2019. Vol.78. Ch.9.Pp.193-222.
255. Ternovsky V.B., Theoretical studying Rydberg states spectrum of the uranium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory. // Photoelectronics., 2019. Vol.28. Pp.39-45.
256. Spectroscopy of Rydberg Atoms in a Black-body Radiation field: Ionisation Rates and Effective Lifetimes. / Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., et al, // Journal of Physics: C. Series (IOP, London), 2019. Vol.1289. Pp. 012024.
257. Theoretical studying spectral characteristics of Ne-like ions on the basis of optimized relativistic many-body perturbation theory. / Glushkov A.V., Cherkasova I.S., Ternovsky V.B., et al, // Photoelectronics., 2019. Vol.28. Pp.75-82.
258. Parity non-conservation effect in heavy atomic systems within relativistic many-body perturbation theory / Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., et al, // Advanced data. Journal of Physics: C. Series (IOP, London). ,2019. Vol.1289. Pp. 012025.
259. Relativistic approach to calculation of ionization characteristics for rydberg alkali atom in a black-body radiation field. / Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., et al, // Sensor Electronics and Microsystem Technologies., 2019. Vol.16. №3. Pp.69-77.
260. Relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field / Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., et al // ,. Photoelectronics., 2018. Vol. 27. Pp.121-130.
261. Non-Linear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field and Laser Systems / Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Kvasikova A.S., et al, // Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Advances in Concepts and Applications, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics; edited by: A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio:Springer., 2017. Vol.30. Pp.169-180.

262. Optimized relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field: Sensing spectral parameters. / Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., et al // Sensor Electronics and Microsystem Technologies., 2018. Vol.15. №4. Pp.50-57.
263. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Spectroscopy of Rydberg atoms and relativistic quantum chaos. Odessa: TES, 2018. Pp.152.
264. Advanced computational approach to studying Rydberg and autoionization resonances in spectra of lanthanides / Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Ternovsky E.V., et al // Ytterbium. Journal of Physics: C. Series (IOP, London)., 2018. Vol.1136. Pp. 012010.
265. Theoretical studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory: doubly excited valence states / Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Cherkasova I.S., et al., // Photoelectronics., 2018. Vol. 27. Pp.113-120.
266. Spectroscopy of radiative decay processes in heavy rydberg alkali atomic systems. Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics / Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., // Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics; edited by: Yan A. Wang, Mark Thachuk, Roman Krems, Jean Maruani:Springer, 2018. Vol.31. Pp.229-241.
267. An advanced laser photoionization separation scheme for radioactive isotopes and products of atomic energetics: Uranium and the transuranium elements. / Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Smirnov A.V., et al // Sensor Electronics and Microsystem Technologies., 2017. Vol.14. № 4. Pp.83-93.
268. Computing of radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach. / Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., et al // Advanced Code. Journal of Physics: C. Series., 2017. Vol.905. Pp. 012003.
269. Gauge-invariant relativistic perturbation theory approach to determination of energy and spectral characteristics for heavy and superheavy atoms and ions: / Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., et al // Review. Photoelectronics., 2017. Vol.26. Pp.11-28.
270. Nonlinear dynamics of laser systems with elements of a chaos: Advanced computational code. / Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., // Journal of Physics: C. Series (IOP, London)., 2017. Vol.905. Pp. 012007.

271. Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field. / Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Gurskaya M.Y. et al, // Journal of Physics: C. Series (IOP, London). 2017., Vol.810. Pp. 012047.
272. Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Hyperfine Structure and Oscillator Strength Parameters for Some Heavy Element Atoms and Ions. Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. / Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Smirnov A.V., et al // Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Tadjer A, Pavlov R, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G. Springer, Cham, 2013. Vol 30. Pp 271-281.
273. Theoretical studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances. / Ternovsky V.B., Gurskaya M.Yu., Svinarenko A.A., et al, // Photoelectronics., 2017. Vol.26. Pp.103-113.
274. Non-linear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime with accounting the waves reflection, space charge field and dissipation effects / Brusentseva S.V., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., et al // Photoelectronics., 2016. Vol.25. Pp.102-108.
275. Relativistic perturbation theory formalism to computing spectra and radiation characteristics: Application to heavy elements. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., et al // Recent Studies in Perturbation Theory, Ed. D. Uzunov: InTech, EU., 2017. Pp.131-150.
276. Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonances . / Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., in at // Rare-Earth Element, Ed. Jose Edgar Alfonso Orjuela : Intech, EU., 2017. Pp.83-104.
277. Advanced laser photoionization separation scheme and technology for heavy radioactive isotopes and nuclear isomers. / Florko T.A., Glushkov A.V., Ignatenko A.V., et al // Photoelectronics., 2016. Vol.25. Pp.119-125.
278. Nonlinear chaos-dynamical approach to analysis of atmospheric radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration time series. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., et al // Journal Indian Academy of Sciences Conference Series. 2017., Vol.1. №1. Pp.61-66.
279. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Prepelitsa G.P. Geometry of a Relativistic Quantum Chaos: New approach to dynamics of quantum systems in

