

**О.В. ГЛУШКОВ, О.Ю. ХЕЦЕЛУС, А.А. СВИНАРЕНКО,
В.В. БУЯДЖИ**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ
ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ В СКЛАДНИХ
ЕЛЕКТРОН- ТА ІОН- АТОМНИХ СИСТЕМАХ**

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. ХЕЦЕЛУС, А.А. СВИНАРЕНКО,
В.В. БУЯДЖИ**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ЗА РАХУНОК
ЗІТКНЕНЬ В СКЛАДНИХ ЕЛЕКТРОН- ТА ІОН -
АТОМНИХ СИСТЕМАХ**

Монографія

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

Одеса
Одеський державний екологічний університет
2024

УДК 539.184

ГЗІ

Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в складних електрон- та іон- атомних системах: монографія / О.В. Глушков, О.Ю. Хецеліус, А.А. Свиначенко, В.В. Буяджи; за ред. О.В. Глушкова. Одеса: Одеський державний екологічний університет, 2024. 232с.

ISBN 978-966-186-295-0

Монографія присвячена викладенню основ нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці і спектроскопії, зокрема, релятивістської спектроскопії за рахунок зіткнень електрон- та іон-атомних систем. Розвинутий новий релятивістський підхід до обчислення характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (у т.ч. перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, тощо) з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів атомів і іонів (мішеней) і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень), який базується на енергетичному підході, S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу та релятивістській багаточастинковій теорії збурень з дебай-хюккелівським «0» наближенням з використанням послідовної калібрувально-інваріантної процедури генерації базисів електронних хвильових функцій. Наведені багаточисельні спектроскопічні дані для багатьох атомів та багатозарядних іонів.

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

Relativistic Collisional spectroscopy of complex electron and ion-atomic systems: monograph / A.V. Glushkov, O.Y. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi; ed. by A. Glushkov. Odesa: Odessa State Environmental University, 2024. 232p.

The monograph is devoted to the presentation of the foundations of a new scientific direction in theoretical atomic optics and spectroscopy, in particular, relativistic spectroscopy due to collisions of electron and ion-atom systems. A new relativistic approach to calculating the characteristics of electron-atom-ion collision processes (cross-sections, collision strengths, etc.) has been developed, taking into account the influence of the plasma environment in a wide range of parameters of atoms and ions (targets) and of an incident electron, which is based on the energy approach, the S-matrix formalism of Gell-Mann and Lowe and the relativistic multi-particle perturbation theory with the Debye-Hückel "0" approximation using a consistent gauge-invariant procedure for generating electronic wave function bases. Numerous spectroscopic data for many atoms and multicharged ions are given.

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 №3 від 25.04.2024 р.)

ISBN 978-966-186-295-0

© О. Глушков, О. Хецеліус, А. Свиначенко, В. Буяджи, 2024

© Одеський державний екологічний університет, 2024

ЗМІСТ

Список скорочень, сталі, одиниці:	6
ВСТУП	8
РОЗДІЛ I СПЕКТРОСКОПІЯ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ СИСТЕМ	17
1.1 Загальні зауваження і огляд експериментальних методів вивчення характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів.....	17
1.2 Основні уявлення про фізичну природу радіаційних переходів в релятивістської атомної спектроскопії	21
1.2.1 Вступні зауваження.....	21
1.2.2 Електричне дипольне випромінювання	23
1.2.3 Електричне мультипольне випромінювання	26
1.2.4 Магнітне мультипольне випромінювання.....	32
1.3 Елементи теорії спектрів автоіонізаційних станів та діелектронних сателітів для легких іонів в плазмі	34
1.4 Огляд теоретичних методів опису характеристик електрон-іонних процесів за рахунок зіткнень за участі атомів і іонів	39
1.5 Висновок до розділу 1.....	49
РОЗДІЛ II НОВИЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО ОБЧИСЛЕННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕСІВ ЕЛЕКТРОН- ІОННИХ ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ ПЛАЗМОВОГО СЕРЕДОВИЩА	51
2.1 Вступні зауваження щодо характеристики процесів електрон-іонних зіткнень. Адіабатична формула Гелл-Мана і Лоу з електродинамічної матрицею розсіювання	51
2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи з урахуванням ефектів плазмового середовища	54
2.2.1 Метод урахування ефектів плазмового середовища. Гамільтоніан нульового наближення у дебаєвському наближенні	54
2.2.2 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи: Нульове наближення та поправки першого порядку	58
2.3 Релятивістська теорія збурень для багатоелектронної атомної системи. Обмінно-кореляційні поправки	69
2.3.1 Основні обмінно-кореляційні ефекти	69
2.3.2 Метод штурмовських розкладів для урахування станів континууму.....	76

2.4 Калібрувально-інваріантний релятивістський підхід до генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення для електрон-атомної системи	80
2.5 Енергетичний підхід в теорії електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів у плазмі	87
2.6 Висновок до розділу 2.....	99
РОЗДІЛ III РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ, ПЕРЕРІЗІВ ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ І СИЛ ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ ІЗОЕЛЕКТРОННИХ ПОСЛІДОВНОСТЕЙ BeI, FI	
3.1 Вступні зауваження.....	101
3.2 Енергії рівнів, сили осциляторів і сили електронних зіткнень для збудження переходів $2s^2-2s2p$ в спектрах Be-подібних іонів	103
3.2.1 Результати обчислення енергії рівнів та сил осциляторів і переходів $2s^2-2s^2p$ в спектрах Be-подібних іонів	103
3.2.2 Результати обчислення перерізів збудження за рахунок зіткнень для Be-подібних іонів	111
3.2.3 Сили електрон-іонних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури основного стану F-подібних іонів	119
3.3 Висновок до розділу 3.....	120
РОЗДІЛ IV РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ РОЗРАХУНОК NA-ПОДІБНИХ СПЕКТРІВ - САТЕЛІТІВ ДО 2-3 ПЕРЕХОДІВ В NE-ПОДІБНИХ ІОНАХ І СПЕКТРІВ O-ПОДІБНИХ ІОНІВ	
4.1 Вступ.....	122
4.2 Огляд робіт з дослідження спектрів Na-подібних діелектронних сателітів Ne-подібних іонів	124
4.3 Релятивістський розрахунок імовірностей радіаційних переходів в спектрах Ne - подібних іонів.	126
4.3.1 Вступні зауваження.....	126
4.3.2 Енергії рівнів конфігурацій $2s^22p^53s,3d,4s,4d$ и $2s2p^63p,4p$ в іонах Ca^{+10} , Sc^{+11} , Ni^{+18} , Br^{+25} , Bi^{73+}	126
4.3.3 Ймовірності радіаційних переходів між рівнями конфігурацій $2s^22p^53s,3d,4s,4d$ и $2s2p^63p,4p$ в іонах Ni^{+18} , Br^{+25}	133
4.4 Результати релятивістського розрахунку Na-подібних спектрів – сателітів до 2-3 переходам в Ne-подібних іонах	136
4.5 Висновок до розділу 4.....	139

РОЗДІЛ V ПЕРЕРІЗИ І СИЛИ ЕЛЕКТРОН-АТОМНИХ (ІОННИХ) ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ ЗБУДЖЕННЯ З ОСНОВНОГО СТАНУ АТОМА НЕОНУ І NE-ПОДІБНИХ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ.....	141
5.1 Збудження з основного стану атома неону і Ne-подібних багатозарядних іонів	141
5.2 Перерізи збудження електронним ударом станів $2p53s$ конфігурації з основного стану атома Ne	145
5.3 Перерізи збудження і сили електрон-іонних зіткнень для Ne-подібного іона Kr.....	151
5.4 Спектроскопія за рахунок зіткнень Ne-подібного іона $Ar8+$	160
5.5 Висновок до розділу 5.....	168
РОЗДІЛ VI ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД В ТЕОРЕТИЧНІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ В ПРИСУТНОСТІ ЗОВНІШНЬОГО ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ	171
6.1 Вступні зауваження. Атомні системи у зовнішньому електромагнітному полі.....	171
6.2 Релятивістський енергетичний підхід в теорії електрон-іонних систем зіткнень в зовнішньому електромагнітному полі	176
6.3 Багатофотонні диференціальні перерізи електрон-іонних зіткнень для атома неону в полі випромінювання лазера Nd: YAG. Чисельні оцінки	182
6.4 Висновок до розділу 6.....	186
ВИСНОВОК	188
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	193

Список скорочень, сталі, одиниці

АС – автоіонізаційний стан
ВУФ - вакуумно-ультрафіолетовий (діапазон спектру)
ДКШ (DKS) – Дірака-Кона-Шема (Dirac-Kohn-Sham) метод
ДФ (DF) - Дірака-Фока (Dirac-Fock) метод
ЕП (EA) – енергетичний підхід (energy approach)
КЕД (QED) – квантово-електродинамічний (quantum electrodynamics)
КШ – Кон-Шэмовский (потенціал)
МДФ (MDF) – мега Дірака-Фока (mega Dirac-Fock) метод
МКДФ (MCDF) - багатоконфігураціонне наближення Дірака-Фока
МКХФ (MCHF) – багатоконфігураціонне наближення ХФ (Hartree-Fock)
МП (MP) – модельний потенціал (model potential)
ОДФ (ODF) – оптимізований Дірака-Фока (optimized Dirac-Fock) метод
ПП – псевдопотенціал
РХФ (RHF) – релятивістський метод Хартрі-Фока (Hartree-Fock)
ТЗ (PT) – теорія збурень (perturbation theory)
ФП (DF) – функціонал густини,
ХФ (HF) – Хартрі-Фока (Hartree-Fock) метод
AS- AutoStructure
BFD – Бейтлера-Фано (канал розпаду резонансів)
BP –Брейта-Паулі (наближення)
FAC - Flexible Atomic Code
GRASP - general-purpose relativistic atomic structure package
MCQD – багатоканальний метод квантового дефекта
PT-EA – теорія збурень-енергетичний підхід
ROD – реорієнтаційного типу (канал розпаду резонансів)
RMBPT – релятивістська багаточастинкова теорія збурень (relativistic many-body perturbation theory)
R-метод (RMBP) – R-матричний метод (метод у наближенні Брейта-Паулі)

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

Актуальність дослідження широкого кола високоенергетичних процесів збудження іонізації, зіткнень у комбінованих і навіть гібридних атомних системах (електронів, атомів, іонів і фотонів) в останні роки різко зросла, що обумовлено, з одного боку, безпрецедентним прогресом у розвитку сучасної експериментальної техніки, зокрема, різким збільшенням інтенсивності, потужності, якості джерел лазерного випромінювання (сучасні лазерні системи можуть випромінювати достатньо короткі хвилі, от декількох до десятків фемтосекунд з можливостями досягнення пікових інтенсивностей від 10^{19}В/см^2 до перспективних $\sim 10^{22}\text{В/см}^2$, наприклад, за рахунок потужностей сучасних типів лазерів на вільних електронах, таких як TESLA XFEL FEL-Europe, US, Japan). Широке використання прискорювачів, колайдерів важких іонів, джерел синхротронного випромінювання, нейтронних джерел та ін. відкриває принципово нові можливості у сучасній оптиці та спектроскопії за рахунок зіткнень атомів та багатозарядних іонів, у тому числі іонів у плазмі. З іншого боку, необхідність дослідження все більш енергетичних процесів в задачах електрон-іон-атомних зіткнень стимулює і розвиток нових теоретичних методів атомної спектроскопії за рахунок зіткнень.

Традиційно, значний інтерес до цих задач, а також авжеж відповідних наборів енергетичних та спектроскопічних характеристик обумовлений й потребами цілого ряду традиційних наукових та технологічних додатків, які включають задачі атомної оптики та спектроскопії, астрофізики, ядерної і молекулярної фізики плазми, квантової електроніки та лазерної фізики, зокрема, у сенсі пошуку нових «оптимальних» кандидатів для лазерної генерації у короткохвильовому діапазоні, побудови нових квантово-кінетичних моделей і відповідно нових лазерних схем ВУФ і рентгенівського діапазону, побудові нових принципів діагностики як низько температурної, так і високо температурної плазми, лабораторної, астрофізичної, лазерної (ядерної) плазми тощо.

Відкриття і інтенсивне експериментальне дослідження цілої низки нових нелінійно-оптичних явищ, обумовлених високо енергетичною взаємодією атомів із зовнішнім електромагнітним полем, інтенсивною взаємодією електронів та іонів в плазмі, мультігенерації гармонік, незвичайного розсіювання електронів на атомах в присутності інтенсивного ЛВ, тощо, стимулює розвиток нових, прецизійних методів опису і розрахунку

властивостей процесів розсіювання та зіткнень за участю атомів, іонів електронів, фотонів.

Між тим, не дивлячись на досить величезну кількість різноманітних теоретичних методів сучасної атомної оптики та спектроскопії, квантової теорії розсіювання та зіткнень за участю атомів, іонів, електронів та фотонів (варто нагадати про такі відомі методи як спрощене борнівське та кулонівське наближення, різноманітні версії теорії збурень (ТЗ), в яких, як правило, обмежуються лише поправками низьких порядків, з хартрі-фоківським (ХФ-НФ) та дірак-фоківським (ДФ-ДФ) наближеннями, R-, K-матричні методи, у тому числі з використанням таких моделей як наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) та інші), існує цілий клас задач та електрон-іон-атомних систем, де використання перелічених підходів не дозволяє досягнути виключно спектроскопічної точності опису. Ситуація стає досить критичною і ще більше ускладнюється при необхідності урахування ефектів, пов'язаних, наприклад з впливом плазмового середовища при дослідженні електрон-іонних зіткнень в плазмі, наявністю додаткового зовнішнього, особливо дуже інтенсивного, електромагнітного поля, можливою реалізацією як одно-так й багато-фотонних процесів особливо у складних багатоелектронних системах тощо.

Для будь-якої прецизійної теорії релятивістських електрон-іон-атомних систем фундаментальне значення має послідовне і коректне урахування багаточастинкових міжквaziчастинкових обмінно-кореляційних (обмінно-поляризаційних) ефектів, а також якість згенерованих у нульовому наближенні будь-якої теорії базисів релятивістських хвильових функцій, з чим безпосередньо є пов'язаним і виконання при дослідженні процесів розсіювання та зіткнень в електрон-іон-атомних системах фундаментального принципу калібрувальної інваріантності. Слід зазначити, що все сказане вище досі лежить в основі основних недоліків більшості із сучасних теоретичних методів атомної оптики та спектроскопії, зокрема, спектроскопії атомних систем за рахунок зіткнень. Таким чином, існує гостра необхідність розробки теоретичних основ нових підходів в прецизійній релятивістській оптиці і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем, зокрема, розвитку нового релятивістського підходу до опису та обчислення

основних енергетичних та спектральних характеристик процесів зіткнень для електрон-іон-атомних систем з одночасним, кількісно послідовним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів, впливу плазмового середовища (напр., у плазмі багатозарядних іонів), а також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання.

Метою даної монографії є докладне викладення теоретичних основ нової прецизійної релятивістської оптики і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем, розвитку нового релятивістського підходу до опису та обчислення основних енергетичних та спектральних характеристик процесів зіткнень для електрон-іон-атомних систем з одночасним, кількісно послідовним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів в межах релятивістської калібрувально-інваріантної багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай -хюккелівським наближенням у вільному стані, з урахуванням впливу плазмового середовища у дебаєвській плазмі багатозарядних іонів, а також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання. Докладно представлені та обґрунтовані розв'язки таких наукових задач.

1. Теоретичні основи нового релятивістського підходу до обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів атомів і іонів (мішеней) і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень).

2. Новий формалізм релятивістської калібрувально-інваріантної багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай -хюккелівським нульовим наближенням і адаптувати послідовну калібрувально-інваріантну *ab initio* методику генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей.

3. Розробити вперше в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування, та сформулювати методику урахування станів континууму в межах релятивістської версії методу штурмовських розкладань.

4. Виконати обчислення енергій та імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перетинів збуджень для бериліє-подібних іонів з зарядом

атомного ядра $Z=6-36$ з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища для широкого інтервалу параметрів плазми (густина, температура) і з'ясувати внесок обмінно-кореляційних поправок, а також калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційні ширини тощо.

5. Виконати детальні обчислення перерізів збудження за рахунок зіткнень для групи переходів, зокрема, в $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P)]$, $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$, $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$, $[2s2p\ ^3P^0 - (2p^2\ ^3P)]$ в спектрах Be-подібних іонів із зарядом ядра в інтервалі 6-36 та провести докладне порівняння з альтернативними теоретичними та експериментальними даними (за наявності).

6. Детальні обчислення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури $(2p\ ^2P_{3/2} - ^2P_{1/2})$ основного стану F-подібних іонів з $Z=19-26$ (енергія електрона, що налітає $\epsilon_{in}=0,1294 \cdot Z^2$ еВ, $T=Z^2$ кеВ (Z - заряд остова), $n_e=10^{18}\text{cm}^{-3}$).

7. Виконати на основі нового релятивістського енергетичного формалізму в теорії зіткнень детальні обчислення диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани $2p^5 3s$ конфігурації $(2p^5 3s[3/2]_2, 2p^5 3s[1/2]_0, 2p^5 3s[1/2]_1, 2p^5 3s[3/2]_1)$ нейтрального атома неону при енергії налітаючого електрона $E_i = 10-120$ еВ, провести докладне порівняння з альтернативними теоретичними та експериментальними даними, з'ясувавши внесок як складних обмінно-кореляційних ефектів, так і вплив якості використаних базисів релятивістських електронних хвильових функцій.

8. Виконати на основі нового релятивістського енергетичного формалізму в теорії зіткнень детальні обчислення спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом станів конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ Ne- подібного іона Kr^{26+} з основного стану (при різних температурах та електронній густині, характерних для плазми токамака, різних енергіях електрона, що налітає), провести докладне порівняння з альтернативними теоретичними та експериментальними даними, з'ясувавши внесок як складних обмінно-кореляційних ефектів, так й вплив якості використаних базисів релятивістських електронних хвильових функцій.

9. Розробити нову версію релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому полі лазерного випромінювання, що базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській

багаточастинковій ТЗ з оптимізованим нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля.

10. На основі нової версії релятивістського енергетичного формалізму, до опису електрон-атомних зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля виконати дослідження багатофотонних диференціальних перерізів ($e, 2e$) реакції для нейтрального атома неону при певних параметрах електрон-атомного зіткнення та відповідно зовнішнього поля.

Наукова новизна представлених у монографії результатів пов'язана з розвитком нового напрямку у сучасній теоретичній атомній оптиці та спектроскопії, зокрема, прецизійної релятивістської оптики і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іон-атомних систем у вільному стані, у дебаєвській плазмі з урахуванням впливу ефектів плазмового середовища, а також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання і полягає у наступному:

1. Вперше розвинутий новий релятивістський підхід до обчислення фундаментальних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного розпаду, а також радіаційного розпаду, сил осциляторів тощо) для атомів та багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів атомів і іонів (мішеней) і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень), який базується на енергетичному підході, S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу та релятивістській багаточастинковій ТЗ з ДКШ та дебай-хюккелівським нульовим наближенням з використанням послідовної калібрувально-інваріантної процедури генерації базисів хвильових функцій.

2. Вперше в рамках нового релятивістського підходу до обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища розроблені нові прецизійні процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антїекранування зовнішніх квазічастинок.

3. Вперше в рамках нового релятивістського підходу до обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища розроблена нова методика для урахування станів континууму, що базується на релятивістській версії методу штурмовських розкладань.

4. Вперше з спектроскопічною точністю представлені набори даних для енергій та імовірностей радіаційних переходів, сила осциляторів, перетинів збуджень для бериліє-подібних іонів із $Z=6-36$ з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища (відповідні параметри густина $n_e=10^{22}-10^{24}\text{cm}^{-3}$, температура $T=0.5-2$ кеВ, параметр екранування $\mu\sim 0.01-0.3$), при цьому для отриманих даних щодо сил осциляторів калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційну ширину не перевищує 0.2%, що значно менше, ніж для аналогічних даних отриманих в межах методу багатоконфігураційного наближення ДФ з урахуванням ефектів плазмового екранування в рамках спрощених моделей типу моделі іонної сфери.

5. Вперше із спектроскопічною точністю представлені набори даних для перерізів збудження за рахунок зіткнень переходів $[2s^2\ ^1S-(2s2p\ ^1P)]$, $[(2s2p\ ^3P^0)-(2s2p\ ^1P^0)]$, $[(2s2p\ ^3P^0)-(2s2p\ ^1P^0)]$, $[2s2p\ ^3P^0-(2p^2\ ^3P)]$ в спектрах бериліє-подібних іонів із зарядом ядра $Z=6-8, 26-36$; порівняння наших даних з аналогічними даними, отриманими на основі альтернативного 3-конфігураційного R-матричного методу і даними експерименту Vannister et al (1999) показує, що при енергії нижчій ніж деяке E_0 (напр., $E_0\sim 20\text{eV}$ для Ве-подібного кисню) спостерігається розумна узгодженість даних обох теоретичних обчислень з експериментальним, однак, коли енергії вище E_0 має місце розбіжність наших даних і R-матричної теорії, яка зумовлена різним ступенем урахування кореляційних ефектів (взаємодія конфігурацій) і різницею в якості використаних базисів релятивістських хвильових функцій.

6. Вперше із прийнятною для додатків точністю представлені набори даних для сил електронних зіткнень при збудженні переходу між рівнями тонкої структури ($2p\ ^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$) основного стану Ве- та F-подібних іонів з $Z=19-26$ (енергія електрону, що налітає: $E_i=\epsilon_{in}=0,1294\cdot Z^2$ еВ, $T=Z^2$ кеВ (Z заряд остова), $n_e=10^{18}\text{cm}^{-3}$), причому для Ве-подібних іонів відповідні дані отримані взагалі вперше.