- electromagnetic field and some applications. International Scientific Journal “Proceedings of International Geometry Center”. ,2015. Vol.8. № 3-4. Pp.79-85.
280. Non-linear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime. / Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., et al, // Photoelectronics, 2015. Vol.24. Pp.77-87.
281. Numerical Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., et al, Odessa: TES. ,2015 P.2.
282. Ternovsky V., Relativistic Quantum Chemistry of Heavy Elements and Hadronic Atoms. Abs. of the 24th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine)., 2019. Pp.73.
283. Dynamics of non-linear processes in a backward-wave tubes chain / Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., // Chaos and strange attractors. Abs. of the 15th International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications” (Lodz, Poland), 2019. P. 275.
284. Electroweak interaction and parity nonconservation in heavy finite Fermi-systems: spin-dependent effects and weak interaction enhancement. Abs. of the 31st Int. / Khetselius O., Ternovsky V., Mykhailov O.,et al // Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France)., 2019. Pp.298 (TH-056).
285. Khetselius O., Ternovsky V., NEET and “Shake up” effects in laser electron-gamma-nuclear spectroscopy of multicharged ions. Abs. of the 31st Int. Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France)., 2019. Pp.481 (FR-060).
286. Spectrum of the rydberg states for uranium atom within relativistic many-body perturbation theory. 3th International Conference “Quantum Systems in Physics and Mathenatics” / Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., // (Odessa, Ukraine, December 1-7, 2019). OSENU., 2019.
287. Ternovsky V.B., Theoretical Studying Spectra of Lanthanides and Actinides Atoms within Relativistic Many-Body Perturbation Theory: Rydberg and Autoionization Resonances. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIII; Kruger Park, South Africa)., 2018. Pp.64.
288. Spectral Parameters for Hyperfine and Electroweak Interaction and Parity Non-conservation Effect in Heavy Atoms and Nuclei. / Ternovsky V.B., Khetselius O.Y., Dubrovskaya Y.V., et al // , Abs. of the International Con-

ference on Spectral Line Shapes (ICSLS; Dublin, Ireland), 2018. Pp.104 (Tu.P.26).

289. Radiation Transition Probabilities for Heavy Rydberg Atoms within Advanced Relativistic Energy Approach. / Ternovsky V.B., Mironenko D.A., Glushkov A.V., et al // , Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS; Dublin, Ireland), 2018. P.129 (We.P.24).

290. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O., Advanced relativistic energy approach to computing the radiation transition probabilities and hyperfine structure constants for heavy Rydberg atoms. Abs. of the 26th International Conference on Atomic Physics. ICAP 2018 Barcelona. Spain., 2018. Pp.719.

291. Ternovsky V., Advanced computational approach to studying rydberg and autoionization spectra of heavy atoms. Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2018; University of California, Davis, USA), 2018. Pp4.

292. New computational approach to hadronic atomic systems: radiative and strong interaction corrections / Dubrovskaya Yu., Vitavetskaya L., Khetselius O., et al // , Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2018; University of California, Davis, USA), 2018. Pp.14.

293. Studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series / Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Cherkasova I.S., et al // Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, ; edited by: A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzi // Proceedings of the International Conference “Quantum systems in chemistry, physics and mathematics II” (QSCPM-2018). Odessa: OSENU., 2018. Pp.44-51.

294. Ternovsky V.B., Theoretical Studying Spectra of Lanthanides Atoms Within Relativistic Many-Body Perturbation Theory: Rydberg and Autoionization Resonances. Abs. of the 22rd International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXII; Hunan Province, P.R. China), 2017.

295. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Smirnov A.V., Advanced computational approach to studying Rydberg and autoionization resonances in spectra of heavy lanthanides and actinides. Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics. Paris, France., 2017. Pp204.

296. Relativistic quantum chemistry of heavy elements and hadronic atoms and molecules. / Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., et al // , Abs. of the 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. Munich, Germany, 2017. Pp. 3-254.
297. New non-linear approach to analysis, modelling and prediction of chaotic variability of atmospheric radioactive radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration. / Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Khetselius O.Yu., et al // Abs. of the Fifth International Conference on Radiation and Application in Various Fields of Research (RAD 2017; Budva, Montenegro, 2017. Pp. 422.
298. Nonlinear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime. / Glushkov A.V, Ternovsky V.B., Mironenko D., et al, // Abs. of the 14th International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications”. Lodz. Poland, 2017. Pp.BIF319.
299. Brusentseva S.V., Non-linear dynamics of quantum and laser systems with elements of a chaos: Advanced computational code. / Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., et al // , Abs. of the 28<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics. Gauteng. South Africa, 2016. Pp.6- 86 (ID-111).
300. Ternovsky V.B., Advanced relativistic energy approach to computing the radiation transition probabilities for heavy rydberg atoms .Abs. of the International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology”. Odessa. Ukraine, August 11-13, 2016. Odessa: OSENU., 2016. Pp.37.
301. Ternovsky V., Relativistic Energy Approach and Perturbation Theory in Description of Spectral Parameters of Heavy Atomic Systems. Abs. of the 24th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine)., 2019. Pp.63.
302. Observation of kaonic hydrogen atom x rays. / Ito T.M., Hayano R.S., Nakamura S.N. et al // Phys Rev, 1998. C. 58. Pp. 2366-2382.
303. Deloff A. Fundamentals in Hadronic Atomic Theory. World Scientific, New Jersey. ,2003.
304. Ishiwatari T. On behalf of the SIDDHARTA Collaboration, Silicon drift detectors for the kaonic atom X-ray measurements in the SIDDHARTA experiment. Nucl.Instr. and Methods in Physics. Research Sec A., 2007. Vol. 581. (1-2) Pp. 326-329.
305. Kaonic hydrogen X rays – experiments at DAFNE. Proc. KAON / Cargnelli M., Ishiwatari T., Kienle P. et al. // Int. Conf., Laboratori Nazionali di Frascati dell'INFN (Rome, Italy)., 2007.

306. Towards a field theoretic understanding of  $NN \rightarrow NN\pi$ . / Lensky V., Baru V., Haidenbauer J. et al // *Eur Phys J A*, 2003. Vol. 27. Pp. 37-45.
307. X-ray transition energies: new approach to a comprehensive evaluation. / Deslattes R., Kessler E., Indelicato P. et al // *Rev Mod Phys*, 2003. Vol. 75 Pp. 35-99.
308. Precision measurements of K- and  $\Sigma$ - masses. / Gall K.P., Austin E., Miller J.P. et al, *Phys Rev Lett*, 1998 Vol. 60. Pp.186-190.
309. Menshikov L.I., Evseev M.K. Some problems of the physics of exotic atoms. *Phys Uspekhi*, 2001. Vol. 44. Pp. 135-180.
310. Scherer. S. Introduction to Chiral Perturbation Theory; edited by Negele J., Vogt E. // *Advances in Nuclear Physics*. 2003. Vol. 27. Springer, Heidelberg. Pp. 277-538.
311. Leon M., Seki R. Atomic Capture of Negative Mesons. *Phys Rev Lett*, 1989. Vol. 32. Pp.132.
312. Strong interaction effects in high-ZK atoms. / Batty C.J., Eckhause M., Gall KP et al // *Phys Rev*, 1989 Vol. 40. Pp. 2154-2162.
313. Dynamic mixing in  $\bar{p}$  and k- atoms / Chen M. Y., Asano Y., Cheng S.C. et al // of  $^{238}\text{U}$ . *Nucl Phys A*, 1975. Vol. 250. Pp.413-421.
314. Electric quadrupole moments and strong interaction effects in piomic atoms of  $^{165}\text{Ho}$ ,  $^{175}\text{Lu}$ ,  $^{176}\text{Lu}$ ,  $^{179}\text{Hf}$ ,  $^{181}\text{Ta}$ . / Olaniyi B., Shor A., Cheng S. et al // *Nucl Phys A*, 1982. Vol. 403. Pp. 572.
315. Erikson M., Ericson T. Optical Properties of Low Energy Pions in Nuclei. *Ann Phys*, 1966. Vol.36. Pp.323.
316. Shifts and Widths of 2p Levels in Pionic Atoms. / Batty C.J., Biagi S.F., Friedman E., Hoath S.D. // *Phys Rev Lett*, 1978. Vol. 40. Pp.931.
317. Batty C.J., Friedman E., Gal A. Saturation effects in pionic atoms and the  $\pi$ -nucleus optical potential. // *Nucl Phys A*, 1983, Vol. 402. Pp.411-428.
318. Precision measurement of the  $3d \rightarrow 2p$  x-ray energy in kaonic  $^4\text{He}$ . / Okada S., Beer G., Bhang H. et al // , *Phys Lett B*, 2007. Vol. 653(5-6). Pp.387-391.
319. Precision spectroscopy of Kaonic Helium  $3d \rightarrow 2p$  X-rays. / Okada S., Beer G., Bhang H. et al // *Nucl Phys A*, 2007. Vol. 790(1-4). Pp. 663-666.
320. Low-energy X-ray standards from pionic atoms. / Anagnostopoulos D., Biri S., Boisbourdain V. et al . // *Nucl Inst Meth.B*. 2003, Vol. 25. Pp. 9.
321. Wiegand C.E., Penl R.H. Measurement of Kaonic X Rays from  $^4\text{He}$ . // *Phys. Rev. Lett.*, 1971. Vol. 27(21). Pp. 1410-1412.
322. Compilation of coupling constants and low-energy parameters / Nagels



- M.M., de Swart J., Nielsen H. et al. // Nucl Phys B, 1976. Vol. 109. Pp.1-90.
323. Lauss B. Fundamental measurements with muons -View from PSI. // Nucl Phys A. PSI experiment R-98.01, 2009. Vol. 827. Pp. 401.
324. CERN DIRAC Collaboration Search for long-lived states of  $\pi^+\pi^-$  and  $\pi$ -K atoms. CERN-SPSLC-2011-001 SPSLC-P-284-ADD 22, 2011
325. Deeply bound pionic atoms on  $\beta$ -unstable nuclei. / Umemoto Y., Hirenzaki S., Kume K. et al , // Nucl Phys A, 2001. Vol. 679. Pp.549-562.
326. Nose-Togawa N., Hirenzaki S., Pion-nucleus potential parameters and quadrupole effect in deeply bound pionic atom. // Nucl Phys A, 1999. Vol. 646. Pp. 467-478.
327. Initial angular momentum distribution of atomic pions in the formation process of pionic atoms. Ninomiya K., Nakagaki R., Nakatsuka T. et al // Radiochem Acta, 2004. Vol. 93. Pp. 513.
328. Hatsuda T., Kunihiro T. Observed hadron properties for the study of QCD vacuum structure. Phys Rept,1994. Vol. 247. Pp. 221.
329. Precision Spectroscopy of Deeply Bound Pionic Atoms and Partial Restoration of Chiral Symmetry in Medium. / Ikeno N., Kimura R., Yamagata-Sekihara et al, // arXiv:1107.5918v1 [nucl-th], 2011
330. Kolomeitsev E.E., Kaiser N., Weise W. / Chiral Dynamics of Deeply Bound Pionic Atoms, Phys Rev Lett,2003. Vol. 90. Pp.092501.
331. Lyubovitskij V., Rusetsky A.  $\pi$ -patom in ChPT: strong energy-level shift. A Phys Lett, 2000. Vol. 494. Pp. 9-18.
332. Quantum-electrodynamics corrections in pionic hydrogen. / Schlessler S., Le Bigot E.-Q, Indelicato P. et al, // Phys Rev C, 2011. Vol. 84. Pp.015211.
333. The strong interaction shift and width of the ground state of pionic hydrogen Original research article. / Sigg D., Badertscher A., Bogdan M. et al, // Nuc Phys A., 1996. Vol. 609. Pp.269-436.
334. Conclusions from recent pionic-atom experiments. / Gotta D., Amaro F., Anagnostopoulos D. et al , // Precision Physics of Simple Atoms and Molecules, Ser. Lecture Notes in Physics, Springer, Heidelberg, 2008. Vol. 745. Pp.165-186.
335. Relativistic quantum chemistry of heavy ions and hadronic atomic systems: Spectra and energy shifts. AIP Conference Proceedings. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P.et al, 2009, Vol. 1102. Pp.168-171.
336. Sensing hyperfine-structure, electroweak interaction and parity non-conservation effect in heavy atoms and nuclei / Khetselius O.Yu., Lopatkin