7. Вперше на основі релятивістського енергетичного підходу в теорії розсіювання отримані масові дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани $2p^53s$ конфігурації ($2p^53s[3/2]_2$, $2p^53s[1/2]_0$, $2p^53s[1/2]_1$, $2p^53s[3/2]_1$) нейтрального атома неону

при енергії налітаючого електрона $E_i = 10-120$ eV (тобто в інтервалі , де традиційно використовуване звичайне борнівське наближення не працює) і виявлено , що, по-перше, для малих енергій налітаючого електрона (в інтервалі 20-30eV) узгодженість теоретичних і експериментальних даних є значно гіршою, ніж, для високих енергій налітаючого електрона в районі 100 eV; по-друге, дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують експериментальні дані, особливо у порівнянні з даними обчислень на основі методів типу UFOMBT, DWBA, RDWA; показано, що провал в перерізі, який має місце при куті розсіювання 20° імітується (не повною мірою) тільки в рамках енергетичного формалізму.

8. Вперше в межах нового релятивістського енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим нульовим ДКШ та дебай-хюккелівським наближенням отримані дані щодо спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом станів для конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ Ne- подібного іона Kr^{26+} з основного стану (енергія налітаючого електрона 4.082 keV та 6.80 keV), причому для певної групи термів дані по перерізах збудження вперше представлені; виявлено, що точність наведених теоретичних даних суттєво обумовлюється, крім всього іншого, також й якістю використаних базисів релятивістських хвильових функцій, а також, повнотою урахування обмінно-кореляційних ефектів, зокрема, ефектів міжконфігураційної взаємодії; вперше представлені із спектроскопічною точністю теоретичні дані по ефективних силах зіткнень для Ne-подібного іона к Kr^{26+} для температур $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7 K$ та електронної густини (типова густина в плазмі токамака) $n_e = 10^{14} \text{cm}^{-3}$.

9. Вперше в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень розроблено нову версію релятивістського енергетичного формалізму для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому полі лазерного випромінювання, яка що базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській багаточастинковій ТЗ з оптимізованим нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень при наявності додаткового зовнішнього поля.

10. На основі нової версії релятивістського енергетичного формалізму до опису електрон-атомних зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля вперше виконано обчислення багатифотонних

диференціальних перерізів ($e, 2e$) реакції для нейтрального атома неону при параметрах електрон-атомних зіткнень системи і поля: $\varepsilon_0 = 2 \cdot 10^8 \text{ В/см}$, $\hbar\omega = 1.17 \text{ еВ}$, $E_i = 100 \text{ еВ}$.

11. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень багатоелектронних релятивістських електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання на основі обчислень в наближенні низької частоти для ($e, 2e$) реакції іонізації нейтрального атома неону електронним ударом відкрито нове явище (нові фізичні ефекти) радикально різної поведінки перерізів реакцій типу ($e, 2e$) за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору електрона, що налітає.

Практичне значення представлених у монографії результатів обумовлено тим, що вперше розвинутий новий релятивістський підхід до опису процесів зіткнень для електрон-іон-атомних систем з одночасним, кількісно послідовним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів у вільному стані, з урахуванням впливу плазмового середовища у дебаєвській плазмі багатозарядних іонів, а також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання та отримані на його основі нові прецизійні дані для основних енергетичних та спектральних характеристик зіткнень для значної групи атомів та багатозарядних іонів у тому числі у дебаєвській плазмі, які можуть бути використані у широкому колі наукових та науково-технічних додатків, до яких відносяться нові високо енергетичні класи задач атомної оптики, лазерної, разерної та гразерної фізики, квантової електроніки, наприклад, у сенсі пошуку нових «оптимальних» кандидатів для лазерної генерації у короткохвильовому діапазоні, побудови нових квантово-кінетичних моделей і відповідно нових лазерних схем ВУФ і рентгенівського діапазону, астрофізики та фізики плазми, наприклад, у сенсі нових принципів діагностики як низько температурної, так і високо температурної плазми, лабораторної, астрофізичної, лазерної (ядерної) плазми, задачі побудови кінетичних моделей нових лазерних систем короткохвильового діапазону.

Нові методи та нові отримані результати можуть бути корисно використані і в розв'язанні таких нових задач сучасної квантової оптики та спектроскопії як дослідження надпорогового, багатофотонного, сильно польового збудження, іонізації атомів та багатозарядних іонів, незвичайного розсіювання електронів на атомах та іоніях в присутності зовнішнього інтенсивного поля лазерного випромінювання. Слід звернути увагу на безпрецедентні можливості забезпечення контролю атомних систем при

взаємодії із потоками електронів та інших частинок, дослідження генерації МЕВ рентгенівських промінів в плазмі, яка створюється фемтосекундними лазерними імпульсами, вивчення індукованих понадінтенсивним зовнішнім випромінюванням елементарних електрон-атомних процесів розсіювання, зіткнень тощо.

Автор вважають своїм приємним обов'язком висловити глибоку подяку своєму лауреату Нобелівської премії Walther Kohn, професорам Liliana Mammino, Jean Maruani, Erkki Brandas, Jacek Karwowski , Irek Grabowski за цінні рекомендації стосовно апробації, та подальшого розвитку деяких методів.

РОЗДІЛ I

СПЕКТРОСКОПІЯ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЕЛЕКТРОН-ІОННИХ СИСТЕМ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2.1 Вступні зауваження

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

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

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

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

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

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

$$-e\partial_\mu(\chi j^\mu), \quad (1.3)$$

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

Як відомо, в квантовій електродинаміці [101,102] відповідні 4-вектори j і A замінюються вдруге квантовими операторами, причому, наприклад, оператор струму визначається стандартно через ψ - оператори згідно $\hat{j} = \hat{\psi}\gamma\hat{\psi}$, а роль узагальнених «координат» q в лагранжіані

$$\int \hat{L}_{\text{ВЗАИМ}} d^3 x = -e \int (\hat{j}\hat{A}) d^3 x, \quad (1.4)$$

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

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

$$\hat{V} = e \int (\hat{j}\hat{A}) d^3 x, \quad (1.5)$$

Оператор вільного електромагнітного поля є сумою

$$\hat{A} = \sum_n [\hat{c}_n A_n(x) + \hat{c}_n^+ A_n^*(x)], \quad (1.6)$$

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

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

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

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

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

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

$$\omega = 2\pi |V_{fi}|^2, \quad (1.8)$$

Далі, як зазвичай, якщо розглядати випускання фотона з заданим імпульсом k , то очевидно:

$$dv = d^3k / (2\pi)^3 = \omega^2 d\omega d\Omega / (2\pi)^3, \quad (1.9)$$

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

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (1.10)$$

і далі після інтегрування по $d\omega$:

$$d\omega = \frac{1}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega^2 d\Omega, \quad (1.11)$$

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

$$V_{fi} = e\sqrt{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} e_{\mu}^* j_{fi}^{\mu}(k). \quad (1.12)$$

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

1.2.2 Електричне дипольне випромінювання

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

здійснюється оператором $\hat{a}_f^+ \hat{a}_i$, і для струму переходу можна записати:

$$j_{fi}^\mu = \bar{\psi}_f \gamma^\mu \psi_i = (\psi_f^* \psi_i, \psi_f^* \alpha \psi_i), \quad (1.13)$$

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

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

$$d\omega_{en} = e^2 \frac{\omega}{2\pi} |e^* j_{fi}(k)|^2 do, \quad (1.14)$$

де

$$j_{fi}(k) = \int \psi_f^* \alpha \psi_i e^{-ikr} d^3x, \quad (1.15)$$

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

$$d\omega_n = e^2 \frac{\omega}{2\pi} \left| \left[n j_{fi}(k) \right] \right|^2 do, \quad (1.16)$$

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

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

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

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

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

$$d\omega_{en} = \frac{\omega^3}{2\pi} |e^* d_{fi}|^2 d\Omega, \quad (1.17)$$

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

$$d\omega_n = \frac{\omega^3}{2\pi} |[\mathbf{n}d_{fi}]|^2 d\Omega, \quad (1.18)$$

У нерелятивістській теорії, внаслідок нерелятивістського (по відношенню до електрона) характеру вище наведених формул, шукані вирази легко узагальнюються на будь-які електронні системи. При цьому під d_{fi} в (1.14,1.15) слід розуміти матричний елемент повного дипольного моменту. Далі, очевидно, після інтегрування в усіх напрямках неважко визначити повну ймовірність випромінювання:

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2, \quad (1.19)$$

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

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3} |d_{fi}|^2, \quad (1.20)$$

Зрозуміло, записані формули виявляються повністю аналогічними класичним формулами електродинаміки для інтенсивності дипольного випромінювання системою періодично рухомих частинок, зокрема, інтенсивність випромінювання частоти $\omega_s = s\omega$ (де ω – частота руху

частинок, s - ціле число) дається відомим виразом:

$$I = \frac{4\omega_s^4}{3c^3} |d_s|^2, \quad (1.21)$$

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

$$d(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} d_s e^{-is\omega t}. \quad (1.22)$$

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

1.2.3 Електричне мультипольне випромінювання

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

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

$$V_{fi} = e \int j_{fi}^\mu(r) A_\mu^*(r) d^3x = e \int d^3x \cdot j_{fi}^\mu(r) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A^*(r) e^{-ikr}, \quad (1.23)$$

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

$$C = -\sqrt{\frac{j+1}{j}}, \quad (1.24)$$

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

$$A^\mu = (\Phi, 0), \quad \Phi = -\sqrt{\frac{j+1}{j}} \frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}} \delta(|\mathbf{k}| - \omega) Y_{jm}(\mathbf{n}), \quad (1.25)$$

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

$$V_{fi} = -e \sqrt{\frac{j+1}{j}} \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3x \cdot \rho_{fi}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{o}_n e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} Y_{jm}^*(\mathbf{n}), \quad (1.26)$$

Зазвичай далі для обчислення внутрішнього інтеграла використовується відоме розкладання виду:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l g_l(kr) Y_{lm}^*\left(\frac{\mathbf{k}}{r}\right) Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right), \quad (1.27)$$

с функцією

$$g_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr), \quad (1.28)$$

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

$$\int e^{-ikr} Y_{jm}^*(n) d\omega_n = 4\pi i^{-j} g_j(kr) Y_{jm}^*\left(\frac{r}{r}\right), \quad (1.29)$$

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

$$g_j(kr) \approx \frac{(kr)^j}{(2j+1)!!}, \quad (1.30)$$

що дозволяє остаточно отримати для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = (-1)^{m+1} i^j \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} e \left(Q_{j,-m}^{(\text{э})} \right)_{fi}, \quad (1.31)$$

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

$$\left(Q_{jm}^{(\text{э})} \right)_{fi} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int \rho_{fi}(r) r^j Y_{jm} \left(\frac{r}{r} \right) d^3x, \quad (1.32)$$

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

$$Q_{jm}^{(\text{э})} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} r^j Y_{jm}, \quad (1.33)$$

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

$$\rho_{fi}(r) = \int \psi_f^*(r_1, \dots, r_N) \psi_i(r_1, \dots, r_N) \sum_{n=1}^N \delta(r - r_N) \cdot d^3x_1 \dots d^3x_N, \quad (1.34)$$

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

$$\omega_{jm}^{(\ominus)} = \frac{2(2j+1)(j+1)}{j[(2j+1)!!]^2} \omega^{2j+1} e^2 \left| \left(Q_{j,-m}^{(\ominus)} \right)_{fi} \right|^2, \quad (1.35)$$

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

$$\omega_{1m}^{(\ominus)} = \frac{4\omega^3}{3} e^2 \left| \left(Q_{1,-m}^{(\ominus)} \right)_{fi} \right|^2, \quad (1.36)$$

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

$$eQ_{10}^{(\ominus)} = id_z, \quad (1.37)$$

$$eQ_{1,\pm 1}^{(\ominus)} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} (d_x \pm id_y), \quad (1.38)$$

Підсумовування у формулі (1.30) за значеннями m дозволяє легко отримати записану вище формулу для повної ймовірності дипольного випромінювання. Корисним є також розгляд кутового розподілу мультипольного випромінювання.

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

$$d\omega_{jm} = \left| Y_{jm}^{(\ominus)}(\mathbf{n}) \right|^2 \omega_{jm} d\omega = \frac{\omega_{jm}}{j(j+1)} \left| \nabla_{\mathbf{n}} Y_{jm} \right|^2 d\omega, \quad (1.39)$$

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

$$Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad (1.40)$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi}, \quad (1.41)$$

де θ, ϕ - полярний кут і азимут напрямку n щодо осі z .

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

$$d\omega_{10} = \omega_{10} \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta d\theta, \quad (1.42)$$

$$d\omega_{1,\pm 1} = \omega_{1,\pm 1} \frac{3}{8\pi} \frac{1+\cos^2 \theta}{2} d\theta, \quad (1.43)$$

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

$$Q_{jm}^{(\varepsilon)} \sim a^j, \quad (1.43a)$$

а ймовірність ж мультипольного випромінювання дається оцінкою:

$$\omega_{jm}^{(\varepsilon)} \sim \alpha k (ka)^{2j}, \quad (1.43b)$$

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

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

$$\left| \langle n_f J_f M_f | \mathcal{Q}_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle \right|^2 = \begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2 \left| \langle n_f J_f | \mathcal{Q}_{j,-m} | n_i J_i \rangle \right|^2, \quad (1.44a)$$

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

$$\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2, \quad (1.44б)$$

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

$$\sum_{M_f} \left| \langle n_f J_f M_f | \mathcal{Q}_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle \right|^2 = \frac{1}{2J_i + 1} \left| \langle n_f J_f | \mathcal{Q}_{j,-m} | n_i J_i \rangle \right|^2, \quad (1.44в)$$

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

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

$$|J_i - J_f| \leq j \leq J_i + J_f, \quad (1.44г)$$

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

В атомній спектроскопії протягом довгого часу основна увага приділялася електричним дипольним переходам в спектрах атомних систем як найбільш інтенсивним. Справа в тому, що в атомах ймовірність

випромінювання швидко убуває зі збільшенням j і найбільш інтенсивне випромінювання відповідає, на відміну, скажімо, від ядер, найменшій можливій мультипольності. проекції M_i і M_f моментів J_i і J_f разом з проекцією m моменту фотона задовольняють звичайним правилом [104]:

$$M_i - M_f = m, \quad (1.45)$$

Парності P_i і P_f початкового і кінцевого станів випромінює атомної системи повинні задовольняти умові $P_i P_f = P_\phi$, де P_ϕ - парність излученного фотона.

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

$$P_i P_f = P_\phi, \quad (1.46)$$

Природно, для фотона електричного типу $P_\phi = (-1)^j$, звідси випливає правило відбору по парності для електричного мультипольного випромінювання:

$$P_i P_f = (-1)^j. \quad (1.46a)$$

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

1.2.4 Магнітне мультипольне випромінювання

Розглянемо тепер відомі елементи теорії магнітного мультипольного випромінювання, оскільки побудова послідовної теорії заборонених магнітних дипольних переходів відноситься до однієї з найважливіших завдань роботи. Хвильова функція фотона магнітного типу $A^\mu = (0, \mathbf{A})$, де

потенціал A дається стандартною формулою [101,102]. Підстановка хвильової функції фотона магнітного типу в вираз (1.20) дозволяє отримати наступне відомий вислів для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = -e \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3x \cdot j_{fi}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{o}_n \cdot e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} Y_{jm}^{(m)*}(\mathbf{n}), \quad (1.47)$$

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

$$V_{fi} = -ei^{-j} \frac{2\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} \int j_{fi}(\mathbf{r}) r^j Y_{jm}^{(m)*} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) d^3x, \quad (1.47a)$$

де

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

Зазвичай остаточно матричний елемент зручно представити у вигляді:

$$(1.47b)$$

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

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

$$(Q_{jm}^{(m)})_{fi} = \frac{1}{j+1} \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int [r j_{fi}] \nabla (r^j Y_{jm}) d^3x, \quad (1.47b)$$

Неважко зрозуміти, що формули для випускання фотона магнітного типу відрізняються від аналогічних формул випускання фотона електричного типу заміною електричних моментів магнітними. Це стосується також і відповідних виразів для кутового розподілу. напр., Класична формула для повної ймовірності M_1 -випромінювання записується в певний вид:

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mu_{fi}|^2, \quad (1.48)$$

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

$$j_{fi} = -\frac{i}{2m} (\psi_f^* \nabla \psi_i - \psi_i \nabla \psi_f^*) + \frac{\mu}{es} \text{rot}(\psi_f^* \hat{s} \psi_i), \quad (1.49)$$

де μ - магнітний момент, s - спін.

Вираз для μ_{fi} має звичайний вигляд:

$$\mu_{fi} = \int \psi_f^* \left(\frac{e}{2m} \hat{L} + \frac{\mu}{s} \hat{s} \right) \psi_i d^3x, \quad (1.50)$$

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

$$\hat{\mu} = \frac{e}{2m} \hat{L} + \frac{\mu}{s} \hat{s}, \quad (1.51)$$

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

Зокрема, для парності справедливо правило

$$P_i P_f = (-1)^{j+1}. \quad (1.52)$$

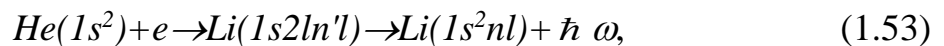
1.3 Елементи теорії спектрів автоіонізаційних станів та діелектронних сателітів для легких іонів в плазмі

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

Розглянемо коротко, дотримуючись [291], основні характеристики

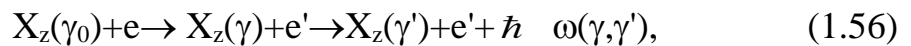
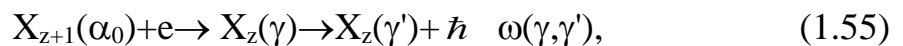
розпаду автоіонізаційних станів (з утворенням в тому числі, ді електронних сателітів) на прикладі шуканих іонів. Сателіти резонансних ліній Н і Не-подібних іонів обумовлені переходами з двічі порушених рівнів відповідно He- і Li- подібних іонів, тобто сателітами резонансних ліній $2p_{1/2} - 1s_{1/2}$, $2p_{3/2} - 1s_{1/2}$ є все ліній типу $2lnl'LSJ - 1snl''L'S'J'$, а сателітами резонансних ліній $1s2p^{1,3}P_1 - 1s^2\ ^1S_0$ – лінії типу $1s2lnl'LSJ - 1s^2nl''L'S'J'$ при всіх можливих значеннях індексів l, L, S, J . К резонансним лініям He- подібних іонів відносяться також лінії типу $1s2s^{n_1}2p^{n_2} - 1s^22s^{n_1}2p^{n_2-1}$.

Цікавими є також сателіти $1s2lnl'LSJ - 1s^22lL'S'J'$ до ліній $1snp^{1,3}P_1 - 1s^2\ ^1S_0$. Зазначені сателіти, як правило, прийнято називати ді електронних сателітами (ДС), хоча, очевидно що механізм ді електронних рекомбінації є не єдиним для освіти даних автоіонізаційних станів. Зокрема, конкуруючим з ним є також механізм збудження електронним ударом. Як приклад розумно вказати наступні процеси [291],:



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

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



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

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

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

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

$$Q_d(\gamma, \gamma') = \frac{g_\gamma A(\gamma, \gamma') \Gamma(\gamma)}{A(\gamma) + \Gamma(\gamma)}, \quad (1.57)$$

$$K(\gamma, \gamma') = \frac{A(\gamma, \gamma')}{A(\gamma) + \Gamma(\gamma)}, \quad (1.58)$$

де

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

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

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

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

$$\begin{aligned} E(a_1 L_1 S_1 J_1, a_2 L_2 S_2 J_1) = & \delta(L_1, L_2, S_2) [\delta(a_1, a_2) E_0 Z^2 + \Delta E_1(a_1 L_1 S_1, a_2 L_1 S_1) Z + \\ & + \Delta E_2(a_1 L_1 S_1, a_2 L_1 S_1) + (\alpha^2/4) \delta(a_1, a_2) E_0^r Z^4 + (\alpha^2/4) \Delta E_1^r(a_1 L_1 S_1, a_2 L_1 S_1) Z^3] + \\ & + (\alpha^2/4) \{Z - A(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_2)\}^3 [Z - B(a_1 L_1 S_1, a_1 L_2 S_2) E^{(0)} Q_1 + \\ & + \varepsilon \delta_Q(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_2) Q^1 + \varepsilon_s \delta(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_2) Q_2], \end{aligned} \quad (1.59)$$

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

$$\begin{aligned}
A(aLSJ, a' L S' J') &= \frac{2}{2J+1} [E^J(aLS) - E^{J'}(a' L' S')]^3 \times \\
&\times \left| \sum_{a_1 L_1 S_1} \sum_{a'_1 L'_1 S'_1} B_3 C^J(aLS, a_1 L_1 S_1) C^{J'}(a'_1 L'_1 S'_1, a' L' S') \times \right. \\
&\times \left. \frac{1}{Z} \varepsilon(a_1 L_1 S_1, a'_1 L'_1 S'_1) \left[1 + \frac{1}{Z} \tau(a_1 L_1 S_1, a'_1 L'_1 S'_1) \right]^2 \right|, \tag{1.60}
\end{aligned}$$

де ε , τ - чисельні коефіцієнти.