- Yu.M., Dubrovskaya Yu.V., et al // New nuclear-QED approach. Sensor Electr. And Microsyst. Techn., 2010. Vol. 7(2). Pp.11-19.
337. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Radiation decay of atomic states: atomic residue polarization and gauge noninvariant contributions. Phys Lett A, 1986. Vol. 170. Pp. 33-36.
338. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P. Autoionization Phenomena in Atoms. Moscow University Press, Moscow, 1986. Pp. 58-160.
339. Ivanova E.P., Glushkov A.V. Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences. J Quant Spectr Rad Transfer, 1986. Vol. 36. Pp.127-145.
340. Fermi E., Teller E. Atomic capture of negative mesons. Phys Rev, 1947. Vol. 72. Pp.399-407.
341. Mohr P.J. Energy Levels of H-like atoms predicted by Quantum Electrodynamics,  $10 < Z < 40$ . Atom Dat Nucl Dat Tabl, 1983. Vol. 24. Pp.453.
342. Indelicato P. Relativistic effects in few-electron heavy ions. Ab initio evaluation of levels energy and transitions probabilities. Phys Scripta, 1996. Vol. 65. Pp.57.
343. Indelicato P., Trassinelli M. From heavy ions to exotic atoms. arXiv:physics, 2005. Pp. 0510126v1.
344. X-ray energies of circular transitions and electron screening in kaonic atoms. / Santos J., Parente F., Boucard S. et al // Phys Rev A, 1985. Vol. 71. Pp.032501.
345. Strong interaction effects in high Z- K- atoms. / Batty C.J., Eckhause M., Gall K.P. et al // Phys Rev C, 1989. Vol. 40. Pp.2154-2160.
346. E2 dynamic mixing in p and K- atoms of  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{238}\text{U}$ . / Chen M.Y., Asano Y., Chen S.C. et al // Nucl Phys A, 1975. Vol. 250. Pp. 413-421.
347. Sukharev D., Khetselius O., Dubrovskaya Yu. Sensing strong interaction effects in spectroscopy of hadronic atoms. Sensor Electr and Microsyst Techn, 2009 Vol. 3. Pp. 16-21.
348. Bremsstrahlung and X-ray spectra for kaonic and pionic hydrogen and nitrogen. / Florke T.A., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., et al // Photoelectronics, 2009. Vol. 18. Pp.16-20.
349. Estimating of X-ray spectra for kaonic atoms as tool for sensing the nuclear structure. / Khetselius O.Yu., Turin A.V., Sukharev D.E, et al // Sensor Electr and Microsyst Techn.2009. Vol. 1. Pp. 30-35.
350. Indelicato P. Exotic atoms. arXiv:physics, 2004. 0409058v1.

351. Trassinelli M., Indelicato P. Relativistic calculations of pionic and kaonic atoms hyperfine structure. arXiv:physics,2007. 0611263v2.
352. Serot B., Walecka J. The Relativistic Nuclear Many Body Problem. In: Adv Nucl Phys Plenum Press, New York., 1986. Vol. 16.
353. Zmeskal Z. On behalf of the DEAR Collob. New measurements of the kaonic hydrogen X-ray spectra at DEAR. Proc Int Conf on Nuclear Phys. Geteborg, Sweden,2004. W31.
354. Sensing the capture of negative muon by atoms: Energy approach. / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., et al / Sensor Electr. And Microsyst. Techn.,2006. Vol. 3(4). Pp. 31-35.
355. Mohr P.J. Self-energy of the  $n=2$  states in a strong Coulomb field. // Phys Rev A, 1982. Vol. 26. Pp.2338.
356. Flambaum V.V., Ginges J.S.M. Radiative potential and calculations of QED radiative corrections to energy levels and electromagnetic amplitudes in many-electron atoms. // Phys Rev A, 2005. Vol.72. Pp.052115.
357. Safranova U.I., Safranova M.S., Johnson W.R. Excitation energies, hyperfine constants, E1, E2, and M1 transition rates, and lifetimes of  $6s2nl$  states in T1I and T2II. // Phys Rev A, 2005. Vol. 71. Pp.052506.
358. Yerokhin V.A., Artemyev A.N., Shabaev V.M. QED treatment of electron correlation in Li-like ions. // Phys Rev A , 2007. Vol. 75. Pp.062501
359. Indelicato P., Relativistic effects in few-electron heavy atoms. Ab initio evaluation of levels energy and transition probabilities / Indelicato P. // Phys.Scripta T., 1996. Vol.65. Pp.57-62 .
360. Schneider S.M., Greiner W., Soff G. Vacuum-polarization contribution to the hydrogen-structure splitting of H-like atoms // Phys.Rev.A., 1994. Vol.50. Pp.118-122 .
361. Two-electron Lamb-shift calculations on heliumlike ions. / Persson H., Lindgren I., Salomonson S. et al, 1996. Phys Rev Lett Vol. 76. Pp.204-207.
362. Relativistic quantum chemistry: An advanced approach to the construction of the Green function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential. / Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Y., et al // Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Nascimento M., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G. Springer, Cham,2015. Vol. 29. Pp. 197-217.
363. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant

resonances applied to analysis of reaction ( $\mu$ -n) on the nucleus  $^{40}\text{Ca}$ . / Glushkov A.V., Lovett L., Khetselius O.Yu., // *Modern Phys. A*, 2009. Vol. 24(2-3). Pp. 611-615.

364. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions. / Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., et al // *New Projects and New Lines of Research in Nuclear Physics*. World Scientific.; edited by: Fazio G, Hanappe F. Singapore, 2003. Pp. 126-132.

365. Glushkov A.V. Energy approach to resonance states of compound superheavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions. // *Low Energy Antiproton Physics*,. AIP Conf Proc; edited by: Grzonka D, Czyzykiewicz R, Oelert W et al. New York, 2005. Vol. 796. Pp. 206-210.

366. Glushkov A.V. Spectroscopy of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Energy and spectral parameters. *J Phys: Conf. Ser*, 2012. Vol. 397. Pp. 012011.

367. Khetselius O.Yu. Relativistic Energy Approach to Cooperative Electron- $\gamma$ -Nuclear Processes: NEET Effect. // *Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Nishikawa K., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G., Piecuch P. Springer, Dordrecht, 2012. Vol. 26. Pp. 217-229.

368. Khetselius O.Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes.// *Quant Chem*, 2009 Vol. 109. Pp. 330-335.

369. Khetselius O.Yu. Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes. *Phys Scripta*, 2009. Vol. 135. Pp. 014023.

370. Khetselius O.Yu. Optimized Perturbation Theory for Calculating the Hyperfine Line Shift and Broadening of Heavy Atoms in a Buffer Gas. // *Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Nascimento M, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G. Springer, Cham, 2015. Vol. 29. Pp. 55-76.

371. Khetselius O.Yu. Hyperfine structure of atomic spectra. Astroprint, Odessa, 2008.

372. Khetselius O.Yu. Atomic parity non-conservation effect in heavy atoms and observing P and PT violation using NMR shift in a laser beam: To precise theory. // *J Phys: Conf Ser*, 2009. Vol. 194. Pp.022009.

373. Khetselius O.Yu. Relativistic hyperfine structure spectral lines and atomic parity nonconservation effect in heavy atomic systems within QED theory. // AIP Conf Proc, 2010. Vol. 1290. Pp. 29-33.
374. Glushkov A.V. Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions. // Journal of Appl Spectroscopy, 1992. Vol. 56(1). Pp. 5-9.
375. Glushkov A.V. Relativistic polarization potential of a many-electron atom. // Sov Phys Journal, 1990. vol. 33(1). Pp.1-4.
376. Computational modelling parity nonconservation and electroweak interaction effects in heavy atomic systems within the nuclear-relativistic many-body perturbation theory. J. Phys. / Khetselius O. Yu., Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., et al // Conf. Ser. ,2017. Vol. 905. Pp. 012029
377. Relativistic theory of spectra of pionic atomic system  $^{208}\text{Pb}$  with account of strong pion-nuclear interaction effects. / Serga I.N., Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., et al // Photoelectronics, 2017. Vol. 26. Pp. 68-77.
378. Relativistic theory of spectra of heavy pionic atomic systems with account of strong pion-nuclear interaction effects:  $^{93}\text{Nb}$ ,  $^{173}\text{Yb}$ ,  $^{181}\text{Ta}$ ,  $^{197}\text{Au}$ . / Bystryantseva A.N., Khetseliu O.Yu., Dubrovskaya Yu.V. et al // Photoelectronics ,2016. Vol. 25. Pp.56-61.
379. Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Hyperfine Structure and Oscillator Strength Parameters for Some Heavy Element Atoms and Ions. / Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Smirnov A.V. et al // Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Tadjer A, Pavlov R, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G. Springer. Cham, 2017. Vol. 30. Pp. 271-281.
380. Ivanov L.N., Ivanova E.P. Method of Sturm orbitals in calculation of physical characteristics of radiation from atoms and ions. JETP ,1996. Vol. 83. Pp. 254-266.
381. Ivanov L.N., Letokhov V.S. Doubly excited autoionization states of multielectron atoms. Com Mod Phys D: At Mol Phys, 1985. Vol. 4. Pp.169-184.
382. Khetselius O.Yu. <http://aip.scitation.org/author/Florko%2C+T+A> Determination of the hyperfine and electroweak interactions parameters and parity non-conservation amplitudes in heavy atoms and nuclei within nuclear-qed theory. // Photoelectronics, 2011. Vol. 20. Pp. 12-17.
383. Svinarenko A. Study of spectra for lanthanides atoms with relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances. // J Phys: Conf Ser, 2014. Vol. 548. Pp. 012039.