Імовірність безрадіаційного розпаду:

$$\begin{aligned}
\Gamma(aLSJ) &\sum_{a_1 L_1 S_1} \sum_{a_2 L_2 S_2} C^J(aLS, a_1 L_1 S_1) \Gamma(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_2) \times \\
&\times C^J(a_2 L_2 S_2, aLS), \tag{1.61}
\end{aligned}$$

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

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

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

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

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

$$i_d(\gamma-\gamma')=I_S(\gamma-\gamma')/I_R(\alpha-\alpha_0), \quad (1.62)$$

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

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

$$i_d(\gamma-\gamma')=C_d\varphi_d(T)Q_d(\gamma-\gamma'), \quad (1.63)$$

де

$$C_d = 10^8 \frac{4p^{3/2}a_0^3}{g_0B} \left(\frac{E(\delta_0)}{E(\delta)} \right)^{3/2} \frac{E(\delta\delta_0)}{E(z)}; c_d(T) = \delta ve^{\delta\delta} \frac{\delta+u}{\delta+1}, \quad (1.64)$$

$$\beta = \frac{E(\alpha\alpha_0)}{T}; \delta\beta = \frac{E(z)}{T} = \frac{E(\alpha\alpha_0) - E(\gamma\alpha_0)}{T}; z = Z = N + 1, \quad (1.65)$$

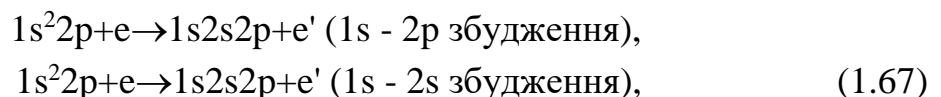
Індекси α , α_0 тут ставляться до резонансної лінії, а індекси γ - до оскільки розглядаємо сателіту. Зокрема, для сателітів до резонансних ліній Н- і Не- подібних іонів $E(\alpha)$ і $E(\alpha_0)$ можна записати:

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

$$E(\alpha)=E(1s2p, {}^1P)-E(1s); E(\alpha_0)=E(1s^2)-E(1s), \quad (1.66)$$

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

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



Стани $1s2p^2$, $1s2s^2$:

$$1s^22s+e \rightarrow \begin{cases} 1s2s^2 + e' \\ 1s2p^2(J=1/2) + e' \end{cases} \quad (1s - 2s \text{ збудження}),$$

$$1s^22p+e \rightarrow \begin{cases} 1s2p^2 + e' \\ 1s2s^2(J=1/2) + e' \end{cases} \quad (1s - 2p \text{ збудження}),$$

(1.68)

Природно, що в разі високої щільності необхідним є підсумовування по всіх каналах збудження з станів $1s^22s$ и $1s^22p^2P_{1/2,3/2}$. Це відноситься і до інших станів, за винятком $1s^22p^2P_{3/2}$, $^2D_{5/2}$, $^2D_{3/2}$.

Стани $1s^22p^2P_{1/2}$, $^2S_{1/2}$ можуть бути збуджені як з $1s^22p^2P_{1/2}$, так й з $1s^22s$ станів $2s2p[^3P]1s^2P_{1/2,3/2}$ - з $1s^22p$, $1s^22s$ (1.25).

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

На наш погляд, є, по крайній мере, три найважливіші причини, істотно ускладнюють моделювання спектрів випромінювання в плазмі:

1) непослідовність атомних розрахунків, що призводить в ряді випадків до великих помилок в значеннях швидкостей елементарних процесів, зокрема, розпаду АС;

2) невизначеність реальних функцій розподілу електронів за швидкостями і їх тимчасових характеристик для нестационарних джерел плазми;

3) в кінетиці заселеності рівнів і в розрахунках констант атомних розпадів необхідно, в принципі, врахувати нескінченне число станів, що включають численні АС і стану континууму. Розглянемо докладнішу відповідні переваги та недоліки сучасних методів спектроскопії за рахунок зіткнень атомів та багатозарядних іонів.

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

Характерно, що практично всі сучасні моделі спектрів випромінювання

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

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

Остання проблема повинна трактуватися з двох сторін:

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

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

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

$$\xi = \frac{v_0}{v} = \frac{\hbar}{m_e a v} = \frac{Z_a e^2}{\hbar v}, \quad (1.69)$$

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

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

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

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

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

Напівкласичний підхід зводиться до так званого методу прицільного параметра.

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

Класична траєкторія відносного руху однозначно визначається швидкістю, прицільним параметром \vec{b} і видом потенціалу міжатомної взаємодії $U(\vec{r})$. Наприклад, при кулоновському потенціалі відштовхування між ядрами, які мають заряди Z_1e та Z_2e , між'ядерна відстань $R(t)$ і час пов'язані між собою параметрично таким чином (наближення Айзенберга-Грайнера):

$$U(\vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (1.70)$$

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

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

де відзначено, що

$$a = \frac{z_1 z_2 e^2}{\mu v^2}, e = \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2}, \quad (1.71)$$

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

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

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

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

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

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

Доречно зазначити далі, що сучасна квантова механіка атомів (а також

молекул) за останні кілька десятиріч набула значного розвитку.

Виходячи з [3, 79-110], можна нагадати про таких відомих, поряд зі згаданими вище, методах як метод ТЗ Релея-Шредінгера, Меллера-Плессета, ТЗ по $1/Z$ (Z - заряд ядра атома) і між електронної взаємодії, ТЗ з модельним потенціалом «0» наближення, ХФ або ДФ з «0» наближенням, в нерелятивістському і релятивістському наближенні випадкових фаз, метод одно- та багатоканального квантового дефекту і багато інших. Однак, ці відомі методики в багатьох випадках виявилися просто не коректними для вирішення класів задач як чисто спектроскопічних, так і радіаційних зіткнень. У зв'язку з цим в останні роки запропоновані нові вдосконалені версії досить прийнятних з теоретичної точки зору методів.

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

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

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

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

Запропановані також вдосконалені моделі в теоріях типу coupled-channel VCDW (Variational Continuum Distorted Wave), наприклад,

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

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

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

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

Однак в цілому ряді груп завдань атомної і молекулярної фізики, а також мезофізики ці методи були з успіхом розвинені і застосовані, набувши при цьому широкого визнання. Йдеться про нові підходи до опису

характеристик кооперативних електрон альфа-бета-гамма-мюон-ядерних процесів в атомах і молекулах, теорії альфа і бета розпаду з урахуванням ефекту хімічного оточення атома, теорії чисто електронних і електрон-ядерних процесів в атомах і мезо-атомних системах, в завданні генерації електрон-позитронних пар за рахунок механізму зіткнень [3-5, 177-179].

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

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

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

Йдеться про розрахунки констант різних елементарних процесів зіткнень в плазмовому середовищі, зовнішніх електричного, магнітного, лазерного полів (див. огляди в [4]). Корисний детальний огляд методів урахування впливу зовнішнього ЕМП, а також плазмового середовища представлений у відомих монографіях і оглядах (див., зокрема, [3, 4, 106-110, 165, 166, 182-188]).

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

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

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

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

Однак через неповний облік складних обмінно-кореляційних ефектів, тиску континууму і т.д., матричні елементи різних фізичних операторів, як правило, у другому і вищих порядках ТЗ, фактично залежать від калібрування фотонного пропагатора. На практиці це призводить до того, що перерізи або сили осциляторів, розраховані при різних калібруваннях

фотонного пропатора, можуть відрізнятись до 50% за величиною. У відомих монографіях [1-3] ці питання з різних точок зору розглянуті дуже детально. Виходячи з [3], дамо коротке зведення основних знакових робіт в цьому напрямку.

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

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

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

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

З метою розширення класу функцій для опису електронної густини в

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

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

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

В нашому методі штурмовські розкладання використовуються в регулярних розрахунках з явним урахуванням багато електронних ефектів. Ще один важливий елемент новизни пов'язаний з узагальненням нового релятивістського енергетичного підходу на випадок розгляду електрон-іонних систем в зовнішньому інтенсивному полі електромагнітного

випромінювання, яке має цілий ряд переваг в порівнянні з розвиненими в останні роки моделями і теоріями (див. огляд, напр., [4, 165, 166]).

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

1.5 Висновок до розділу 1

Основні висновки оглядового розділу зводяться до наступного:

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

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

3) Уявляється актуальною розробка нової версії релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання, що базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу, для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень в присутності зовнішнього

електромагнітного поля, і очевидно, подальше дослідження багатофотонних диференціальних перерізів ($e, 2e$) реакції для певного нейтрального атома при певних параметрах електрон-атомного зіткнення та відповідного зовнішнього поля.

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

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [1-9, 14, 18, 19, 21-24, 26-34, 36, 37].

РОЗДІЛ II

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

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

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

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

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

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

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

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

де γ - адіабатичний параметр,

g – константа зв'язку,

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

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

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

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

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

Зрушення повної енергії стану зазвичай подається у вигляді:

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

$$\text{Im} \Delta E = -\Gamma/2, \quad (2.2б)$$

де ймовірність розпаду фактично співпадає із повною (сумою радіаційної та

автоіонізаційної) шириною:

$$P = \Gamma, \quad (2.2в)$$

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

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

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

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

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

атомних систем за рахунок зіткнень матиме принципові переваги в порівнянні з традиційними методами розрахунку характеристик процесів електрон-іонних зіткнень для БІ з урахуванням впливу плазмового середовища.

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

2.2.1 Метод урахування ефектів плазмового середовища.

Гамільтоніан нульового наближення у дебаєвському наближенні

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

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

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

До шуканих областей примикають області слабкої неідеальності, в яких методами ТЗ можна знайти поправки на слабкі міжчастинкові взаємодії. Природно, в значній частині фазової діаграми плазма є недосконалою і послідовний теоретичний опис можливий, якщо здійснене перенормування взаємодії, як наприклад, в разі утворення пов'язаних електрон-іонних пар, тобто атомів в низькотемпературній плазмі. Модель класичної однокомпонентної плазми є плазмою точкових зарядів із зарядом Ze (e - заряд електрона), поміщених в рівномірно розподілене середовище електронів [182, 183].

Стан плазми характеризується так званим параметром неідеальності:

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

тут k_B – константа Больцмана,
 T - температура,
 a – середня відстань між частинками:

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

де N – концентрація.

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

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

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

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

Якщо далі ввести дебаєвський радіус екранування:

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

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

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

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

$$1 / N_e r_D^3 \ll 1, \quad (2.6в)$$

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

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

Зручно для оцінок використовувати наведену формулу:

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

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

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

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

або

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

де v та E – швидкість і енергія частинки.

Тут температура T дається в енергетичних одиницях. Природно, в реальному плазмі розподіл часток за швидкостями може в тій чи іншій мірі відрізнятись від чисто максвеллівський [53,82]. Зокрема, наявність навіть слабого постійного електричного поля призводить до спотворення функції $F(v)$ електронів в області високих енергій і виникає потік так званих тікають нетеплових електронів.

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

порушенням або іонізацією, число швидких електронів виявляється менше максвеллівський.

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

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

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

де σ - переріз процесу зіткнення,

ΔE – порогова енергія процесу;

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

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

де

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

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

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

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

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

k_b – стала Больцмана.

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

$$\langle v\sigma^{(i)} \rangle, \quad (2.9\Gamma)$$

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

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

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

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

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

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

Як потенціал $V(r_{ij})$ в подальшому ми будемо використовувати релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії, який включає релятивістський ефект запізнювання (шляхом введення відповідної експоненти) і магнітну (Брейтовську) взаємодію [3]:

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

де α_i – матриці Дірака.

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{\text{int}} = \sum_{ij} a_i^{+} a_j V_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^{+} a_j^{+} a_k a_l, \quad (2.13б)$$

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

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

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

E_i – одноелектронні енергії;

$V_c(r_i)$ – центральний потенціал, який імітує ефективний потенціал основних електронів (скажімо, у фторо-, неоно- або аргоно-подібному іоні).

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

Гамільтоніан нульового наближення має вигляд:

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

де потенціал $V_c(r_i)$ описує взаємодію «остов-квазічастинка». В якості потенціалу самоузгодженого поля можна використовувати або стандартні потенціали типу ДФ, релятивістського Хартрі-Фока (РХФ), або ткорії функціоналцу густинри, зокрема, Дірака-Кона-Шема, а бо на кінець один із варіантів методів модельного потенціалу, або псевдопотенціалу.

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

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

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

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

Слід зауважити, що потенціал (2.18) з успіхом застосовувався в

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

де c – швидкість світла,

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

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

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

Оператор збурення в даній релятивістській багаточастинковій ТЗ має звичайний вигляд:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Тут, як завжди,

k — число квазічастинок;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Енергія довільного порушення двохквазічастинкового стану подана у вигляді ряду ТЗ:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

де F та G – велика і мала компоненти;

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

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

Відповідно, як звичайно, граничні умови правильних розв'язків визначаються першими членами розкладання функцій у ряд [4,5]. Відповідно стандартна умова $f, g \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ визначає квантовані 1-QP енергії. З чисельної точки зору система рівнянь (2.26) розв'язується методом

Рунге-Кутта 4 порядку (в відповідному блоці комплексу “Superatom-ISAN” [3-7,192-195]).

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

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

а нормувальний множник:

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

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

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

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

РЗвичайно у цьому місці також нагадують, що, як було показано ще Толмачовим, а також незалежно Kelly (див., напр., [3]), в першому порядку ТЗ немає діаграм, що містять компенсаційний член - $V_C(r)$ повного збурення V_{int} і потрібно розрахувати тільки матричні елементи оператора ТЗ.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

елементів у перерізах збудження за рахунок зіткнення.

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

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

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

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

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

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

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

Решта членів у виразі (2.29) включають також інтеграли з малими діраковськими компонентами. Як завжди, знак «~» позначає, що в (2.29) велику радіальну компоненту f_i потрібно замінити на малу g_i , а у (2.30б) l_i замінити на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\alpha_1 > 0$ та $l_i + 1$ для $\alpha_i < 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$Q_\lambda^{Br} = \left\{ R_\lambda(12\tilde{4}\tilde{3}) S'_\lambda(12\tilde{4}\tilde{3}) + R_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}43) S'_\lambda(1243) + \right. \\ \left. + R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) S'_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S'_\lambda(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \right\}, \quad (2.33)$$

відповідно з радіальними інтегралами та кутовими частинами (1243). Докладніше елементи використовуємої нами відомої методики описані в роботах Іванова-Іванової-Глушкова [21,27,2,3,12,84-86,291], де до речі надані й огляди багаточисленних робіт де вони використані.

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

2.3.1 Основні обмінно-кореляційні ефекти

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

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

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

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

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

а) перший пов'язаний з розширенням секулярної матриці М шляхом введення нових збуджених станів; в цьому випадку елементи секулярної матриці розраховуються в першому порядку ТЗ; у задачах, пов'язаних із зіткненнями, такий підхід може призвести до суттєвих обчислювальних труднощів, очевидно, складно подоланим, як це продемонстрували навіть роботи недавніх років з розрахунку перерізів електрон-іонних зіткнень в

рамках таких методів як метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBТ), а також наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багато-конфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (див. [1-3, 20, 23, 24, 106-110, 165, 166]).

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

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

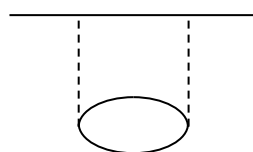
а) стан з порушеним остовом; їх накладення враховує поляризаційна взаємодія квазічастинок між собою; при цьому фактично зовнішні квазічастинки залишаються замороженими (шукана поправка відповідає урахуванню внеску послідовності так званих поляризаційних діаграм).

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

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

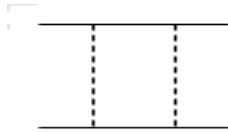
У даній теорії ми використовували техніку Іванова-Іванової-Глушкова, детально викладену в роботах [3, 12, 80, 84-88].

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



та аналогічних відповідає ефектам поляризаційної взаємодії квазічастинок.

Відповідно послідовність так званих сходових діаграм типу



відповідає ефектам екранування зовнішніх квазічастинок.

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

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

$$\Delta E_{corr} = \Delta E_{scr} + \Delta E_{pol} + \Delta E_{interf}, \quad (2.35)$$

У вищих порядках ТЗ до доданків в (2.35) догадуються внески діаграм ΔE_{interf} , що описують інтерференцію поляризаційного і екранувального ефектів.

Ефективний спосіб урахування ефекту поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок через поляризованість остова замкнутих електронних оболонок без істотного збільшення розмірів секулярної матриці М запропонований в [12] і полягає в додаванні до оператора кулонівської міжквазічастинкової взаємодії поляризаційного оператора, матричні елементи якого відповідають урахування внеску від прямої і зворотної поляризаційних діаграм 2.2a та 2.2d (рис. 2.2):

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

де ρ_1, ρ_2 – густини розподілу для зовнішніх квазічастинок.

Поляризаційний оператор тут визначається виразами з електронною щільністю $\rho_c^{(0)}$ остова під час відсутності зовнішніх квазічастинок

(електронів або вакансій), яка визначається в рамках калібрувально-інваріантної КЕД процедури генерації нульового наближення ТЗ.

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

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

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

з релятивістським фактором:

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

де X – числовий коефіцієнт.

Відзначимо, що кутові частини матричних елементів: $V_{pol}^d, V_{pol}^{ex}, (1 - \alpha_i \alpha_j)/r_{ij}$ збігаються, тому облік поправки $\Delta E_{pol}^{(2)}$ фактично зводиться лише до модифікації радіальних інтегралів, що входять у вираз для поправки першого порядку ТЗ $\Delta E^{(1)}$ по міжквaziчастинковій взаємодії.

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

$$V_{pol}^{ex}(r_1, r_2) = -\frac{X}{2} (0,375)^{1/3} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\left[\left(\rho_c^{(0)}(r_1) \right)^{1/3} \theta(r_1) + \left(\rho_c^{(0)}(r_2) \right)^{1/3} \theta(r_2) \right]}{|r_1 - r_2|} - \left(\int dr \cdot \left(\rho_c^{(0)}(r) \right)^{1/3} \theta(r) \right)^{-1} \times \right. , (2.39)$$

$$\left. \times \int dr' \left(\rho_c^{(0)}(r') \right)^{-2/3} \theta^{-2}(r') \cdot \left[\frac{\left(\rho_c^{(0)}(r_1) \right)^{-1/3} \theta^{-1}(r_1)}{|r_1 - r'|} + \frac{\left(\rho_c^{(0)}(r_2) \right)^{-1/3} \theta^{-1}(r_2)}{|r' - r_2|} \right] \right\}$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
Y'_1 &= (\rho_1 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_1)/r; \\
Y'_2 &= (\rho_2 r^2 Z_\lambda^{(1)} - (\lambda + 1)Y_2)/r; \\
Y'_3 &= (\rho_c^{1/3} r^2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(1)} - (2\lambda + 1)Y_3)/r; \\
Y'_4 &= (\rho_2 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_2 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_4)/r; \\
Y'_5 &= (\rho_1 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_1 Z_\lambda^{(1)} Z_\lambda^{(2)} - (\lambda + 1)Y_5)/r;
\end{aligned} \tag{2.40б}$$

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

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

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

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

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

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \int \int \int \int \psi + (r_1)G(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) [(1 - \alpha_1 \alpha_3)/r_{13}] \Pi(\omega, r_3, r_4) [(1 - \alpha_2 \alpha_4)/r_{24}] \psi(r_2) dr_1, dr_2, dr_3, dr_4, \tag{2.41}$$

де Π — поляризаційний оператор, який визначається формулою:

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

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

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

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

та аналогічним чином для обмінної діаграми.

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

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

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

де $r_>$ – більше за r та r' .

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3.2 Метод штурмовських розкладів для урахування станів континууму

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

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

Серед прикладів ефективного використання методу штурмовських розкладів в різних завданнях атомної і молекулярної фізики слід вказати

роботи Іванова і співр., Груздева і співр., Dalgarno et al, Buchachenkoetal, Глушкова і співр. і т.д. (див., напр., [3, 12, 27, 45-47, 80, 132, 156, 231-235, 291, 214]).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

У штурмовській постановці завдання шукаються власні значення

і власні функції рівняння:

$$[h_D(x) - \varepsilon]\phi_\nu = \tau_\nu \zeta(x)\phi_\nu, \quad (2.47)$$

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

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

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

$$G^{(+)}(x, x'; \varepsilon) = \sum_\nu \frac{\tilde{\varphi}_\nu(x)\tilde{\varphi}_\nu^*(x')}{\tau_\nu(\varepsilon) - 1}, \quad (2.48)$$

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

$$\tilde{\varphi}_\nu(x) = \varphi_\nu(x) - \sum_{k=1}^N \psi_{n_k}(x) \langle \psi_{n_k} | \varphi_\nu \rangle, \quad (2.49)$$

У разі одночастинкового збуреного оператора, скажімо,

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

поправка другого порядку до енергії атома визначається стандартним виразом вигляду:

$$\begin{aligned} \delta E^{(2)} &= - \sum_{k=1}^N \langle u_{n_k} | w G^{(+)}(\varepsilon_{n_k}) w | u_{n_k} \rangle = \\ &= - \sum_{k=1}^N \sum_\nu | \langle \tilde{\varphi}_\nu | w | u_{n_k} \rangle |^2 / [\tau_\nu(\varepsilon_{n_k}) - 1], \end{aligned} \quad (2.50)$$

і фактично містить тільки підсумовування по зайнятих станах (кістяка) і

віртуальних діраковських орбіталах штурмовського типу, що належать до суто дискретного спектра.

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

У практичній реалізації метод штурмовських розкладів на прикладі конкретного неону-подібного іона виглядає таким чином.

На першому етапі розв'язується система релятивістських рівнянь Дірака (2.23) щодо діраковських радіальних функцій і діагональних параметрів Лагранжа $\varepsilon^{4s}, \varepsilon^{3p}, \varepsilon \varepsilon^{3s}$ і т.д.

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

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

де, як і вище:

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

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

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

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

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

У кожному разі функції явно врахованих реальних станів представляють редуковане спектральне розкладання для функції Гріна G . Залишкова частина при цьому зменшується як $\exp[-r(-2\varepsilon)^{1/2}]$ при $r \rightarrow \infty$, (ε -власна енергія останнього явно врахованого реального стану).

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

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

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

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

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

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

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

В цьому підрозділі ми викладемо калібрувально-інваріантний метод генерації оптимізованого нульового наближення КЕД ТЗ, узагальнюючий оригінальне формулювання [10], для використання в розрахунках відповідних матричних елементів перерізів збудження і сил електрон-іонних зіткнень за участю електронів і Бі в плазмі. Слід зазначити, що питання побудови одноквазічастинкового уявлення в теорії атомних систем досить докладно розглядалось у літературі й було досить послідовно охарактеризовано о у багатьох робітах (див., напр., [21,27,2,3,12,84-86,291])

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

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

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

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

У нульовому порядку ТЗ КЕД визначається одноелектронний затравочний потенціал $V_N(r) + V_C(r)$.

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

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

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

поляризаційні ефекти остова (поляризацію ядра із заповненою оболонкою квазічастинками).

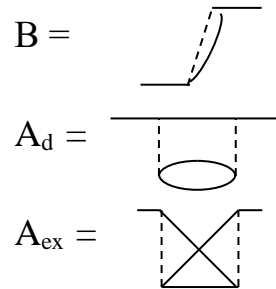


Рис. 2.1 Діаграми першого та другого порядку теорії збурень, які дають ненульовий внесок для уявної частини зрушення

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

Як завжди, оператор збурення в КЕД ТЗ:

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

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

Діаграма B є єдиною діаграмою другого порядку ТЗ, яка дає внесок в уявну частину енергетичного зсуву (або радіаційну ширину атомного рівня) $\text{Im}E$. У четвертому порядку КЕД ТЗ шуканими діаграмами є діаграми A_d (пряма поляризаційна діаграма; (рис. 2.3)) і A_{ex} (обмінна поляризаційна діаграма; (рис. 2.3)), які описують ефект поляризації остова замкнених електронних оболонок. Далі з використанням стандартної техніки обчислюються внески у величину $\text{Im}E$, відповідних різних діаграм (рис. 2.3). Електронний пропатор подається в стандартному вигляді. Кожній пунктирній лінії відповідає вираз: $\gamma^\mu D_{\mu\nu} \gamma^\nu$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

тут

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\int dr r^2 \rho_c(r) = 1, \quad (2.65)$$

і зводиться до ланцюжка наступних варіацій [3]:

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

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

Перша ланка ланцюжка варіацій реалізується за допомогою:

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

або

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

Останній доданок в (2.68) описує внесок обмінних ефектів у відомому наближенні Слетера. На наступному етапі розраховується поправка першого

порядку по δV_C до функцій $f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s$ - розв'язком рівняння Дірака з потенціалом $V_N + V_C \dots$, який є фактично біспінором вигляду:

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

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

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

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

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

де функції A_\pm визначаються:

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

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

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

де використані такі позначення:

$$\{L_1, M_1\} = Z_\lambda^{(1)} r^p, \{L_2, M_2\} = Z_\lambda^{(2)} r^q,$$

$$\{X, Y\} = \{f_\alpha f_s r^t; g_\alpha g_s r^t; f_\alpha g_s r^u; g_\alpha f_s r^u\}, \quad (2.73)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

таких систем.

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

$$((2j_{iv})^{-1} 3j_{ie} [J_i M_i], \epsilon_{in}) \rightarrow (\Phi_0, \epsilon_{sc}), \quad (2.74)$$

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

J_i – повний кутовий момент початкового шуканого стану;

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

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

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

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

Кінцевим станом, природно, є стан:

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

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

$|I\rangle$ відповідає триквазічастинковому стану;

$|F\rangle$ відповідає одноквазічастинковому стану.

Оскільки, на відміну від робіт [25, 26, 228, 229], ми розглядаємо процеси зіткнень з урахуванням ефектів плазмового середовища [200, 211, 221], слід звернути детальну увагу на внесок рідбергівських станів, що сходяться до відповідної нижньої межі континууму $-\epsilon_0$.

Фактично величина $-\epsilon_0$ є третім (якщо вважати електронну щільність і

температуру першими двома) параметром плазмового середовища. Фізично він визначає термалізовану енергетичну зону рідбергівських і автоіонізаційних рідбергівських станів, що сходяться до порогу іонізації кожного іона, наявного в плазмі.

Як затравочну можна використовувати оцінку ϵ_0 у вигляді:

$$\epsilon_0 = 0.1 \cdot T_e, \quad (2.77)$$

Зрозуміло, кінцеві результати не повинні залежати від параметрів моделі у послідовній теорії, тому в подальшому конкретне значення ϵ_0 вибирається таким чином, щоб ефект його варіації в межах $[0.01 \cdot T_e, 0.1 \cdot T_e]$ (для Ne-подібних іонів) не впливав на кінцеві результати. У зонах рідбергівських станів виділяються кілька підзон (див. рис. 2.4).

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

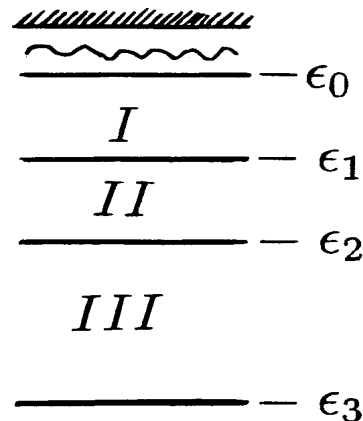


Рис.2.2 Зони рідбергівських станів (неоно-подібні іони: $[Ne, i], nl$;
 ϵ_0 - межа термалізованої зони, прилеглої до континууму; ϵ_3 - потенціал іонізації для стану $nl=3s$; $\epsilon_2 = (\epsilon_0 + \epsilon_3)/2$, $\epsilon_1 = (\epsilon_0 + \epsilon_2)/2$

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

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

з уявною частиною у вигляді:

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

Тут G — певна зведена в квадрат комбінація двоелектронних матричних елементів типу (2.28):

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

За визначенням, величина (2.81) являє переріз зіткнення електрона з іоном. Природно, при цьому передбачається, що власна функція налітаючого електрона нормується умовою одиничного потоку, а власна функція розсіяного електрона нормується δ функцією енергії.

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

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

$$\langle I | M | I' \rangle, \quad (2.81a)$$

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

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

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

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

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

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

$$|IK, \varepsilon_{in} j_{in} \rangle \rightarrow |\Phi_0, \varepsilon_{sc} j_{sc} \rangle. \quad (2.82a)$$

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

Природно, різні версії зіткнень діаграм на (рис. 2.2) фактично відповідають прямому Кулонівському (D) або обмінному (E) взаємодіям налітаючого електрона з «бра» і «кет» станами мішені, а у відповідних амплітудах електрон-іонного зіткнення всі 4 складових присутні.

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

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

Переріз електрон-іонного зіткнення визначається квадратом відповідної амплітуди як:

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

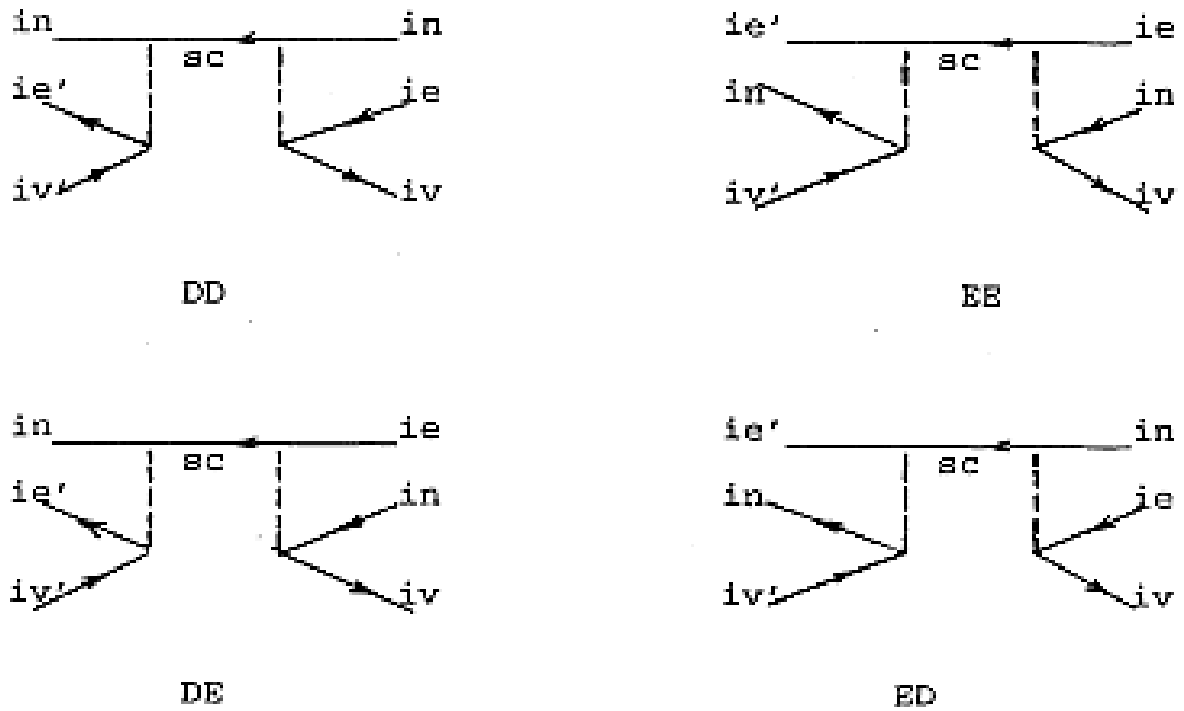


Рис. 2.3 Триквaziчастинкові діаграми, які описують електрон-іонні зіткнення, що супроводжуються переходом іона з порушеного двохквaziчастинкового стану в основний стан $|IK, \varepsilon_{in}^{j_{in}}\rangle \rightarrow |\Phi_0, \varepsilon_{sc}^{j_{sc}}\rangle$. версії діаграм: DD – “пряма-пряма”, EE – “обмінна-обмінна”, DE – “пряма-обмінна”, ED – “обмінна-пряма”

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

Амплітудна комбінація в (2.84) має такий вигляд:

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

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

відповідного плазмового гамільтоніана (2.10).

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

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

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

Відповідно, переріз електрон-іонного зіткнення визначається як:

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

з амплітудною комбінацією, аналогічною (2.85):

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

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

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

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

f_{sc} , g_{sc} розсіяного електрона.

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

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

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

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

До числа найважливіших елементарних процесів, які дають внесок в динаміку і кінетику заселення різних збуджених станів в плазмі БІ відносяться також і діелектронні захоплення і автоіонізаційні розпади рідбергівських станів. Діелектронні захоплення, насправді, можуть знизити енергетичний поріг збудження, наприклад неон-подібного іона, і таким чином, привести до збільшення швидкості зіткнень збудження при заданому розподілі по енергії електронів в плазмі. Внесок цього ефекту буде залежати від співвідношення між різними каналами іонізації іона в плазмі, що включає з одного боку, за рахунок зіткнень іонізацію, оже-розпад в порушенні стану іона і фотоіонізацію, а з іншого – оже-розпад в основний стан іона.

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

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

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

Слід також врахувати, що:

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

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

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

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

де

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

де $N_{j;k}$ – число електронів у рідбергівській зоні станом остова j ;

$dN_j(\varepsilon)/d\varepsilon$ – розподіл по енергії рідбергівських електронів, зазвичай апроксимується аналітичним виразом вигляду:

$$N_i(\varepsilon) = [d_{i,1}\eta + d_{i,2}\eta^3 + d_{i,3}\eta^5]^2, \eta = (\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2}, \quad (2.94a)$$

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

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

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

де σ - переріз зіткнень процесу;

$\Delta\varepsilon$ – порогова енергія процесу;

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

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

де

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

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

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

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

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

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

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

На закінчення розділу узагальнимо вище викладений КЕД ЕП і відповідно теорію обчислення перерізів електрон-іонних зіткнень на випадок урахування впливу на систему (іони в плазмі) зовнішніх електромагнітних (поля лазерного випромінювання) полів. У цьому сенсі доречно згадати

побудовану в серії робіт [9, 10, 80, 51, 52] (див. також [13, 202]) на основі КЕД ТЗ і S-матричного формалізму Гелл-Мана і Лоу послідовну КЕД теорію деформації радіаційних спектральних ліній в спектрах релятивістських атомних систем в полі лазерного випромінювання.

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

$$\Gamma(n_1^0 j_1^0, n_2^0 j_2^0; J) = \frac{2\pi\varepsilon}{K_0} \sum_{\beta_1 \beta_2} \sum_{\beta'_1 \beta'_2} C^J(\beta_1 \beta_2) C^J(\beta'_1 \beta'_2) \sum_{\beta \beta_K} V_{\beta_1 \beta_2; \beta \beta_K} V_{\beta_K \beta; \beta'_1 \beta'_2}, \quad (2.98)$$

де матричні елементи мають вигляд в рамках нашої теорії:

$$V_{\beta_1 \beta_2; \beta_4 \beta_3} = \iint dr_1 dr_2 \Psi^{DKS}_{\beta_1}(r_1) \Psi^{DKS}_{\beta_2}(r_2) \frac{\cos|\omega|r_{12}(1-\alpha_1\alpha_2)}{r_{12}} \Psi^{DKS}_{\beta_4}(r_2) \Psi^{DKS}_{\beta_3}(r_1), \quad (2.99)$$

$$C^J(\beta_1 \beta_2) = C^J(n_1 j_1 n_1^0 j_1^0; n_2 j_2 n_2^0 j_2^0) A(j_1 m_1; j_2 m_2; JM), \quad (2.99a)$$

$$A(j_1 m_1, j_2 m_2 JM) = (-1)^{j_1 - j_2 + M} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \sqrt{2J+1}, \quad (2.99b)$$

$$C^J(n_1 j_1 n_1^0 j_1^0; n_2 j_2 n_2^0 j_2^0) = N(n_1^0 j_1^0, n_2^0 j_2^0) [\delta(n_1^0 j_1^0 n_1 j_1) \delta(n_2^0 j_2^0 n_2 j_2) + (-1)^{j_1 + j_2 + J + 1} \delta(n_1^0 j_1^0 n_2 j_2) \delta(n_2^0 j_2^0 n_1 j_1)], \quad (2.99b)$$

$$N(n_1^0 j_1^0; n_2^0 j_2^0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} & n_1^0 j_1^0 = n_2^0 j_2^0 \\ 1 & n_1^0 j_1^0 \neq n_2^0 j_2^0 \end{cases}, \quad (2.99g)$$

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

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

2.6 Висновок до розділу 2

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

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

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

3. Вперше адаптовані нові в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів,

включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризованість остову і ефекти взаємного екранування або антїекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ, які базуються на використанні ефективних коректних обмінно-корреляційних функціоналів густини;

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

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

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

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [1-12, 15-17, 20-25, 31-37].

РОЗДІЛ III

РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ, ПЕРЕРІЗІВ ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ І СИЛ ЕЛЕКТРОН- ІОННИХ ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ ІЗОЕЛЕКТРОННИХ ПОСЛІДОВНОСТЕЙ BeI, FI

3.1 Вступні зауваження

У цьому розділі наведені результати розрахунку на основі нової версії релятивістського енергетичного підходу в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень електрон-іонних систем енергій рівнів, сил осциляторів радіаційних переходів в спектрах багатозарядних іонів, перерізів збудження за рахунок електронного зіткнення, сил електро-іонних зіткнень, а також швидкісних коефіцієнтів для сил електронних зіткнень для цілого ряду Be-, F- -подібних багатозарядних іонів.

Шукані об'єкти дослідження, по-перше, відносяться до класу складних релятивістських багатоелектронних атомних систем, у зв'язку з чим апробація теорії вкрай важлива і показова саме для таких систем.

Крім того, досліджувані системи є досить ефективними тестовими системами для апробації нового релятивістського енергетичного підходу в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень електрон-іонних систем, а також електрон-молекулярних.

По-друге, шукані багатозарядні іони являють величезний інтерес для цілого ряду додатків в області лазерної фізики і квантової електроніки, зокрема, використання плазми відповідних іонів як активного середовища для лазерів короткохвильового діапазону, далі в області діагностики астрофізичної, лабораторної плазми і плазми термоядерного реактора, токамака і пристроїв ЕВІТ, так і для, лазерної плазми (див., напр. [1-39, 67-69, 103-113, 182, 184-187]).

Слід зазначити відразу, що саме ці обставини, з фактором наявності хоча б для деяких іонів надійних експериментальних даних для адекватного тестування теорії, зумовлювали вибір відповідних конкретно досліджуваних іонів в ізоелектронних послідовностях берилію, неону, аргону, а також набір плазмових параметрів (щільність частинок, температурний інтервал).

Хоча для деяких переходів вивчаємих багатозарядних іонів можна впритул підійти до можливості прецизійного прогнозу найкращих кандидатів

на короткохвильову лазерну генерацію, однак, кінетична частина детально нами не розглядалася.

Далі, на наш погляд, має сенс прокоментувати наявні в літературі експериментальні дані. Природно, до недавнього часу в основному представлені були експериментальні результати, що відносяться до найпростіших H і H_i-подібних багатозарядних іонів (див., напр., [3, 182-186]) з із зрозумілих причин.

Але в останні роки у зв'язку із розвитком нових теоретичних підходів, а саме головне, значним зростанням потреб різноманітних додатків у тому числі у атомній та молекулярній фізиці, фізиці лазерів та квантовій електроніці, значна увага приділяється й другим серіям багатозарядних іонів, зокрема, ізоелектронних послідовностей BeI, FI (див., напр., [3, 182-186, 231-237, 291]).

У той же час для значно складніших в теоретичному відношенні багатоелектронних систем, наявні в літературі дані особливо по низько-енергетичним зіткненням за участю не тільки нейтральних атомів, а й багатозарядних іонів, як і раніше залишаються вкрай мізерними і точковими (в сенсі лише для певних енергій зіткнень і невеликого числа систем) і, як підкреслюється безпосередньо авторами-постачальниками шуканих даних, вони багато в чому недостатньо повні.

Зрозуміло, постановка відповідних експериментів і самі установки пов'язані з досить великою кількістю різних труднощів.

У зв'язку з цим при виборі експериментальних результатів для тестування адекватності та послідовності нашої теорії ми використовували, як правило, найбільш точні дані, обумовлюючи особливо ті ситуації, коли теоретичні результати виявлялися більш точними, ніж відповідні рекомендовані експериментальні дані.

Авжеж, метою такого підходу була максимально критична апробація нового методу, щоб далі активно використовувати метод в задачах розрахунку електрон-іонних систем, для котрих експериментальних даних або немає, або вони дуже неточні.

3.2. Енергії рівнів, сили осциляторів і сили електронних зіткнень для збудження переходів $2s^2-2s2p$ в спектрах Ве-подібних іонів

3.2.1. Результати обчислення енергії рівнів та сил осциляторів і переходів $2s^2-2s^2p$ в спектрах Ве-подібних іонів

У цьому підрозділі представлені дані по енергіях переходів, силах осциляторів і силах зіткнень для переходів $2s^2-2s_{1/2}2p_{1/2,3/2}$ в спектрах Ве-подібних іонів із зарядом ядра $Z=26-36$ і відповідних плазмових параметрах густині $n_e=10^{22}-10^{24}\text{cm}^{-3}$, температурі $T=0.5-2$ кеВ (відповідно: плазмовий параметр $\mu\sim 0.01-0.3$).

У таблиці 3.1 наведені розраховані нами енергії $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів у вільному стані, а також для порівняння аналогічні дані, отримані в аналогічних розрахунках у загально відомому багатоконфігураційному наближенні Дірака-Фока ДФ (Li et al, Saha-Frische) і рекомендовані NIST дані [22, 182, 199]. Значення енергій переходів, отримані нами, краще узгодяться з рекомендованими NIST даними, за винятком іона Se XXXI. Відповідні значення енергії фактично отримані шляхом компіляції, і як показує наш аналіз, містять дуже велику похибку. Для $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ переходу роль кореляційних ефектів буде вищою, ніж для $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$.

Таблиця 3.1 – Енергії (cm^{-1}) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів у вільному стані: результати цієї роботи, а також аналогічні дані, отримані в двох розрахунках в багатоконфігураційному наближенні ДФ (Li et al, Saha-Frische) і рекомендовані NIST дані [22, 182, 199]

Z	Іон	NIST дані (експ.)	БКДФ, Li et al	БКДФ, Saha-Frische	Наша Робота
26	Fe XXIII	379125	380141	380034	379320
28	Ni XXV	418720	419573	-	419135
30	Zn XXVII	459615	460739	-	459984
32	Ge XXIX	-	502996	-	502088
34	Se XXXI	550300	548132	-	547295
36	Kr XXXIII	588770	590644	-	589137

У таблиці 3.2 наведені розраховані нами енергії $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів у вільному стані із зарядом ядра в інтервалі 26-36, а також для порівняння аналогічні дані, отримані в аналогічних розрахунках у загально відомому багатоконфігураційному наближенні Дірака-Фока ДФ (Li et al, Saha-Frische) і рекомендовані, досить прецизійні еспериментальні дані NIST дані [22, 182, 199].

Зазначимо, що відомі прорахунки Li et al, Saha-Frische були виконані у багатоконфігураційному наближенні Дірака-Фока ДФ із досить високою точністю, рахунок вкрай широкого накладення додаткових конфігурацій при побудові відповідної багатоконфігураційної функції Дірака-Фока ДФ.

Таблиця 3.2 – Енергії (cm^{-1}) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів у вільному стані: результати цієї роботи, а також аналогічні дані, отримані в двох розрахунках в багатоконфігураційному наближенні ДФ (Li et al, Saha-Frische) і рекомендовані NIST дані [22, 182, 199]

Z	Іон	NIST дані (експ.)	БКДФ, Li et al	БКДФ, Saha-Frische	Наша Робота
26	Fe XXIII	379125	380141	380034	379320
28	Ni XXV	418720	419573	-	419135
30	Zn XXVII	459615	460739	-	459984
32	Ge XXIX	-	502996	-	502088
34	Se XXXI	550300	548132	-	547295
36	Kr XXXIII	588770	590644	-	589137

В таблиці 3.3 наведені результати справжнього розрахунку енергетичних зрушень ΔE $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів з $Z = 26-36$ при різних значеннях електронної густини і температурах (кеВ).