384. 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., Gurnitskaya E.P., et al // *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.*; edited by: Wilson S, Grout PJ, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P. Springer, Dordrecht, 2008. Vol. 18., Pp. 507-524.
385. Relativistic quantum chemistry and spectroscopy of exotic atomic systems with accounting for strong interaction effects. / Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., et al // *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.*; edited by: Wang Y.A., Thachuk M., Krems R., Maruani J. Cham Springer, 2018. Vol. 31. Pp. 71-91.
386. Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems With Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects. *Advances in Quantum Chemistry* / Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., Amsterdam: Elsevier, 2019. Vol. 78. Pp. 193-222.
387. Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of helium: Test and new spectral data. / Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B. et al // *Photoelectronics*, 2015. Vol. 24. Pp. 94-102.
388. Calculation and extrapolation of oscillator strengths in Rb-like, multiply charged ions. / Glushkov A.V., Butenko Yu.V., Serbov N.G., et al // *Russian Phys Journ*, 1996 Vol. 39(1). Pp. 81-83.
389. Mohr P.J. Quantum Electrodynamics Calculations in few-Electron Systems. // *Phys Scripta*, 1993. Vol. 46. Pp. 44.
390. QED theory of radiation emission and absorption lines for atoms in a strong laser field. / Glushkov A.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., et al // *Phys Scripta*, 2009. Vol. 135. Pp. 014022.
391. Glushkov A.V. Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton Resonances. *J Phys: Conf Ser*, 2014. Vol. 548. Pp. 012020.
392. Diagnostics of the collisionally pumped plasma and search of the optimal plasma parameters of x-ray lasing: Calculation of electron-collision strengths and rate coefficients for Ne-like plasma. / Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Loboda A.V., et al // *J. Phys. Conf Ser*, 2005. Vol. 11. Pp. 188-198.
393. Calculation of the oscillator strengths in Fr-like multiply charged ions. / Glushkov A.V., Butenko Yu.V., Serbov N.G., et al // *Journ of Applied Spectrosc*,

1996. Vol. 63(1). Pp. 28-30.
394. Nonlinear chaotic dynamics of quantum systems: molecules in an electromagnetic field. / Ignatenko A.V., Buyadzhi A.A., Buyadzhi V.V., et al *Adv Quantum Chem*, 2019. Vol. 78. Pp.149-170.
395. Computational code in atomic and nuclear quantum optics / Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., Ignatenko A.V., et al // *Conf. Ser.*, 2017. Vol. 905. Pp. 012004.
396. Computing of radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach / Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., et al // *Advanced Code. J. Phys: Conf Ser*, 2017. Vol. 905. Pp. 012003.
397. Low-energy X-ray standards from hydrogenlike pionic atoms. arXiv / Anagnostopoulos D., Gotta D., Indelicato P., et al // *physics*, 2003. 0312090v1.
398. Bieron J., Pyykkö P., Jonsson P. Nuclear quadrupole moment of  $^{201}\text{HgP}$ . *Phys Rev A*, 2005. Vol. 71. Pp. 012502.
399. Nagasawa T., Naga A., Nakano M. Hyperfine splitting of hydrogen like atoms based on relativistic mean field theory. *Phys Rev C*, 20040 Vol. 69. Pp. 034322.
400. Nuclear Signatures in High-Order Harmonic Generation from Laser-Driven Muonic Atoms. / Shahbaz A., Muller C., Staudt A. et al // *Phys Rev Lett*, 2007. Vol. 98. Pp. 263901.
401. Grojean C. New approaches to electroweak symmetry breaking. *Physics-Uspekhi*. 2007. Vol. 50. Pp. 3-42.
402. Rusov V.D., Tarasov V.A., Litvinov D.A., *Physics of reactor antineutrinos*. Moscow: URSS, 2008.
403. Glushkov A.V., Khetselius O., Lovett L. Electron- $\beta$ -nuclear spectroscopy of atoms and molecules and chemical bond effect on the  $\beta$ -decay parameters. // *Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures*. Series: Progress in Theor. Chem. and Phys.; edited by: Piecuch P, Maruani J, Delgado-Barrio G, Wilson S Springer, Dordrecht, 2009. Vol. 20. Pp. 125-152.
404. Harston M.R., Pyper N.C. On estimates of probabilities for beta decay of a Nucleus with capture on electron shells. // *Phys. Rev. Lett.*, 1986. Vol. 56. Pp. 1790-1795.
405. Dzhelepov B.S., Zyryanova L.P. and Suslov Y.P. Beta processes. Functions for the analysis of beta spectra and electron capture. Leningrad: Nauka, 1978.
406. Haxton W.C., Liu C.P., Ramsey-Musolf M.J. Anapole Moment and Other

- Constraints on the Strangeness Conserving Hadronic Weak Interaction. // Phys.Rev.Lett., 2001. Vol. 86. Pp. 5247-5250.
407. Haxton W.C., Liu C.P., Ramsey-Musolf M.J. Nuclear anapole moments. // Phys. Rev. C., 2002. Vol. 65. Pp. 045502.
408. Beta-Decay Strength Measurement, Total Beta-Decay Energy Determination and Decay-Scheme Completeness Testing by Total Absorption gamma-ray Spectroscopy / Izosimov I.N., Kazimov A.A., Kalinnikov V.G., et al // Phys. Atom. Nucl., 2014. Vol. 67(10). Pp. 1876-1882.
409. Tegen R. Beta decay of the free neutron and a (near) degenerate neutrino mass. // Nucl. Phys. A, 2002. Vol. 706. Pp. 193-202.
410. Glushkov A.V. Relativistic Quantum Theory. Quantum, mechanics of atomic Systems. Odessa: Astroprint, 2008.
411. Khetselius O.Yu. Hyperfine structure of atomic spectra. Astroprint, Odessa., 2008.
412. Band I.M., Listengarten M.A. and Trzhaskovskaya M.V. Calculation of hyperfine structure constants of spectra of heavy ions based on the Hartree-Fock-Dirac method. Izv. AN USSR., 1986. Vol. 50. Pp. 240-244.
413. Band I.M., Listengarten M.A. and Trzhaskovskaya M.V. Probability of  $\beta$ -decay in the Hartree-Fock-Dirac model of the atom and the influence of the chemical environment on  $\beta$ -decay. Izv. AN USSR. Ser. Phys., 1986. Vol. 51. Pp. 1998-2004.
414. Bandurina L.A., Lendel A.I., Medvedev S.Y. Processes in the electron shell accompanying  $\beta$ -decay of nickel and determination of the boundary energy of the  $\beta$ -spectrum. // Nucl. Phys., 1987. Vol. 45. Pp. 642-646.
415. Auerbach N. Search for electric dipole moments in atoms of radioactive nuclei. J Phys G // Nucl Part Phys, 2008. Vol. 35. Pp. 014040.
416. Serot B.D., Walecka J.D. Advances in Nuclear Physics. The Relativistic Nuclear Many Body Problem. Plenum Press. New York, 1986. Vol. 16.
417. Turin A.V., Khetselius O.Y., Dubrovskaya Y.V. The beta electron final state interaction effect on beta decay probabilities for  $^{42}\text{Se}$  nucleus within relativistic Hartree-Fock approach. // Photoelectronics., 2007. Vol. 16. Pp. 120-122.
418. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: Discharge of metastable nuclei during negative muon capture. / Malinovskaya S.V., Glushkov A.V., Dubrovskaya Y.V., et al // / Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems. Series:Progress in Theoretical Chemistry and