Для порівняння наведені також аналогічні дані, отримані на основі розрахунку в БКДФ і наближенні модельного потенціалу (МП) для урахування ефектів плазмового екранування моделі (Li et al), а також дані розрахунку в рамках простої моделі іонної сфери [22, 182, 199]. Слід зазначити, що навіть у сучасних розрахунках спектрів, взагалі, енергетичних та спектральних параметрів багатозарядних іонів в плазмі дослідники досить активно використовують спрощені моделі урахування ефектів плазмового екранування, серед яких особливу популярність завдяки відомій простоті

отримали такі моделі модель іонної сфери, або моделі з використанням спеціальних модельних потенціалів та функціоналів густини.

Таблиця 3.3 – Енергетичні зрушення ΔE (cm^{-1}) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів при різних значеннях електронної густини (cm^{-3}) і температурах (eV): результати досягнуті в роботі і також аналогічні дані, отримані в БКДФ-МП (Li et al) і моделі іонної сфери (IS) [22, 182, 199]

	n_e	10^{22}	10^{23}	10^{24}	10^{22}	10^{23}	10^{24}
Z	кТ	БКДФ	БКДФ	БКДФ	КЕД	КЕД	КЕД
FeXXIII	500	32.4	361.9	3257.2	33.5	367.0	3271.1
	1000	24.4	275.2	2519.0	24.9	284.5	2537.5
	2000	18.9	215.5	1995.1	19.5	222.4	2008.4
	I-S	10.5	106.7	1069.5			
Saha	I-S	-	107	1070			
NiXXV	500	34.1	316.3	2850.7	35.0	323.8	2868.3
	1000	25.5	239.0	2189.5	26.1	245.5	2202.6
	2000	19.6	185.2	1716.9	20.8	192.7	1734.4
	I-S	9.0	92.4	926.0			
ZnXXVII	500	29.2	271.9	2972.7	30.6	279.8	2995.2
	1000	21.7	204.3	2252.4	23.0	213.5	2274.3
	2000	16.5	157.0	1752.5	18.3	168.4	1778.6
	I-S	7.9	80.7	809.6			

В таблиці 3.3а наведені аналогічні результати справжнього розрахунку енергетичних зрушень ΔE $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів з $Z = 26-36$ при різних значеннях електронної густини і температурах (keV), також разом із даними БКДФ і наближення модельного потенціалу (МП) для урахування ефектів екранування моделі (Li et al), а також дані розрахунку в рамках простої моделі іонної сфери [22, 182, 199].

Таблиця 3.3а – Енергетичні зрушення ΔE (см⁻¹) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів при різних значеннях електронної густини (см⁻³) і температурах (еВ): результати цієї роботи і також аналогічні дані, отримані в БКДФ-МП (Li et al) і моделі іонної сфери (IS) [22, 182, 199]

	n_e	10 ²²	10 ²³	10 ²⁴	10 ²²	10 ²³	10 ²⁴
Z	kT	БКДФ	БКДФ	БКДФ	КЕД	КЕД	КЕД
GeXXIX	500	29.8	277.2	2500.0	31.7	288.4	2528.4
	1000	22.1	207.5	1902.6	24.6	216.8	1931.5
	2000	16.6	158.4	1469.0	18.9	169.9	1497.6
	I-S	6.9	71.1	713.8			
SeXXXI	500	24.9	279.1	2514.3	28.1	293.2	2547.5
	1000	18.3	208.2	1908.1	21.0	223.7	1942.9
	2000	13.7	158.0	1465.1	16.6	173.4	1498.0
	I-S	6.1	63.1	633.9			
KrXXXIII	500	24.8	230.7	2500.4	30.1	248.6	2542.1
	1000	18.2	171.7	1893.2	24.7	189.4	1937.0
	2000	13.5	129.5	1446.5	19.8	148.1	1486.8
	I-S	5.4	56.4	566.3			

В табл. 3.4 надані дані по зрушенням ΔE (см⁻¹) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ для Ве-подібних іонів при різних n_e (см⁻³) і T (еВ).

В таблиці 3.5 наведені результати справжнього розрахунку сил осциляторів gf $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ переходу для Ве-подібних іонів при різних значеннях електронної густини (см⁻³) і температурах (кеВ): результати цієї роботи і також аналогічні дані, отримані в БКДФ-МП (Li et al; верхнє число - розрахунок в наближенні довжини; нижнє - швидкості) і моделі іонної сфери (IS) [22, 182, 199].

Таблиця 3.4 – Зрушення ΔE (см^{-1}) $2s^2-[2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ для Ве-подібних іонів при різних n_e (см^{-3}) і T (eV): КЕД – наш розрахунок і БКДФ-МП (Li et al), IS (Saha) [22, 182, 199]

	n_e	10^{22}	10^{23}	10^{24}	10^{22}	10^{23}	10^{24}
Z	kT	БКДФ	БКДФ	БКДФ	КЕД	КЕД	КЕД
FeXXIII	500	30.1	338.5	3048.7	31.3	344.2	3062.4
	1000	22.7	258.0	2363.4	23.9	264.5	2379.6
	2000	17.6	202.4	1877.7	18.8	208.7	1893.2
	I-S	9.8	101.4	1019.4			
Saha	I-S	-	100	999			
NiXXV	500	31.3	292.8	2639.6	33.8	300.4	2655.4
	1000	23.4	221.6	2030.6	25.7	229.1	2046.1
	2000	18.0	172.0	1597.1	20.1	179.8	1612.5
	I-S	8.3	86.6	870.9			
ZnXXVII	500	26.5	248.8	2723.2	29.1	258.1	2748.0
	1000	19.6	187.1	2065.4	22.8	196.9	2090.7
	2000	14.9	144.0	1610.0	17.8	155.2	1634.9
	I-S	7.0	74.6	750.8			
GeXXIX	500	26.6	250.5	2261.1	29.7	263.8	2294.5
	1000	19.7	187.6	1722.3	22.9	200.1	1755.8
	2000	14.8	143.3	1331.7	18.1	156.9	1364.9
	I-S	6.0	64.7	652.4			
SeXXXI	500	21.8	248.6	2242.5	26.9	264.7	2277.4
	1000	16.0	185.5	1703.1	21.4	201.3	1738.7
	2000	11.9	140.8	1309.0	17.2	156.5	1344.9
	I-S	5.1	56.5	570.6			
	500	21.3	197.9	2191.9	27.2	215.4	2236.4
	1000	15.5	150.5	1659.6	21.3	169.1	1705.1
	2000	11.5	113.5	1268.0	16.9	128.3	1303.8

Відзначимо, що позначення gf_0 відповідає значенню сили осцилятора переходу для іона у вільному стані (тобто без плазмового ефекту)

Таблиця 3.5 – Сили осциляторів gf $2s^2 - [2s_{1/2}2p_{3/2}]_1$ переходів для Ве-подібних іонів ($Z=26-30$) при різних значеннях електронної густини і температурах (кеВ): досягнуті результати і також аналогічні дані, отримані в БКДФ-МП (Li et al; для Fe: верхнє число - розрахунок в наближенні довжини; нижнє - швидкості) і моделі іонної сфери (IS) [22, 182, 199]

	n_e		10^{22}	10^{23}	10^{24}		10^{22}	10^{23}	10^{24}
Z	кТ	gf_0 БКДФ	gf БКДФ	gf БКДФ	gf БКДФ	gf_0 КЕД	gf КЕД	gf КЕД	gf КЕД
26	500	0.1537	0.1537	0.1538	0.1547	0.1541	0.1541	0.1543	0.1553
	1000		0.1537	0.1538	0.1545		0.1541	0.1543	0.1553
	2000		0.1537	0.1538	0.1543		0.1540	0.1542	0.1552
			0.1555	0.1556	0.1562		0.1541	0.1542	0.1552
	I-S		0.1537	0.1537	0.1540				
			0.1555	0.1555	0.1559				
28	500	0.1477	0.1477	0.1478	0.1487	0.1480	0.1480	0.1483	0.1495
	1000		0.1477	0.1477	0.1482		0.1480	0.1483	0.1495
	2000		0.1477	0.1477	0.1481		0.1479	0.1482	0.1493
	I-S		0.1477	0.1477	0.1479				
30	500	0.1433	0.1433	0.1433	0.1439	0.1438	0.1438	0.1441	0.1448
	1000		0.1433	0.1433	0.1438		0.1438	0.1441	0.1448
	2000		0.1433	0.1433	0.1436		0.1437	0.1440	0.1446

На рисунку 3.1a ми представляємо наші дані по температурних залежностях енергетичного зрушення $\Delta E[2s^2 - (2s_{1/2}2p_{1/2})_1]$ і $\Delta E[2s^2 - (2s_{1/2}2p_{3/2})_1]$ в спектрі Ве-подібного іона FeXXIII при електронній густини $n_e = 10^{24} \text{см}^{-3}$.

Наведені для іона заліза пари числових значень відповідають використанню в якості операторів радіаційного переходу в амплітуді радіаційного переходу в першому (верхнє число) випадку форми довжини, а в другому (нижнє число). У методі БКДФ їх розбіжність складає $\sim 1.1\%$, в нашій калібрувальній-інваріантній теорії шукана «розбіжність» становить $< 0.1\%$.

В цілому результати розрахунку на основі нашої теорії, як і теорії БКДФ, якісно узгоджуються один з одним.

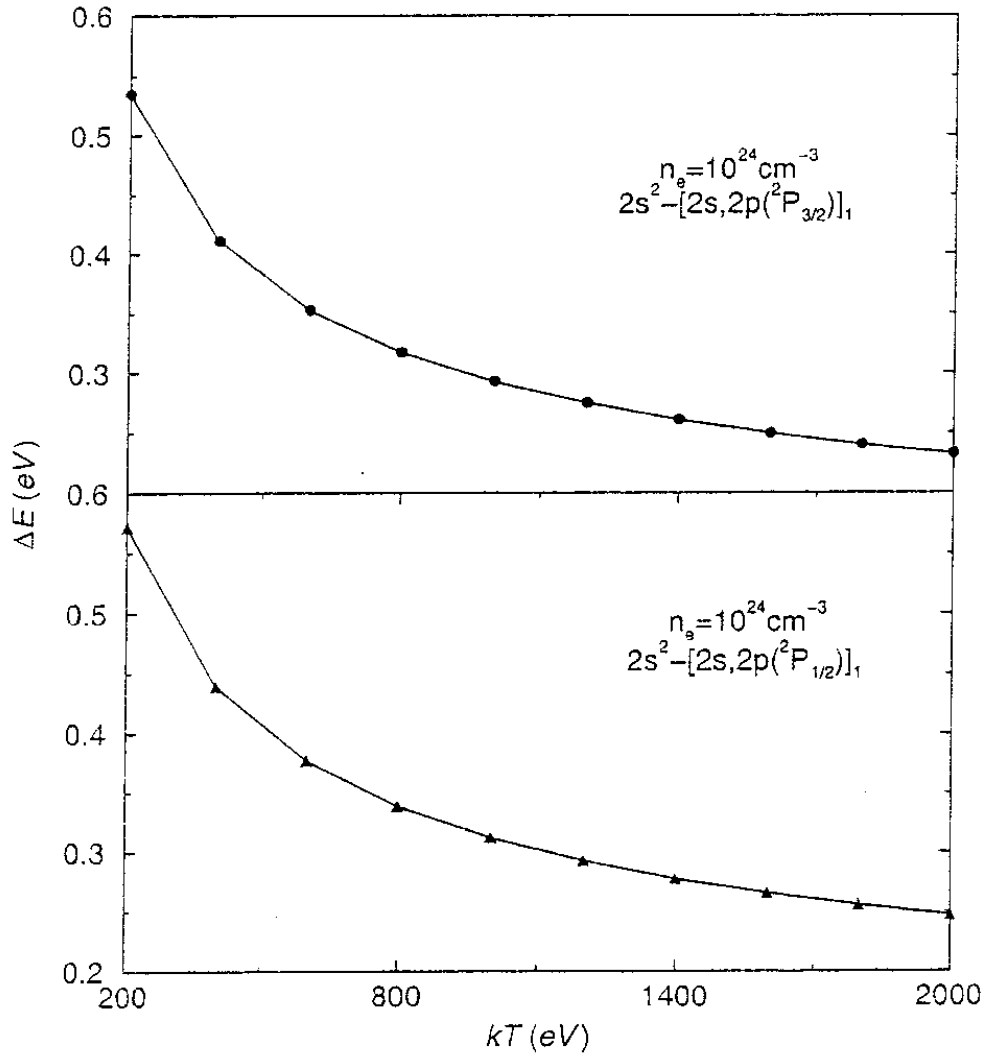


Рис. 3.1а. Температурна залежність енергетичного зрушення $\Delta E[2s^2 - (2s_{1/2}2p_{1/2})_1]$ і $\Delta E[2s^2 - (2s_{1/2}2p_{3/2})_1]$ в спектрі Ве-подібного іона FeXXIII при електронній густині $n_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ (наші дані)

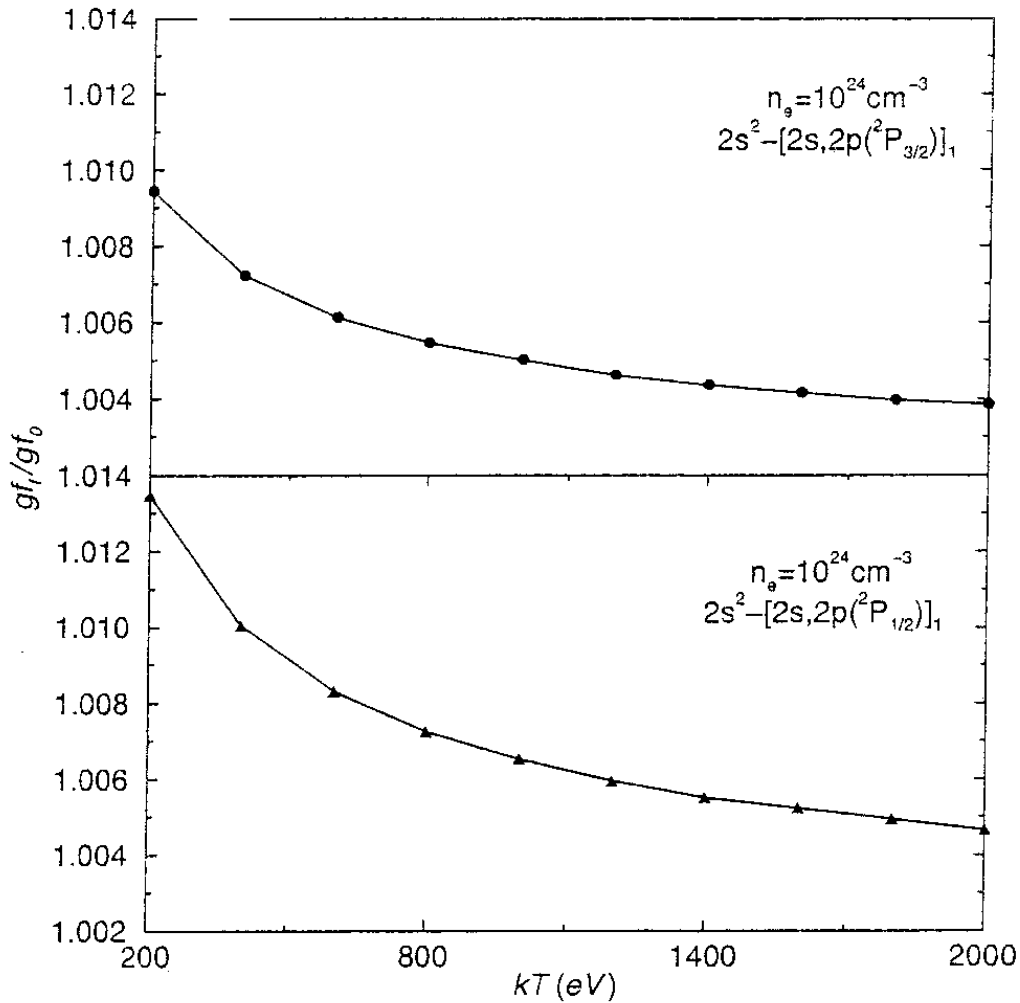


Рис. 3.1б. Температурна залежність відносних змін сил осциляторів gf/gf_0 переходів $[2s^2-(2s,2p(^2P_{3/2}))_1]$ і $[2s^2-(2s,2p(^2P_{1/2}))_1]$ в спектрі Ве-подібного іона FeXXIII при електронній густини $n_e=10^{24}\text{см}^{-3}$

Деякі кількісні відмінності, природно, пов'язані з використанням різних базисів релятивістських орбіталей і використанням відмінних моделей урахування плазмового екранування.

З фізичної точки зору поведінка зрушень пояснюється очевидною обставиною, а саме, збільшенням блакитного зсуву ліній внаслідок збільшення ефектів електронного екранування. В цілому і в разі сил осциляторів спостерігається повне якісне узгодження результатів розрахунку і в наближенні БКДФ і в рамках нашої теорії. Нагадаємо, що показник розбіжності величин сил осциляторів, розрахованих за формулами довжини і швидкості, свідчить про порушення принципу калібрувальної інваріантності.

Доречно зауважити, що, як правило, в різних ДФ наближеннях шукане

порушення може досягати 40%. В цьому сенсі, очевидно, в роботі [22] була використана версія БКДФ з ретельним урахуванням кореляційних ефектів і рівнів багатоконфігураційної хвильової функції. На жаль, робота не вирішує питання розрахунку характеристик електрон-іонних зіткнень, які ми розглянемо далі.

3.2.2 Результати обчислення перерізів збудження за рахунок зіткнень для Ве-подібних іонів

Характеристики електрон-іонних зіткнень для Ве-подібних іонів становлять величезний інтерес для таких додатків як діагностика астрофізичної, лабораторної та термоядерної плазми, а також плазми ЕВІТ (див. напр., [1-3, 22, 35-37, 104-106]). В останньому випадку характерні значення електронної густини виявляються значно (на кілька порядків) меншими від розглянутих вище (10^{15} - 10^{17}). На рис. 3.2 наведені діаграма енергетичних рівнів для Ве-подібного іону СІІІ [35]. Показані переходи, які були досліджені в роботі. .

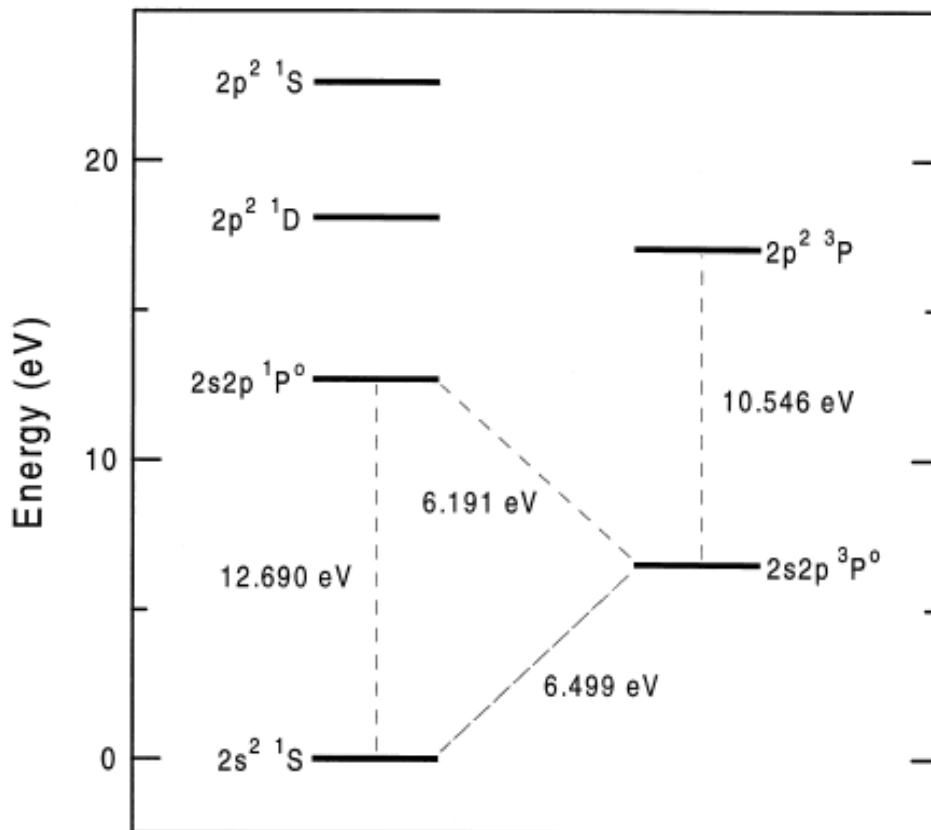


Рис.3.2. Діаграма енергетичних рівнів для Ве-подібного іону СІІІ [35]

В роботі [35] були представлені результати Bannister et al так званого MEIBEL (the merged electron-ion beams energy-loss) експерименту (1999), результати якого для цілої групи Ве-подібних іонів представляються нижче й порівнюються з нашими теоретичними даними та альтернативними.

На рисунку 3.3 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрі Ве- подібного вуглецю СІІ разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 13,2 еВ представляють загальну розширену невизначеність.

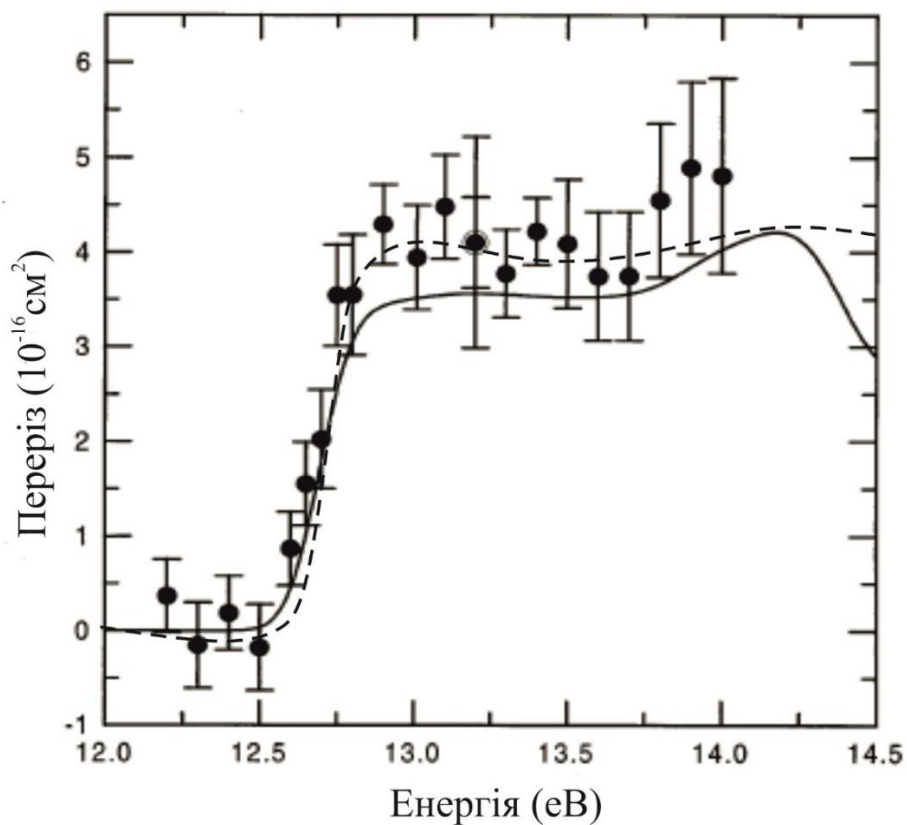


Рис. 3.3. Переріз електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрах Ве- подібного вуглецю СІІ разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 13,2 еВ представляють загальну розширену невизначеність

На рисунку 3.4 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрі Ве- подібного азоту NIV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 16,7 eV представляють загальну розширену невизначеність.

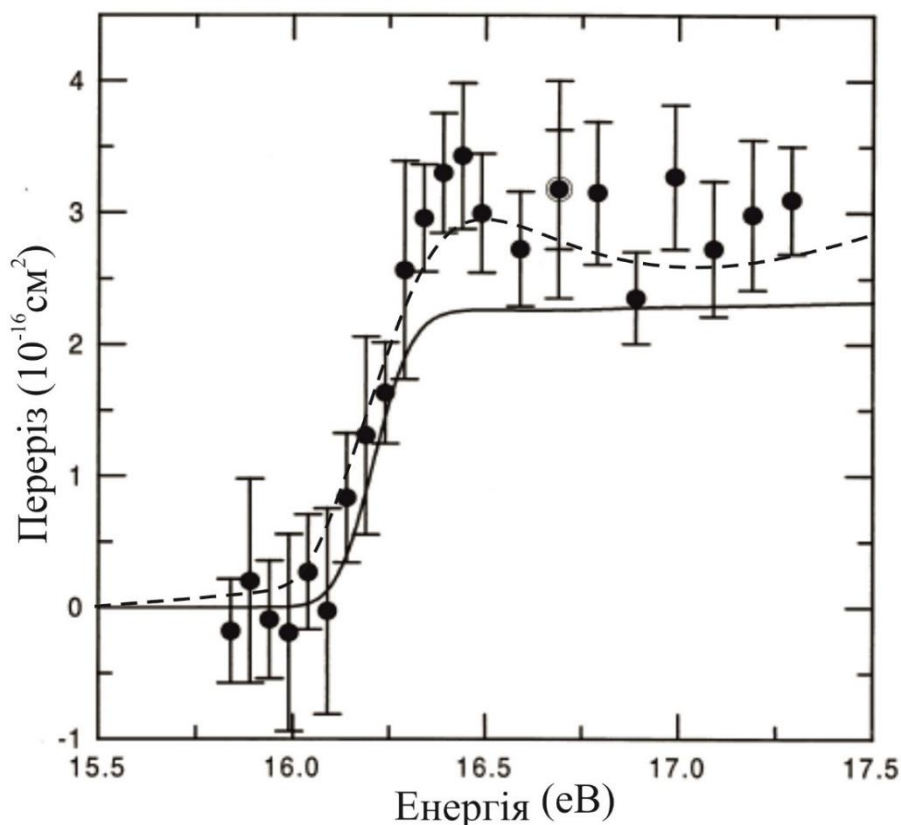


Рис.3.4 Експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрі Ве- подібного азоту NIV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 16,7 eV представляють загальну розширену невизначеність

На рисунку 3.5 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрі Ве- подібного кисню OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша

теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 20,55 еВ представляють загальну розширену невизначеність.

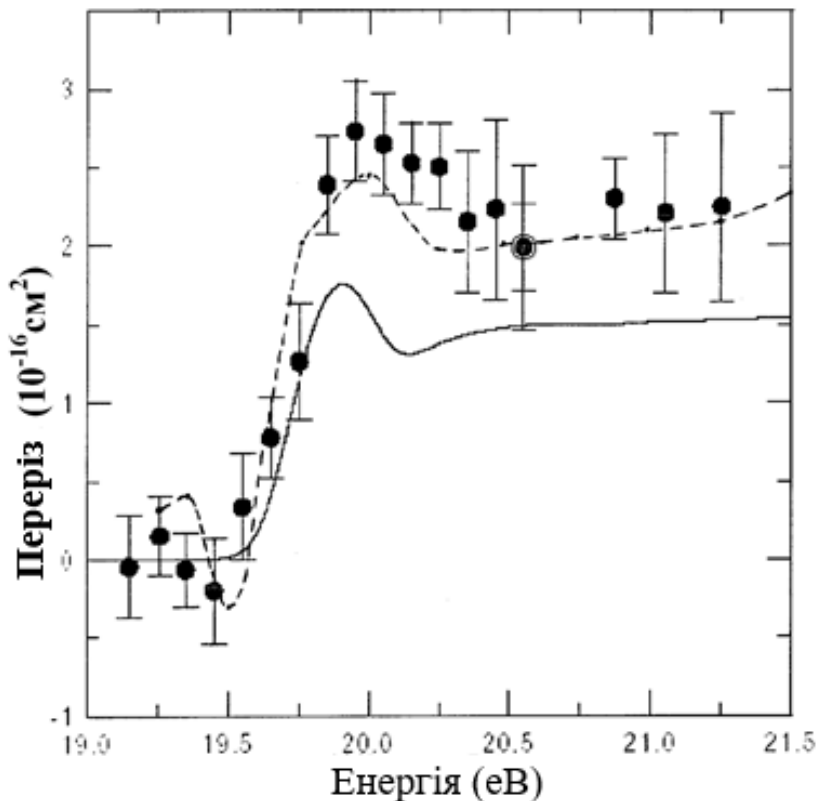


Рис.3.5 Експериментальні й теоретичні данні для перерізок електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$ в спектрі Ве-подібного кисню OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 20,55 еВ представляють загальну розширену невизначеність

На рисунку 3.6 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s2p\ ^3P^0 - (2p^2\ ^3P)]$ в спектрі Ве-подібного іону CIII разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія).

Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 11,33 еВ представляють загальну розширену невизначеність.

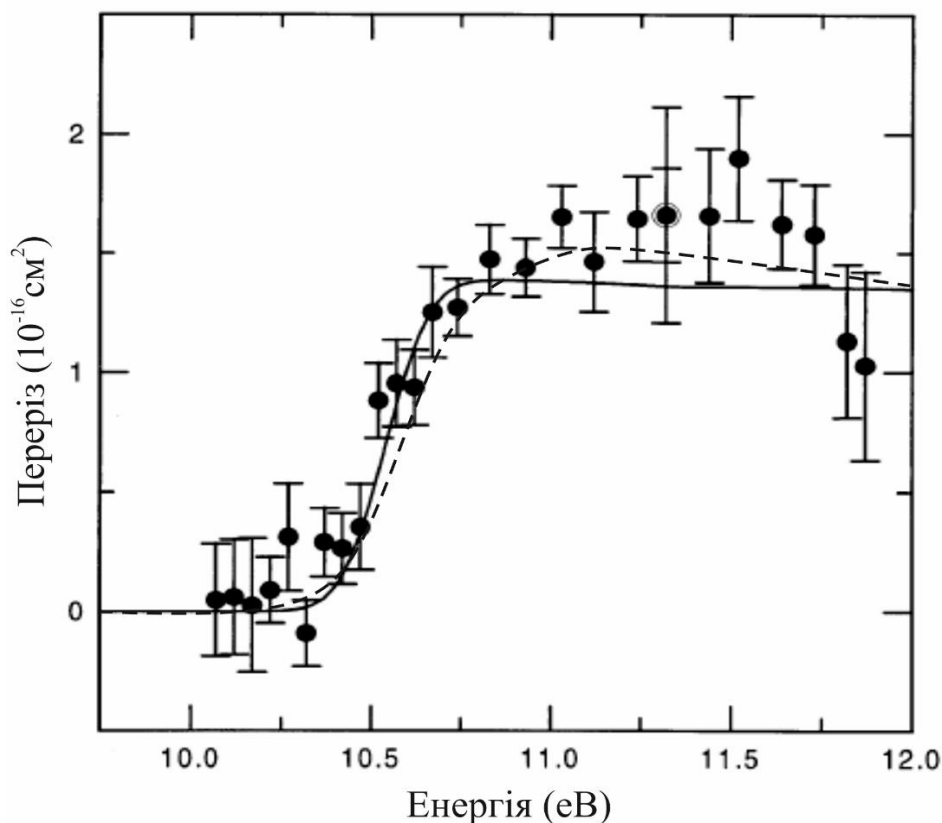


Рис. 3.6 Експериментальні й теоретичні данні для перерізів електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[2s2p\ ^3P^0 - (2p^2\ ^3P)]$ в спектрі Ве-подібного іону СІІ разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 11,33 eV представляють загальну розширену невизначеність

На рисунку 3.7 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^3P^0)]$ та переходу $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$ в спектрі Ве-подібного іону СІІ разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 6,8 eV представляють загальну розширену невизначеність.

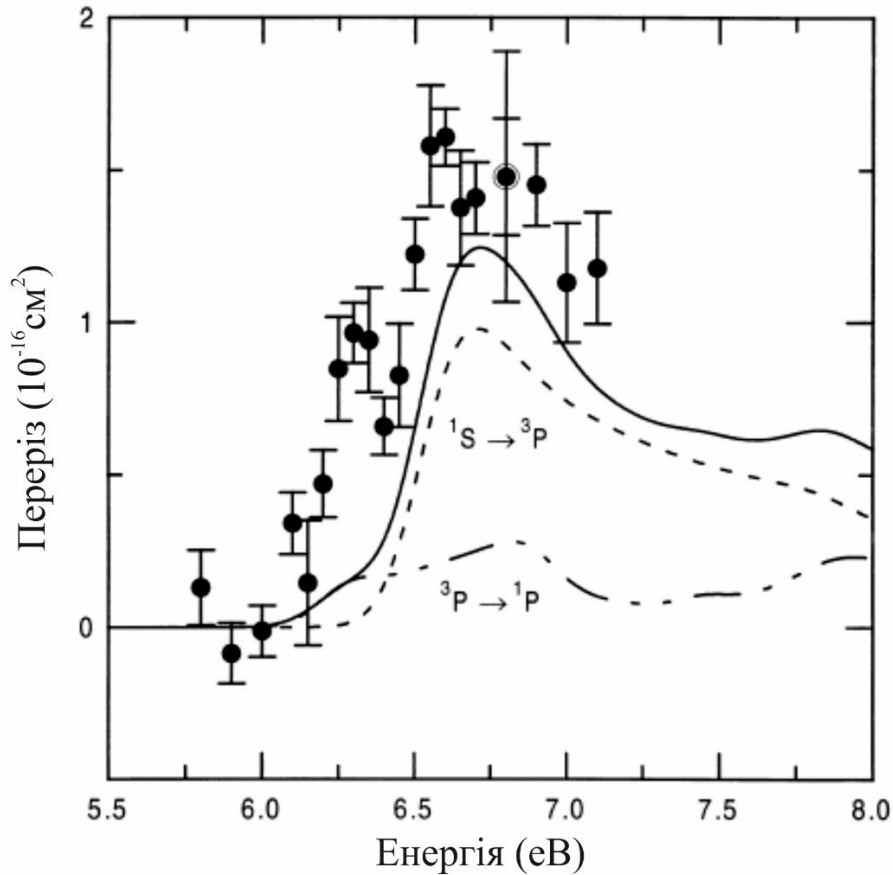


Рис. 3.7. Експериментальні й теоретичні данні для перерізу збудження за рахунок зіткнень переходу $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^3P^0)]$ та переходу $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^1P^0)]$ в спектрі Ве- подібного іону СІІ разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 6,8 eV представляють загальну розширену невизначеність

На рисунку 3.8 наведені експериментальні й теоретичні данні для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^1P^0)]$ та переходу $[(2s^2 \ ^1S)-(2s2p \ ^3P^0)]$ в спектрі Ве- подібного кисню OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 10,80 eV представляють загальну розширену невизначеність.

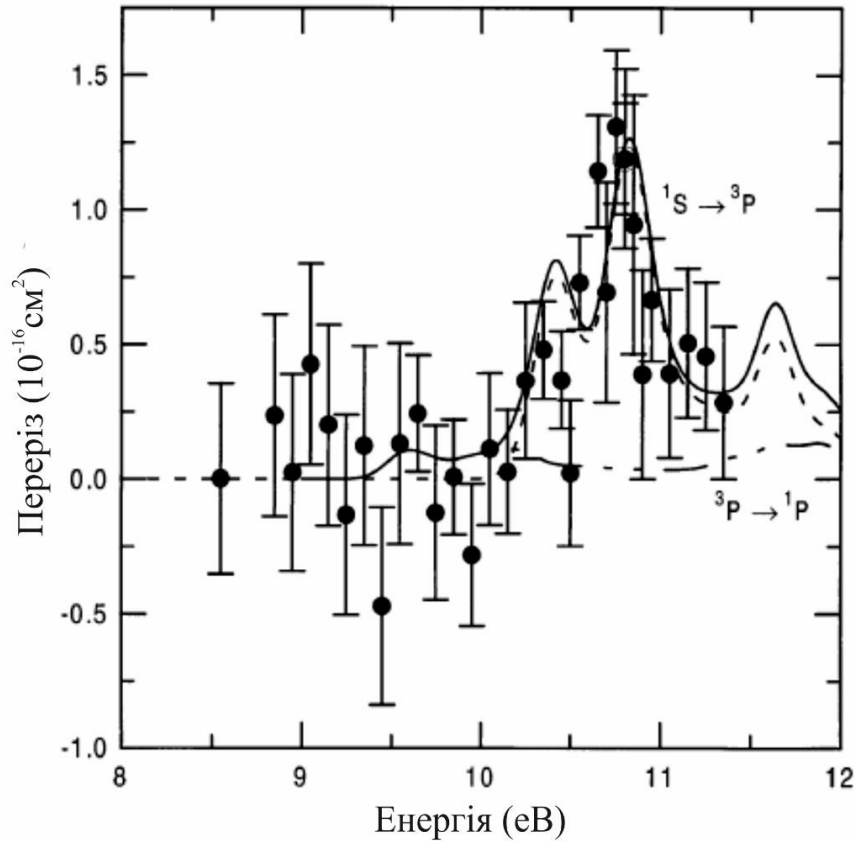


Рис.3.8. Експериментальні й теоретичні данні для перерізк збудження за рахунок зіткнень переходу $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^1P^0)]$ та переходу $[(2s^2 \ ^1S)-(2s2p \ ^3P^0)]$ в спектрі Ве- подібного кисню OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) [35]; наша теорія (пунктирна лінія). Знову точки представляють дані з 90% рівнем достовірності відносні смуги помилок. Зовнішні смуги помилок на точці при 10,80 eV представляють загальну розширену невизначеність

Наведені на рис 3.3-3.8 розраховані нами значення перерізу (10^{-16} см^3) електронного збудження за рахунок зіткнень ряду переходів, зокрема, переходу $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^1P^0)]$, $[(2s2p \ ^3P^0)-(2s2p \ ^3P^0)]$, $[(2s^2 \ ^1S)-(2s2p \ ^3P^0)]$, у спектрах ряду Ве- подібних іонів порівнюються, крім експериментальних даних, з даними альтернативного 3-конфігураційного R-матричного розрахунку [35].

Аналіз показує, що при енергії нижче за деяку E_0 (напр. $E_0= 20\text{eV}$ для кисню) спостерігається розумне узгодження даних обох теоретичних розрахунків з експериментом, однак, при енергії вищій за E_0 мають місце розбіжності наших даних і R-матричної теорії, які зумовлені різним ступенем урахування кореляційних ефектів (взаємодія конфігурацій) через різниці

використаних базисів (див. розділ 1, де описана процедура побудови базисів релятивістських хвильових функцій), а також деякими особливостями чисельних процедур.

При більших із розглянутих енергій точність R-матричного методу падає. Порівняння базисів обох розрахункових схем вказує на коректність розробленої теорії, авжеж як й відомого R-матричного методу, використаного в [35].

У таблиці 3.6 представлені результати нашого релятивістського розрахунку (з урахуванням обмінних і кореляційних поправок) сил електронних зіткнень (в кулонівських од.) для збудження переходу між рівнями тонкої структури ($2p^2P_{3/2}-2P_{1/2}$) основного стану Ве-подібних іонів з зарядом ядра $Z=26-36$.

Енергія налітаючого електрона визначається наступним простим співвідношенням:

$$\varepsilon_{in}=Z^2eV,$$

$$T=z^2keV$$

де z -заряд остова, електронна густина $n_e=10^{18}cm^{-3}$. Всі представлені дані вперше визначені нами (експериментальні дані відсутні) і представляють інтерес для зазначених вище додатків.

Таблиця 3.6 - Сили електронних зіткнень (у кулон. од: 10^{-2}) для збудження переходу [$2s^2 \ ^1S-(2s2p^1P)$] в спектрах Ве-подібних іонів (наші дані)

Z	Ион	Наша работа
26	FeXXIII	2.85
28	NiXXV	2.58
30	ZnXXVII	2.63
32	GeXXIX	2.42
34	SeXXXI	2.05
36	KrXXXIII	1.76

3.2.3 Сили електрон-іонних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури основного стану F-подібних іонів

У таблиці 3.7 представлені результати нашого релятивістського розрахунку (з урахуванням обмінних і кореляційних поправок) сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури ($2p^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$) основного стану F-подібних іонів з $Z=19-26$. Енергія налітаючого електрона $\epsilon_{in}=0,1294 \cdot Z^2$ еВ, $T=z^2$ кеВ

Для порівняння в таблиці 3.7 наведені результати розрахунку на основі найбільш удосконалених версій R-матричного методу, дані нерелятивістського розрахунку в рамках енергетичного підходу, а також наявні експериментальні дані [19, 211, 182].

Як видно на прикладі аналізу даних для іонів Ar X, Fe XVIII, релятивістський ЕП забезпечує кращу узгодженість теорії з експериментом, ніж дані альтернативних розрахунків, і зокрема, вважається найбільш точним і ефективним в даний час R-матричним методом (версії ICFT, LS + JAJOM).

Таблиця 3.7 – Сили електронних зіткнень при збудження переходу між рівнями тонкої структури ($2p^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$) основного стану F-подібних іонів з $Z=19-26$ (Енергія налітаючого електрона $\epsilon_{in}=0,1294 \cdot Z^2$ еВ, $T=z^2$ кеВ) [19, 211, 182].

Z	Іон	ICFT R-matrix	LS+JAJOM R-matrix	Нерел. ЕП	Наша робота	Експ. [6]
18	Ar X	0,582	0,420	0,484	0,492	0,49
20	Ca XII	0,162	0,160	0,152	0,159	-
22	Ti XIV	0,225	0,220	0,246	0,252	-
24	Cr XVI	0,112	0,100	0,136	0,142	-
26	Fe XVIII	0,132	0,110	0,142	0,148	0,15

Ця обставина, в основному, пов'язана з коректним урахуванням релятивістських і обмінно-кореляційних ефектів, використанням оптимізованого базису релятивістських орбіталей ($2s^2 2p^5 2s 2p^6 2s^2 2p^4 3l, l=0-2$) і меншою мірою з урахуванням ефектів плазмового оточення.

3.3 Висновок до розділу

Основні результати і висновки цього розділу зводяться до наступного:

1. Вперше отримано в переважній більшості з прийнятною точністю нові спектроскопічні дані по енергії переходів, силах осциляторів для переходів $2s^2-2s_{1/2}2p_{1/2,3/2}$ в спектрах Ве-подібних іонів з зарядом ядра $Z=26-36$ і відповідними плазмовими параметрами $n_e=10^{22}-10^{24}\text{cm}^{-3}$, $T=0.5-2$ кеВ (відповідно: $\mu\sim 0.01-0.3$), які виявляються більш точними, в порівнянні з результатами розрахунку в багатоконфігураційному наближенні ДФ (Li et al, Saha-Frische) і рекомендованими NIST даними. Проведено детальне порівняння отриманих даних з аналогічними даними, (в тих випадках, коли вони є), на основі розрахунку в БКДФ і наближенні модельного потенціалу (МП) для урахування ефектів плазмового екранування моделі (Li et al), а також дані розрахунку в рамках простої моделі іонної сфери. Також показано, що в методі БКДФ розбіжність сил осциляторів складає $\sim 1.1\%$, в нашій калібрувально-інваріантній теорії шукана «розбіжність» становить $<0.1\%$.

2. Вперше проведено детальний розрахунок значень перерізів електронних зіткнень збудження переходу $[2s^2\ ^1S -(2s2p\ ^1P)]$ в спектрах Ве-подібних іонів із зарядом ядра $Z=8, 26-36$, причому для всіх іонів, крім Ве-подібного іона $O4+$, всі дані по перерізах представляються вперше в світовій науковій літературі. Порівняння результатів розрахунку перерізу електронних зіткнень збудження переходу $[2s^2\ ^1S -(2s2p\ ^1P)]$ в спектрі Ве-подібного іона кисню з даними альтернативного 3-конфігураційного R-матричного розрахунку Vannister et al (1999) і експерименту показує, що при енергії нижчій ніж 20 еВ спостерігається розумна узгодженість даних обох теоретичних розрахунків з експериментальним, однак, коли енергії вище 20 еВ має місце розбіжність наших даних і R-матричної теорії, яка зумовлена різним ступенем урахування кореляційних ефектів (взаємодія конфігурацій) і різниці використаних базисів; при цьому слід відзначити велику коректність нашої теорії в порівнянні з версією R-матричного методу.