Physics.; edited by: Julien J.-P., Maruani J., Mayou D., Wilson S., Delgado-Barion G. Dordrecht: Springer, 2006. Vol. 15. Pp. 301-306.

419. Malinovskaya S., Dubrovskaya Yu., Vitavetskaya L. Advanced Quantum Mechanical Calculation of the Beta Decay Probabilities. Energy approach to resonance states of compound superheavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions. // Low Energy Antiproton Physics.; edited by: Grzonka D., Czyzykiewicz R., Oelert W., Rozek T. AIP: New York, AIP Conf. Proc., 2005 Vol. 796. Pp. 201-205.

420. Malinovskaya S.V., Dubrovskaya Yu.V., Zelentzova T.N. The atomic chemical environment effect on the  $\beta$  decay probabilities: Relativistic calculation. Herald of Kiev Nat Univ. // Series: Phys Math, 2004. Vol. 4. Pp. 427-432.

421. Sensing hyperfine-structure, electroweak interaction and parity non-conservation effect in heavy atoms and nuclei / Khetselius O.Yu., Lopatkin Yu.M., Dubrovskaya Yu.V., et al // New nuclear-QED approach. Sensor Electr and Microsyst. Techn., 2010. Vol. 7(2). Pp. 11-19.

422. Kopytin I.V., Karelin K.N., Nekipelov A.A. Exact Inclusion of the Coulomb Field in the Photobeta Decay of a Nucleus and Problem of Bypassed Elements. // Phys. Atom. Nucl., 2004. Vol. 67(8). Pp. 1429-1441.

423. Relativistic quantum chemistry and spectroscopy of exotic atomic systems with accounting for strong interaction effects. / Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., et al // Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series : Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Wang Y.A., Thachuk M., Krems R., Maruani J. Springer, Cham, 2018. Vol. 31. Pp. 71-91.

424. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant resonances applied to analysis of reaction ( $\mu$ -n) on the nucleus  $^{40}\text{Ca}$ . / Glushkov A.V., Lovett L., Khetselius O.Yu., et al // Modern Phys. A, 2009. Vol. 24(2-3). Pp. 611-615.

425. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions. / Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., et al // New Projects and New Lines of Research in Nuclear Physics. World Scientific.; edited by: Fazio G., Hanappe F. Singapore, 2003. Pp. 126-132.

426. QED calculation of the super heavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hfs for different nuclear models. Nucl Phys A / Glushkov A. V., Ambrosov S., Khetselius O. et al // Nucl and Hadr Phys, 2004. Vol. 734. Pp. 21-

28.

427. QED calculation of heavy multicharged ions with account for correlation, radiative and nuclear effects. / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., et al // Recent Advances in Theor. Phys. and Chem. Systems. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Julien J.-P., Maruani J., Mayou D., Wilson S., Delgado-Barion G. Springer, Dordrecht, 2005. Vol. 15., Pp. 285-299.

428. Computational modelling parity nonconservation and electroweak interaction effects in heavy atomic systems within the nuclear-relativistic many-body perturbation theory. / J. Phys. Khetselius O. Yu., Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., et al // Conf. Ser., 2017. Vol. 905. Pp. 012029.

429. Khetselius O.Y. Hyperfine structure of energy levels for isotopes  $^{73}\text{Ge}$ ,  $^{75}\text{As}$ ,  $^{201}\text{Hg}$ . / Photoelectronics, 2007. Vol. 16. Pp. 129-132.

430. Khetselius O. On possibility of sensing nuclei of the rare isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine structure. Sensor Electr Micros Techn, 2008. Vol. 3. Pp. 28-33.

431. Khetselius O.Yu. On sensing nuclei of the lanthanide isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine structure  $^{165}\text{Ho}$ ,  $^{169}\text{Tm}$ . // Sensor Electr and Microsyst. Techn., 2008. Vol. 2. Pp. 5-9.

432. Khetselius O.Yu. Atomic parity non-conservation effect in heavy atoms and observing P and PT violation using NMR shift in a laser beam // To precise theory. J Phys: Conf Ser, 2009. Vol. 194. Pp. 022009.

433. Khetselius O.Yu. On sensing nuclei of the  $^{207}\text{Bi}$  &  $^{207}\text{Pb}$  isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine. // Sensor Electr. and Microsyst. Techn., 2009. Vol. 2. Pp. 26-29.