3. На основі релятивістського розрахунку з урахуванням обмінно-кореляційних поправок отримані значення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури ($2p\ ^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$) основного стану F-подібних іонів з $Z=19-26$ (енергія налітаючого електрона $\epsilon_{in}=0,1294\cdot Z^2$ еВ, $T=z^2$ кеВ (z - заряд остова), $n_e=10^{18}\text{cm}^{-3}$) і показано, що наш ЕП забезпечує краще узгодженість теорії з експериментом, ніж дані

альтернативних розрахунків, і зокрема вважається найбільш точним і ефективним в даний час R-матричним методом (версії ICFT, LS+JAJOM).

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [10, 11, 13, 20, 33, 35, 41-50].

РОЗДІЛ ІV

РЕЗУЛЬТАТИ РЕЛЯТИВІСТСЬКОГО ОБЧИСЛЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ Ne-ПОДІБНИХ ІОНІВ І Na-ПОДІБНИХ СПЕКТРІВ - САТЕЛІТІВ ДО 2-3 ПЕРЕХОДІВ В Ne-ПОДІБНИХ ІОНАХ

4.1 Вступ

Даний підрозділ присвячений викладеного вище (розділ 2) нового формалізму релятивістської багаточастинкової теорії збурень з дірак-коншемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням і вперше узагальненої послідовної калібрувальної-інваріантної *ab initio* схеми генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей.

Новий метод, по-перше, застосовано до обчислення енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій в спектрах деяких Ne-подібних іонів.

По-друге, далі представлені результати обчислень спектральних характеристик Na-подібних спектрів – сателітів $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$ ($J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$) до 2-3 переходів в деяких Ne-подібних іонів.

Крім чисто фундаментальних аспектів з'ясування можливостей нового методу, важливою мотивацією проведення відповідних обчислень було отримання нової прецизійної інформації щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик Ne-та Na-подібних іонів, зокрема, для мало вивчених або практично зовсім невивчених багатозарядних іонів послідовностей NeI, NaI.

Відповідні дані авжеж мають величезне теоретичне та практичне значення для цілого ряду додатків, до яких відносяться нові високо енергетичні класи задач атомної оптики, лазерної, разерної та гразерної фізики, квантової електроніки, наприклад, у сенсі пошуку нових «оптимальних» кандидатів для лазерної генерації у короткохвильовому діапазоні, побудови нових квантово-кінетичних моделей і відповідно нових лазерних схем ВУФ, рентгенівського діапазону, астрофізики та фізики плазми, наприклад, у сенсі нових принципів діагностики як низько-, так і високо- температурної плазми, лабораторної, астрофізичної, лазерної (ядерної) плазми, задачі побудови кінетичних моделей нових лазерних систем короткохвильового діапазону (див., напр., [1,2,5,17-19,31,35,44,

62,105, 106,109,123,126]).

Стосовно класу задач розробки нових лазерних систем на основі плазми неон-подібних іонів звичайно у цьому місці говорять про такі відомі лазери як лазер на переході Ne-подібного іона Y ($\lambda=155\text{A}$) з енергією імпульсу $E_{\text{pul}} \sim 5\text{мДж}$, і тривалістю імпульсу $\tau_{\text{pul}} \sim 80\text{пс}$, лазер на основі швидкого електричного розряду в капілярі в атмосфері неон-подібного Ar з використанням переходу $\lambda=469\text{A}$ в Ne- подібному іоні Ar з $E_{\text{pul}} \sim 0,88\text{ Дж}$ і $\tau_{\text{pul}} \sim 1,5\text{ нс}$ (Colorado univ., USA; 1999),)

До числа вкрай актуальних та дуже важливих з прикладної точки зору (а саме задач діагностики лазерної , лабораторної плазми) відноситься задача вивчення характеристик так званих сателітних спектральних ліній , які виникають поблизу резонансних в спектрах відповідних багатозарядних іонів, зокрема, у нашому випадку мова йде про сателітні лінії до резонансних ліній в Ne-подібних іонах які відповідають переходам $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$ в іонах ізоелектронної послідовності *NaI*.

Важливим технічним додатком відповідних даних про характеристики резонансних та сателітних спектральних ліній авжеж є клас задач діагностики лазерної, термоядерної, лабораторної плазми. Крім того, з класичної теоретичної спектроскопії багатозарядних іонів добре відомо, що для отримання потрібної спектроскопічної точності розрахунку енергетичних та спектральних характеристик є дуже важливим коректне урахування основних обмінно-кореляційних ефектів. Добре відомо, що сильне змішування станів може спостерігається при вивченні параметрів як резонансних, так й сателітних ліній, як для низько розташованих рівнів, де змішуються, як правило, два стани, так і для високо розташованих рівнів, для яких є можливим змішування трьох чотирьох та більше станів. Коректний спектральний аналіз показує, що облік вищих порядків ТЗ, в основному, призводить до зміщення положення відповідних рівнів та ліній, що викликано досить складною по динаміці компенсацією поправок вищих порядків ТЗ. Накінець в даному розділі також будуть представлені дані обчислення в межах узагальненої спрощеної статистичної схеми розподілу інтенсивностей ліній переходів між конфігураціями з великим набором станів, теоретичного моделювання спектрів діелектронних сателітів для декількох Na-подібних іонів, які узагальнюють та доповнюють відомі класичні результати Ivanova et al.

4.2 Короткий огляд робіт з дослідження спектрів Ne-подібних іонів та Na-подібних діелектронних сателітів

Теоретичне та експериментальне дослідження спектрів Ne-подібних іонів та Na-подібних діелектронних сателітів насправді має досить величезну історію й докладно викладено у цілій низці робіт (див., напр., [18,27,29-39,108,112-114]) з використанням різних теоретичних методів і різних експериментальних методик.

Для нас важливо відзначити, що не дивлячись на досить інтенсивні дослідження, актуальною залишається задача отримання нової прецизійної інформації щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик Ne-та Na-подібних іонів, зокрема, для мало вивчених або практично зовсім невивчених багатозарядних іонів послідовностей NeI, NaI.

До числа класичних хрестоматійних робіт відносять дослідження, результати яких викладені у відомих роботах Іванової і співр. [8,12,84,85,294-296].

Іванова та Глушков [85] виконали масові обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик неон-подібних іонів на основі релятивістської ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення й фактично вперше представили найбільш прецизійні дані щодо спектрів неон-подібних іонів в широкому інтервалі зарядів ядра. Іванова-Гогава-Гулов [295,296] виконали розрахунки характеристик ряду Na-подібних сателітних ліній в спектрах Ne-подібних іонів *CVII* і *ArVIII*, використовуючи цей же самий метод релятивістської ТЗ з емпіричним нульовим наближенням [12,84,85].

Згадані класичні роботи поставили до числа актуальних задач задачу коректної ідентифікації ліній неон-та натрій-подібних переходів в шуканих спектрах внаслідок виняткової теоретичної складності розрахунку і ідентифікації сателітних спектрів.

У перелічених роботах також представлені дуже грамотні огляди значної кількості попередніх, як правило досить спрощених обчислень енергетичних, спектроскопічних, радіаційних характеристик Ne-та Na-подібних іонів.

Стосовно експериментальних досліджень, авжеж слід вказати на класичні роботи, зокрема, Burkhalter-Cohen-Cowan-Feldman [69], де експериментально вивчалися спектри натрій-подібних іонів заліза і титану. Далі вказані автори провели теоретичну ідентифікацію відкритих ліній,

зокрема, використовуючі релятивістський метод ХФ були ідентифіковані сателітні лінії в іоні криптону, а також молібдену (див. [69,7070]). Важливий висновок полягає у тому, що коректний опис вказаних спектрів потребує використання дуже послідовного прецизійного теоретичного методу.

Неон-та натрій подібні іони хлору та аргону вивчалися у відомій роботі Berry-Desesquelles-Chang-Schektman (див. [70]), де автори використали методику так званого пучково-плівкового експерименту. Крім того, вказані автори привели дані своєї ідентифікації та класифікації сателітних ліній, отриманої на основі використання даних обчислень у релятивістському багатоконфігураційному наближенні ХФ.

Дуже важливі результати отримані Feldman-Cowan з використанням мало індуктивної вакуумної іскри [37] для характеристик ряду спектральних ліній Na-подібних іонів *Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni* і *Cu*; Також були ідентифіковані лінії, сателітні до Ne-подібних переходів $2s^2 2p^{61} S_0 - 2s^2 2p^5 3s^1 P_1$ і $2s^2 2p^{61} S_0 - 2s^2 2p^{53} P_1$. Повний аналіз відповідних даних наданий напр., в [8,12,84,85,119-121,294-296].

Дуже важливі для різних застосувань дані щодо компіляції і аналізу експериментальних даних по всім іонів заліза, зокрема, неон-та натрій-подібного заліза наведені Corliss-Sugar [126].

Дуже важливі експериментальні й теоретичні дослідження відповідної лазерної плазми виконувались в роботах Мандельштама, Жерихіна, Кошелева, Крюкова, Летохова [69] (див. також [8,12,84,85,116-121,294-296]). Серед важливих результатів слід відзначити аномальне збільшення інтенсивностей декількох ліній, які ідентифіковані як відповідні переходам з порушених станів $2p^5 3s^2$, $2p^5 3s 3p$, $2p^5 3p 3d$ у стани $2p^6 3s$, $2p^6 3p$ іону CIVII.

Ретельний огляд значної кількості теоретичних робіт по дослідженню спектрів неон-та натрій подібних іонів (див. також [8,12,84,85,116-125,294-296]) показує, що дані, отримані на основі методів типу ХФ або ДФ навіть у багатоконфігураційному наближенні часто не знаходяться у досить прийнятній згоді із надійними експериментальними результатами.

Така ситуація природно потребує виконання корекції відповідних спектральних даних, оскільки у подальшому вони використовуються при обчисленні таких важливих характеристик як сили осциляторів, ймовірності радіаційних переходів, перерізи збудження за рахунок зіткнень (електронного удару) і т.ін. Крім того, це має й значення для правильної ідентифікації значної кількості спектральних ліній. ,

4.3 Результати релятивістського обчислення спектрів та ймовірностей радіаційних переходів в спектрах Ne - подібних іонів

4.3.1 Вступні зауваження

Нижче наведені дані масових обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським наближенням енергій і ймовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ і $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$, в спектрах Ne-подібних іонів з $Z \sim 20-83$, а також результати обчислень спектральних характеристик Na-подібних спектри – сателітів $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$ ($J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$) до 2-3 переходів в Ne-подібних іонів з $Z = 17-26$, у тому числі Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII.

Використаний новий формалізм релятивістської багаточастинкової теорії збурень з дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням і вперше узагальнена послідовна калібрувальна-інваріантна *ab initio* методика генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей. Крім того, ми застосували у повному обсязі процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антиекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ, які базуються на використанні ефективних коректних обмінно-кореляційних функціоналів густини, а також ефективна схему урахування станів континууму в межах релятивістської версії методу штурмовських розкладань. Секулярна енергетична матриця розраховувалася в j-j схемою зв'язування кутових моментів, а перехід до проміжної схемою зв'язку здійснювався стандартно шляхом діагоналізації секулярної матриці.

4.3.2. Результати обчислення енергій рівнів конфігурацій $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$ і $2s 2p^6 3p, 4p$ в іонах Ca^{+10} , Sc^{+11} , Bi^{73+}

В якості важливого тесту перевірки точності обчислення енергетичних параметрів на основі нового формалізму було виконане прецизійне обчислення спектрів найбільш вивчених експериментально Ne-подібних

іонів, зокрема, Ca^{+10} , Sc^{+11} , Ni^{+18} , Br^{+25} , Bi^{73+} , тому в цьому підрозділі ми наведемо зведення результатів розрахунку енергій рівнів цих іонів різними методами, а також наявні експериментальні дані. У табл.4.1 наведені експериментальні дані [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296] енергій (в 10^2 см^{-1} ; повний кутовий момент $J=1$) рівнів конфігурації $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$ и $2s 2p^6 3p, 4p$ в спектрі іона Ni XIX , а також результати розрахунку на основі різних теоретичних підходів, зокрема: методом МКДФ [126], релятивістської багаточасткової ТЗ (RMBPT) [128], релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (RMBERT1,2) [119,129,130], наші дані.

Таблиця 4.1 – Енергії рівнів конфігурації $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$ и $2s 2p^6 3p, 4p$ в іоні Ni XIX (в 10^2 см^{-1} ; повний кутовий момент $J=1$): теорії - RMBPT, РТЗМП; метод МКДФ; RMBERT; експ.- експеримент [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296]

Рівень $J=1$	Експ.	МКДФ	RMBPT	RMBERT	Our data
$2p_{3/2} 3s_{1/2}$	71,280	71,208	71,276	71,225	71,270
$2p_{1/2} 3s_{1/2}$	72,620	72,609	72,613	72,584	72,611
$2p_{3/2} 3d_{3/2}$	78,130	78,065	78,126	78,072	78,121
$2p_{3/2} 3d_{5/2}$	79,110	79,061	79,106	79,064	79,102
$2p_{1/2} 3d_{3/2}$	80,520	80,512	80,517	80,517	80,512
$2s_{1/2} 3p_{1/2}$	-	-	-	86,277	86,318
$2s_{1/2} 3p_{3/2}$	-	-	-	86,721	86,768
$2p_{3/2} 4s_{1/2}$	-	95,887	-	95,879	95,882
$2p_{1/2} 4s_{1/2}$	-	97,411	-	97,289	97,325
$2p_{3/2} 4d_{3/2}$	-	98,556	-	98,578	98,584
$2p_{3/2} 4d_{5/2}$	-	98,964	-	98,935	98,945
$2p_{1/2} 4d_{3/2}$	-	100,402	-	100,262	100,290
$2s_{1/2} 4p_{1/2}$	-	-	-	-	109,136
$2s_{1/2} 4p_{3/2}$	-	-	-	-	109,285

Порівняння отриманих нами даних для енергії рівнів конфігурації $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$ и $2s 2p^6 3p, 4p$ в іоні Ni XIX з результатами розрахунку на основі різних теоретичних підходів, зокрема: методом МКДФ [126],

релятивістської багаточасткової ТЗ (RMBPT) [128], релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (RMBERT1,2) [119,129,130] показує, що точність для розглянутих рівнів є в певній мірі вище, що може бути пов'язано виключно з більш коректним урахуванням відповідних обмінно-кореляційних поправок, зокрема, таких ефектів як ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антиекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ.

Аналогічні даними таблиці 4.1 для Ne-подібного іона Ni XIX результати по енергіях термів в спектрі Br XXVI наведені в табл.4.2 (дані з робіт [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296]).

Таблиця 4.2 – Енергії рівнів конфігурації $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$ и $2s 2p^6 3p, 4p$ в неон-подібному іоні Br XXVI ($Z=35$) (в 10^2 см^{-1} ; повний кутовий момент $J=1$): теорії - RMBPT, РТЗМП; метод МКДФ; RMBERT1,2; Наші дані; експ.-експеримент (див. текст)

Рівень $J=1$	Експ.	МКДФ	RMBP T	RMBEP T1	RMBERT 2	Our Data
$2p_{3/2} 3s_{1/2}$	124,486	124,434	124,480	124,477	124,483	124,487
$2p_{1/2} 3s_{1/2}$	128,287	128,251	128,279	128,273	128,285	128,289
$2p_{3/2} 3d_{3/2}$	134,409	134,335	134,380	134,383	134,386	134,410
$2p_{3/2} 3d_{5/2}$	135,943	135,814	135,926	136,015	135,952	135,949
$2p_{1/2} 3d_{3/2}$	139,412	139,018	139,420	139,522	139,420	139,416
$2s_{1/2} 3p_{1/2}$	146,499	-	-	146,647	146,512	146,506
$2s_{1/2} 3p_{3/2}$	147,580	-	-	147,733	147,603	147,591
$2p_{3/2} 4s_{1/2}$	168,237	168,018	-	168,413	168,241	168,101
$2p_{1/2} 4s_{1/2}$	172,117	171,815	-	172,289	172,122	172,115
$2p_{3/2} 4d_{3/2}$	172,801	172,216	-	172,360	172,795	172,790
$2p_{3/2} 4d_{5/2}$	-		-	172,933	173,367	173,362
$2p_{1/2} 4d_{3/2}$	176,460	176,202	-	176,619	176,468	176,462
$2s_{1/2} 4p_{1/2}$	188,430	-	-	188,102	188,426	188,428
$2s_{1/2} 4p_{3/2}$	188,715	-	-	188,526	188,710	188,718

Аналогічно обчисленням вище у випадку даного іону також дуже значна роль належить акуратному урахуванню складних обмінно-кореляційних поправок. Як вказано, напр., в [12,85, 116-119]) досить високу похибку мають експериментальні дані для енергій рівнів $2s_{1/2} 3p_{1/2}$, $2s_{1/2} 3p_{3/2}$

($J=1$). Ця обставина пояснюється очевидною складністю відповідних експериментів і використанням даних розрахунку на основі теоретичних підходів, які дають досить немалою погрішністю опису системи.

Далі у таблиці 4.3 наведені експериментальні дані [44,180] енергій (в 10^2 см^{-1}) термів конфігурації $2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d$ і $2s 2p^6 4s, 4p, 4d$ в спектрах Ne-подібних іонів кальцію Ca^{+10} , скандію Sc^{+11} . Також наведені дані розрахунку на основі різних теоретичних підходів, зокрема: методом МКДФ [17], релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП) [35,60], наші результати, отримані на основі нового формалізму релятивістської багаточастинкової теорії збурень з ДКШ та дебай-хюккелівським нульовим наближенням (див. докладніше [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296]).

Таблиця 4.3 – рівнів конф. $2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d$ і $2s 2p^6 4s, 4p, 4d$ в іоні Ca XI (в 10^2 см^{-1}): a – метод МКДФ; b,c- метод релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗЕМП1); d- our data ; експ.- експеримент (див текст)

Конфігур.	Рівень	a	B	c	d	Експ.
$2p^5 4s$	$(3/2, 1/2)_2$	37,473	37,529	37,527	37,526	37,526
	$(3/2, 1/2)_1$	37,518 ^a	37,545	37,540	37,539	37,539 ^b
	$(1/2, 1/2)_0$	37,806	37,819	37,813	37,812	
	$(1/2, 1/2)_1$	37,801	37,831	37,826	37,822	37,819 ^b
$2p^5 4p$	$(3/2, 1/2)_1$	38,097	38,164	38,158	38,155	
	$(3/2, 1/2)_2$	38,156	38,198	38,190	38,185	
	$(3/2, 3/2)_3$	38,158	38,201	38,187	38,184	38,181
	$(3/2, 3/2)_1$	38,190	38,230	38,216	38,212	
	$(3/2, 3/2)_2$	38,210	38,246	38,236	38,231	
	$(3/2, 3/2)_0$	38,357	38,370	38,364	38,359	
	$(1/2, 1/2)_1$	38,477	38,485	38,481	38,476	
	$(1/2, 3/2)_1$	38,510	38,519	38,510	38,508	38,509
	$(1/2, 3/2)_2$	38,518	38,519	38,518	38,516	
$p^5 4d$	$(1/2, 1/2)_0$	38,763	38,696	38,688	38,685	
	$(3/2, 3/2)_0$	38,957	39,025	38,985	38,981 ^c	
	$(3/2, 3/2)_1$	38,975 ^a	39,039	38,996	38,998 ^c	
	$(3/2, 5/2)_4$	38,998	39,057	39,035	39,022	
	$(3/2, 5/2)_2$	38,933	39,093	39,029	39,028	

Продовження таблиці 4.3

Конфігур.	Рівень	a	B	c	d	Експ.
	(3/2, 3/2) ₃	39,016	39,072	39,043	39,041	
	(3/2, 3/2) ₂	39,185	39,062	39,065	39,070	
	(3/2, 5/2) ₃	39,058	39,104	39,088	39,084	
	(3/2, 5/2) ₁	39,092 ^a	39,188	39,188	39,190 ^b	
	(1/2, 3/2) ₂	39,242	39,366	39,341	39,339	
	(1/2, 5/2) ₂	39,386	39,371	39,350	39,348	
	(1/2, 5/2) ₃	39,365	39,381	39,361	39,358	
	(1/2, 3/2) ₁	39,414 ^a	39,473	39,478	39,484 ^b	
2s4s	(1/2, 1/2) ₁		44,622	44,615		
	(1/2, 1/2) ₀		44,717	44,710		
2s4p	(1/2, 1/2) ₀		45,305	45,298		
	(1/2, 1/2) ₁		45,310	45,306		
	(1/2, 3/2) ₂		45,328	45,325		
	(1/2, 3/2) ₁		45,355	45,351		
2s4d	(1/2, 3/2) ₁		46,165	46,159		
	(1/2, 3/2) ₂		46,165	46,158		
	(1/2, 5/2) ₃		46,167	46,163		
	(1/2, 5/2) ₂		46,231	46,222		

Аналіз наведених даних показує, що знову дуже значна роль належить акуратному урахуванню складних обміно-кореляційних поправок, зокрема, взаємодії квазічастинок через поляризуємий остов та взаємне антиекранування. Авжеж, використання оптимізованих базисів релятивістських орбіталей також є вкрай важливим моментом обчислення.

Далі в табл. 4.4 наведені енергії рівнів конфігурацій $2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d$ и $2s 2p^6 3s, 4p, 4d$ в іоні Sc XII (в 100 см^{-1}): а- метод МКДФ; б –метод релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП); с-наш розрахунок; експ.-експеримент (див. [12,69-70,84,85,117,119,126,294-296]).