434. Khetselius O. Yu. Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes. // Phys Scripta, 2009. T135. Pp. 014023.

435. Khetselius O.Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. // Quantum Chemistry, 2009. Vol. 109. Pp. 330-335.

436. Khetselius O.Yu. Relativistic hyperfine structure spectral lines and atomic parity nonconservation effect in heavy atomic systems within QED theory. // AIP Conf Proc, 2010. Vol. 1290. Pp. 29-33.

437. Rusov V., Zelentsova T., Tarasov V. The inverse problem of distance neutrino diagnostic of inside-reactor processes. // J Appl Phys, 2004. Vol. 96.

Pp. 1734-1739.

438. Khetselius O.Yu. Quantum Geometry: New approach to quantization of quasistationary states of Dirac equation for superheavy ion and calculating hyperfine structure parameters. // Proc. Intern. Geom. Center, 2012. Vol. 5(3-4). Pp. 39-45.

439. Khetselius O.Yu. Relativistic Energy Approach to Cooperative Electron- $\gamma$ -Nuclear Processes: NEET Effect. // Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Nishikawa K., Maruani J., Brändas E., Delgado-Barrio G., Piecuch P Springer, Dordrecht, 2012. Vol. 26. Pp. 217-229.

440. Sensing the capture of negative muon by atoms / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Y.V., et al // Energy approach. Sensor Electr. and Microsyst. Techn., 2006. Vol. 3. Pp. 31-35.

441. Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi model nuclear potential / Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., et al // Quant Chem, 2009. Vol. 109. Pp. 1717-1727.

442. Gauge-Invariant QED Perturbation Theory Approach to Calculating Nuclear Electric Quadrupole Moments, Hyperfine Structure Constants for Heavy Atoms and Ions. // Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.; edited by: Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., et al Springer, Dordrecht, 2008. Vol. 18. Pp. 507-524.

443. Burvenich T.J., Evers J., Keitel C.H. Dynamic nuclear Stark shift in superintense laser fields. // Phys. Rev. C., 2006. Vol. 74. Pp.044601.

444. Glushkov A.V. Spectroscopy of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Energy and spectral parameters. // J Phys: Conf Ser, 2012. Vol. 397 Pp. 012011.

445. Glushkov A.V. Energy approach to resonance states of compound superheavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions. // Low Energy Antiproton Physics. AIP Conf Proc.; edited by: Grzonka D., Czyzykiewicz R., Oelert W. et al. New York, 2005. Vol. 796. Pp. 206-210.

446. Furnstahl R. J. Next generation relativistic models. // Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics.; edited by: G.A. Lalazissis, P. Ring, Vretenar D. Berlin: Springer, 2004. Vol. 641. Pp. 1-30.

447. Johnson W.R., Safronova M.S., Safronova U.I. Combined effect of

- coherent  $Z$  exchange and hyperfine interaction in parity-nonconserving interaction. // *Phys Rev A*, 2003. Vol. 67. Pp. P062106.
448. Johnson W.R., Sapirstein J., Blundell S.A. Atomic structure calculations associated with PNC experiments in atomic caesium. // *Phys Scripta*, 1993. Vol. 46. Pp. 184-192.
449. Nagasawa T., Haga A., Nakano M. Hyperfine splitting of hydrogenlike atoms based on relativistic mean field theory. // *Phys Rev C*, 2004. Vol. 69. Pp. 1-10.
450. Tomaselli M., Schneider S.M., Kankeleit E. Ground state magnetization of  $^{209}\text{Bi}$  in a dynamic-correlation model. // *Phys Rev C*, 1995. Vol. 51(6). Pp. 2989-2997.
451. Nuclear excitation by electron transition in  $^{189}\text{Os}$ . / Ahmad I., Dunford R., Esbensen H., et al // *Phys Rev*, 2000. Vol. 61. Pp. 051304.
452. Benczer-Koller N. The role of magnetic moments in the determination of nuclear wave functions of short-lived excited states. // *J Phys CS*, 2005. Vol. 20. Pp. 51-58.
453. Safronova M.S., Johnson W.R., Derevianko A. Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, and static polarizabilities for alkali-metal atoms. // *Phys Rev A*, 1999. Vol. 60. Pp. 044103.
454. New directions in atomic PNC. / Safronova M.S., Rupsi P., Jiang D. et al // *Nucl Phys A*, 2009. Vol. 827. Pp. 411-413.
455. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections, and hfs for different nuclear models. *Nucl. Phys. A* / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., et al // *nucl. and hadr. Phys.*, 2004. Vol. 734. Pp. 21-26.
456. Sukharev D.E., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Y.V. Sensing strong interaction effects in spectroscopy of hadronic atoms. / *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*, 2009. № 3. Pp. 16-21.
457. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Relativistic theory of cooperative muon- $\gamma$  -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. // *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics.*; edited by: Hoggan P., Brändas E., Maruani J., Delgado-Barrio G., Piecuch P. Dordrecht: Springer, 2012. Vol. 22., Pp. 51-68.

Наукове електронне видання

# РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ ТА АДРОННИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

МОНОГРАФІЯ

О.В. Глушков, О.Ю. Хецеліус, А.А. Свиначенко, В.Б. Терновський

Відповідальний редактор:  
Глушков Олександр Васильович

**Видавець і виготовлювач**

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, м. Одеса, 65016

тел./факс: (0482) 32-67-35

Е-mail: [info@odeku.edu.ua](mailto:info@odeku.edu.ua)

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 5242 від 08.11.2016