Таблиця 4.4 – Енергії рівнів конфігурацій $2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d$ и $2s 2p^6 3s, 4p, 4d$ в іонах Sc XII (в 10^2 см^{-1}): а- метод МКДФ; б –метод релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП); d- наші дані; експ.- експеримент (див текст)

Конфігур.	Рівень	a	b	d	Експ.	
2p ⁵ 4s	(3/2, 1/2) ₂	43,332	43,380	43,374	43,374	
	(3/2, 1/2) ₁	43,354	43,406	43,393	43,393 ^b	
	(1/2, 1/2) ₀	43,751	43,755	43,746		
2p ⁵ 4p	(1/2, 1/2) ₁	43,738	43,770	43,774	43,788 ^b	
	(3/2, 1/2) ₁	44,021	44,087	44,078		
	(3/2, 1/2) ₂	44,082	44,116	44,105		
	(3/2, 3/2) ₃	44,089	44,119	44,096	44,094	
	(3/2, 3/2) ₁	44,122	44,159	44,141		
	(3/2, 3/2) ₂	44,147	44,182	44,170		
	(3/2, 3/2) ₀	44,319	44,329	44,322		
	(1/2, 1/2) ₁	44,487	44,526	44,504		
	(1/2, 3/2) ₁	44,527	44,551	44,515	44,510	
	(1/2, 3/2) ₂	44,537	44,558	44,523		
	(1/2, 1/2) ₀	44,783	44,716	44,684		
	2p ⁵ 4d	(3/2, 3/2) ₀	44,960	45,028	44,985	44,982 ^c
(3/2, 3/2) ₁		44,980	45,045	45,007	45,002	
(3/2, 5/2) ₄		45,006	45,066	45,028	45,029	
(3/2, 5/2) ₂		44,922	45,072	45,039	45,036	
(3/2, 3/2) ₃		45,026	45,082	45,046	45,050	
(3/2, 3/2) ₂		45,241	45,107	45,084	45,081	
(3/2, 5/2) ₃		45,074	45,119	45,096	45,098	
(3/2, 5/2) ₁		45,190 ^a	45,218	45,209	45,210 ^b	
(1/2, 3/2) ₂		45,305	45,454	45,424	45,422	
(1/2, 5/2) ₂		45,491	45,461	45,434	45,432	
(1/2, 5/2) ₃		45,462	45,473	45,444	45,444	
(1/2, 3/2) ₁		45,539	45,574	45,512	45,579	
2s4s		(1/2, 1/2) ₁		51,032	51,023	
		(1/2, 1/2) ₀		51,137	51,128	
2s4p		(1/2, 1/2) ₀		51,779	51,770	
	(1/2, 1/2) ₁		51,785	51,777		
	(1/2, 3/2) ₂		51,809	51,798		
	(1/2, 3/2) ₁		51,840	51,830		
2s4d	(1/2, 3/2) ₁		52,721	52,713		

Продовження таблиці 4.4

Конфігур.	Рівень	a	b	d	Експ.
	$(1/2, 3/2)_2$		52,722	52,714	
	$(1/2, 5/2)_3$		52,725	52,717	
	$(1/2, 5/2)_2$		52,798	52,789	

Аналіз та порівняння наведених даних для і енергії рівнів конфігурацій $2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d$ и $2s 2p^6 3d 4s, 4p, 4d$ в іоні Sc XII, розрахованих на основі методу МКДФ, методу релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП) і нашого формалізму ТЗ показує, що наші дані знаходяться у досить розумній згоді з експериментальними. Стосовно експериментальних значень енергії термів $2p^5 4d (3/2, 3/2)_2$ $2p^5 4d (3/2, 5/2)_1$, справедливим ймовірно слід вважати висновок щодо до досить значної експериментальної похибки.

Аналіз також показує, що точність для розглянутих рівнів є в певній мірі вище, що може бути пов'язано виключно з більш коректним урахуванням відповідних обмінно-кореляційних поправок зокрема, таких ефектів як ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антиекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ. Більш того, урахування поправок вищих порядків зсуває положення енергетичних рівнів. Також розрахунок показує, що у випадку неон-подібних іонів має місце дуже цікавий з теоретичної точки зору ефект компенсації поправок вищого порядку різного типу. У таблиці 4.5 наведені експериментальні (дані так званого beam-foil експерименту) і теоретичні енергії (в еВ) рівнів $2p3s, 2p3p, 2p3d, 2s3p$ конфігурацій в спектрі Ne-подібного іона Vi^{73+} . Крім наших даних, для порівняння наведені також результати розрахунку методом MCDF = МКДФ з урахуванням радіаційних поправок в рамках процедури Мора (MCDF-S) і методу MCDF з використанням базису воднеподібних орбіталей (MCDF-H), дані обчислень на основі методу РТЗМП з емпіричною підгонкою і різними базисами орбіталей (див. [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296]).

Таблиця 4.5 – Енергії (в еВ) рівнів $2p3s, 2p3p, 2p3d, 2s3p$ конфігурацій в спектрі Ne-подібного іона Vi^{73+} : Експеримент (Beam-Foil); Теорія - MCDF-S, MCDF-H – багатоконфігураційний метод ДФ з урахуванням радіаційних поправок (S) і (H); РТЗМП1,2 - РТЗМП з емпіричною підгонкою і різними

базисами орбіталей і наші дані; (див. текст)

Рівень	J	Експ.	MCDF-S	MCDF- H	РТЗМП 1	РТЗМП 2	Наші дані
$2p_{3/2}3s_{1/2}$	1	10,508 (4)	10,507.4	10,507.7	10,503.8	10,504.9	10,506
$2p_{3/2}3p_{1/2}$	2	10,679 (4)	10,678.9	10,677.0	10,672.4	10,674.1	10,678
$2p_{3/2}3p_{3/2}$	2	11,344 (10)	11,349.2	11,347.2	11,355.6	11,352.2	11,342
$2p_{3/2}3d_{3/2}$	1	11,534 (11)	11,530.7	11,528.2	11,536.1	11,535.5	11,531
$2p_{3/2}3d_{5/2}$	1	11,719 (4)	11,725.9	11,723.5	11,741.7	11,735.3	11,717
$2p_{1/2}3s_{1/2}$	1	12,872 (5)	12,872.1	12,872.3	12,870.1	12,871.2	12,870
$2p_{1/2}3d_{3/2}$	1	13,925 (6)	13,928.4	13,926.0	13,935.2	13,932.9	13,922
$2s_{1/2}3p_{1/2}$	1	13,625 (6)	13,633.1	13,627.1	13,627.7	13,626.4	13,621
$2s_{1/2}3p_{3/2}$	1	14,296 (7)	14,300.2	14,294.2	14,307.6	14,304.8	14,293

Авжеж для важких іонів звичайно починає мати значення коректне урахування не тільки релятивістських, але й радіаційних поправок. Наші дані, в певній мірі краще ніж дані альтернативних розрахунків методом РТЗМП1,2 узгоджуються з експериментом. Очевидним тут є висновок про необхідність подальшого узагальнення методу за рахунок урахування так званих радіаційних поправок. Тем не менш для задач спектроскопії за рахунок зіткнень наведені дані уявляються цілком прийнятними.

4.3.3 Результати обчислення енергій та ймовірностей заборонених радіаційних переходів між рівнями конфігурацій $2s^22p^5nl$ и $2s2p^6nl$ ($n=3,4$; $l=0-2$) в спектрах Ne-подібних іонів

В цьому підрозділі ми представимо результати нашого розрахунку ймовірностей (енергій) радіаційних переходів в спектрах деяких Ne- подібних іонів. Слід зазначити що проблема обчислення ймовірностей заборонених радіаційних переходів є значно більш складною , оскільки динамічна поведінка матричних елементів суттєво відрізняється від поведінки аналогічних незаборонених переходів.

Докладний огляд даної проблематики, а також наявні в літературі дані по ймовірностям заборонених переходів для деяких неон-подібних іонів наданий, напр., в роботах [12,69-70,84,85,117,119,126-130,294-296].

Далі в таблиці 4.6 надані наші дані обчислень енергій (в 10^2 см^{-1}) рівнів конфігурацій $1s^22s^22p^53s$, $1s^22s^22p^53p$ Ne- подібних іонів з $Z=27-31$ і дані

імовірностей радіаційних переходів (с^{-1}).

Таблиця 4.6 – Енергії (10^2 см^{-1}) рівнів конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s$ і $1s^2 2s^2 2p^5 3p$ Ne- подібних іонів і ймовірності переходів (с^{-1}) (позначення $1,0+10=10^{10} \text{ с}^{-1}$)

Конф.	J	Терм	27	29	30	31
$2p^5 3s$	2	$2p_{3/2} 3s_{1/2}$	64617 (.17+06)	77764 (.32+06)	84780 (.44+06)	92089 (.71+06)
	1	$2p_{3/2} 3s_{1/2}$	64787 (.09+13)	77954 (.14+13)	84981 (.18+13)	92300 (.21+13)
	0	$2p_{1/2} 3s_{1/2}$	65830 (0.0)	79444 (0.0)	86738 (0.0)	94360 (0.0)
	1	$2p_{1/2} 3s_{1/2}$	65932 (.80+12)	79553 (.10+13)	86852 (.11+13)	94476 (.14+13)
$2p^5 3p$	1	$2p_{3/2} 3p_{1/2}$	67219 (.51+04)	80701 (.22+05)	87884 (.51+05)	95361 (.11+06)
	2	$2p_{3/2} 3p_{1/2}$	67491 (.53+09)	80971 (.10+10)	88151 (.12+10)	95624 (.17+10)
	3	$2p_{3/2} 3p_{3/2}$	67668 (.28+03)	81244 (.76+03)	88486 (.11+04)	96033 (.19+04)
$2p^5 3p$	1	$2p_{3/2} 3p_{3/2}$	67754 (.30+06)	81323 (.67+06)	88560 (.09+07)	96100 (.12+07)
	2	$2p_{3/2} 3p_{3/2}$	67919 (.59+09)	81522 (.10+10)	88780 (.14+10)	96340 (.18+10)
	1	$2p_{1/2} 3p_{1/2}$	68653 (.35+04)	82589 (.68+04)	90041 (.12+05)	97821 (.22+05)
$2p^5 3p$	0	$2p_{3/2} 3p_{3/2}$	68433 (0.0)	82191 (0.0)	89531 (0.0)	97177 (0.0)
	1	$2p_{1/2} 3p_{3/2}$	68964 (.34+06)	83004 (.79+06)	90525 (.11+07)	98383 (.17+07)
	2	$2p_{1/2} 3p_{3/2}$	69004 (.64+09)	83058 (.10+10)	90585 (.14+10)	98450 (.19+10)
	0	$2p_{1/2} 3p_{1/2}$	70215 (0.0)	84236 (0.0)	91727 (0.0)	99543 (0.0)

В таблиці 4.7 представлені наші аналогічні дані обчислень енергій (в 10^2 см^{-1}) рівнів конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3d$ Ne- подібних іонів з зарядом ядра

27-31, а також значення ймовірностей радіаційних переходів (с^{-1}) в основний стан; (позначення $1,0+ 10=10^{10} \text{с}^{-1}$) для цих ж іонів.

Таблиця 4.7 - Енергії (10^2см^{-1}) рівнів конфігурацій $1s^22s^22p^53d$ Ne-подібних іонів і ймовірності радіаційних переходів (с^{-1}) в основний стан; (позначення $1,0+ 10=10^{10} \text{с}^{-1}$)

Конф.	J	Терм	27	29	30	31
$2p^53d$	0	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	71151 (0.0)	85099 (0.0)	92527 (0.0)	100260 (0.0)
	1	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	71238 (.10+12)	85206 (.12+12)	92646 (.18+12)	100387 (.20+12)
	2	$2p_{3/2}3d_{5/2}$	71402 (.50+07)	85405 (.11+08)	92863 (.14+08)	100626 (.20+08)
	4	$2p_{3/2}3d_{5/2}$	71407 (.55+00)	85401 (.61+00)	92856 (.10+01)	100615 (.16+01)
$2p^53d$	3	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	71469 (.26+06)	85456 (.59+06)	92904 (.86+06)	100656 (.11+07)
	2	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	71618 (.10+07)	85630 (.28+07)	93091 (.42+07)	100857 (.67+07)
$2p^53d$	3	$2p_{3/2}3d_{5/2}$	71715 (.32+06)	85750 (.68+06)	93222 (.10+07)	101005 (.13+07)
	1	$2p_{3/2}3d_{5/2}$	72148 (.77+13)	86283 (.14+14)	93809 (.18+14)	101643 (.24+14)
	2	$2p_{1/2}3d_{3/2}$	72671 (.32+06)	87118 (.60+06)	94841 (.79+06)	102901 (.10+07)
	3	$2p_{1/2}3d_{5/2}$	72799 (.33+06)	87280 (.71+06)	95023 (.10+07)	103108 (.14+07)
	2	$2p_{1/2}3d_{5/2}$	72742 (.31+06)	87209 (.10+07)	94945 (.15+07)	103020 (.25+07)
	1	$2p_{1/2}3d_{3/2}$	73428 (.28+14)	87931 (.40+14)	95681 (.45+14)	103769 (.49+14)

Аналіз також показує наявність дуже цікавого з теоретичної точки зору ефекту компенсації поправок вищого порядку різного типу. Повертаючись до висновку щодо ймовірностей радіаційних переходів слід зазначити, що урахування ефекту поляризації остову дає внесок у величину ймовірності на рівні 25-30%.

Варто звернути на змінення ступеня взаємодії різних конфігурацій в спектрах іонів в залежності Z , а також надто суттєве значення урахування релятивістських ефектів. Це легко зрозуміти враховуючи класичні визначення відповідно ймовірностей заборонених електричного та магнітного переходів.

У будь якого випадку важливий висновок наших обчислень полягає у тому, що для отримання спектроскопічної точності розрахунку радіаційних характеристик для неон-подібних іонів принципово важливим є одночасне коректне урахування релятивістських та обмінно-кореляційних ефектів. Як вказувалось вище, головне значення отриманих масових даних по енергетичним та радіаційним характеристикам неон-подібних іонів полягає у виключно високій важливості цих даних для розв'язання цілого ряду задач, зокрема, задач атомної оптики, лазерної, разерної та гразерної фізики, квантової електроніки, наприклад, у сенсі пошуку нових «оптимальних» кандидатів для лазерної генерації у короткохвильовому діапазоні, побудови нових квантово-кінетичних моделей і відповідно нових лазерних схем ВУФ, рентгенівського діапазону, астрофізики та фізики плазми, наприклад, у сенсі нових принципів діагностики як низько-, так і високо- температурної плазми, лабораторної, астрофізичної, лазерної плазми, задачі побудови кінетичних моделей нових лазерних систем короткохвильового діапазону (див., напр., [1,2,5,17-19,31,35,44, 62,105, 106,109,123,126]).

4.4 Результати релятивістського розрахунку Na-подібних спектрів – сателітів до 2-3 переходам в Ne-подібних іонах

В даному підрозділі ми наведемо результати релятивістського розрахунку так званих Na-подібних спектрів - сателітів до 2-3 переходам в ряді Ne-подібних іонах, зокрема, для Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, а також інших.

На кінець, отримані дані як в попередніх підрозділах, так й нижче є стартовими для розв'язання задач спектроскопії за рахунок зіткнень. В табл. 4.10 наведені результати розрахунку енергій (в 10^3см^{-1} повний кутовий момент $J=3/2$), а також експериментальні дані для рівнів конфігурації $2p^5 3s 3p$, $2p^5 3p^2$ в іоні CIVII.

Для порівняння деякі теоретичні дані в таблиці і у подальшому нижче взяті з робіт [12,85,117,119,126-130,294-296].

Для розуміння даних зазначимо таке: буква, що стоїть в першій позиції, відноситься до стану вакансії, а наступні дві букви - до станів

надставних електронів. Число, наступне за ними, вказує проміжний кутовий момент скріплення двох електронного стану, штрихом відзначені стани, в яких частинка має найбільший можливий для даного l повний кутовий момент.

Наприклад, позначення $(p'sp0)$ еквівалентно позначенню: $2p^5_{3/2}(3s_{1/2}3p_{1/2}[0])$. Аналогічні данні в таблиці 4.11 приведені для На-подібного іону Ar VIII.

Неважно зрозуміти, що відповідні стани будуються з двох електронів і однієї вакансії, які можна побудувати з $2p^{-1}_{1/2}, 2p^{-1}_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}$ орбіталей.

Нагадаємо, що наш метод розрахунку базується на формалізмі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням і вперше узагальненій послідовній калібрувальній-інваріантній *ab initio* схемі генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей.

Таблиця 4.8 – Енергії рівнів конфігурації $2p^5 3s 3p, 2p^5 3p^2$ в іоні CIVII: (в 10^3 см^{-1} ; $J=3/2$): а –метод релятивістської ТЗ з емпіричним РТЗЕ1 “0” наближенням; б- метод ХФ; с- метод РТЗЕ із оптимізованим базисом; d – наші дані; е- експеримент (див. текст)

Конфігурація рівня	A	b	c	D	E
0.54(p'sp'2)0.50(p'sp1)0.42(p'sp0)	1727	1728	1702	1710	1710
0.80(p'sp0)0.39(psp1)	1743	1745	1720	1727	1728
0.61(p'sp'2)0.60(p'sp1)0.39(p'sp'1)	1753	1754	1728	1739	1738
0.65(psp'1)0.47(psp1)0.41(p'sp0)	1759	1761	1737	1746	1744
0.56(psp'2)0.54(psp1)0.49(p'sp'2)	1765	1764	1741	1749	1750
0.77(p'sp'1)0.54(p'sp1)	1812	1818	1794	1802	1805
0.79(p'sp'1)0.52(psp1)0.26(p'sp'1)	1822	1824	1806	1813	1814
0.60(p'pp0)0.53(p'pp'1)0.37(p'p'p'0)	1877	1879	1867	1874	
0.65(p'pp'1)0.46(p'pp0)0.39(pp'p'2)	1888	1892	1873	1885	
0.81(ppp'1)0.35(ppp'2)0.32(p'pp'1)	1898	1902	1885	1895	
0.61(pp'p'2)0.48(p'p'p'2)0.38(p'p'p'2)	1904	1908	1896	1901	
0.54(pp'p'2)0.52(p'pp'2)0.48(p'p'p'2)	1920	1920	1910	1916	
0.73(p'p'p'0)0.53(p'pp0)0.28(ppp'2)	1944	1949	1929	1939	
0.64(p'p'p'2)0.53(ppp'2)0.40(ppp'1)	1975	1983	1971	1978	

Аналіз наведених в таблиці даних показує, що по-перше, наші дані значно краще узгоджуються із експериментальними ніж дані методу ДФ. Що стосується порівняння з результатами отриманими в рамках релятивістської ТЗ з емпіричним модельним нульовим наближенням,

в принципі має місце досить добре узгодження. Важливо зазначити, що у альтернативному методі в нульовому наближенні використано емпіричне наближення модельного потенціалу, що автоматично забезпечує урахування певної кількості одночастинкових й навіть багаточастинкових обмінно-кореляційних поправок.

Також слід зазначити, що у представлених таблицях показані головні терми відповідних векторів станів. Неважко зрозуміти, що для вивчаємих станів має місце дуже яскраво виражене змішування станів як низько розташованих лежачих рівнів, де змішуються, як правило, тільки два стани, так і для високо розташованих із одночасним змішуванням трьох й більше станів. Аналіз показує, що облік вищих порядків ТЗ, в основному, зміщує абсолютне положення всіх рівнів, що викликано неповною компенсацією поправок вищого порядку.

Таблиця 4.9 - Енергії рівнів конфігурації $2p^53s3p$, $2p^53p^2$ в іоні $Ar VIII$ (в 10^3 см^{-1} ; $J=3/2$): а – метод ХФ; б- метод релятивістської ТВ з емпіричним “0” наближенням; с- наші дані (з урахуванням поправок вищих порядків ТЗ); е- експ. (див текст)

Конфігурація рівня	a	b	C	Exp
0.54(p'sp'2)0.50(p'sp1)0.42(p'sp0)	2079	2076	2059	2060
0.80(p'sp0)0.39(psp1)	2098	2094	2079	2080
0.61(p'sp'2)0.60(p'sp1)0.39(p'sp'1)	2119	2105	2089	2091
0.65(psp'1)0.47(psp1)0.41(p'sp0)	2127	2114	2099	2100
0.56(psp'2)0.54(psp1)0.49(p'sp'2)	2129	2120	2105	2106
0.77(p'sp'1)0.54(p'sp1)	2184	2171	2164	2165
0.79(p'sp'1)0.52(psp1)0.26(p'sp'1)	2196	2184	2175	2178
0.98(p'ss0)	1995	1980	1980	1980
0.60(p'pp0)0.53(p'pp'1)0.37(p'p'p'0)	2256	2244	2240	
0.65(p'pp'1)0.46(p'pp0)0.39(pp'p'2)	2272	2257	2255	
0.78(p'pp'2)0.38(p'p'p'0)	2273	2258	2257	
0.81(ppp'1)0.35(ppp'2)0.32(p'pp'1)	2284	2271	2268	
0.61(pp'p'2)0.48(p'p'p'2)0.38(p'p'p'2)	2291	2277	2274	

Продовження таблиці 4.9

Конфігурація рівня	a	b	c	Exp
0.54(pp'p'2)0.52(p'pp'2)0.48(p'p'p'2)	2309	2295	2291	
0.73(p'p'p'0)0.53(p'pp0)0.28(ppp'2)	2331	2319	2316	
0.64(p'p'p'2)0.53(ppp'2)0.40(ppp'1)	2362	2356	2356	

Детальне порівняння відносних положень рівнів енергії з експериментальними даними (колонка c) показує, що включення вищих поправок покращує на $\sim 2-10$ тис. см^{-1} відносно положення зазначених рівнів. Аналіз також показує наявність дуже цікавого з теоретичної точки зору ефекту компенсації поправок вищого порядку різного типу.

Саме із-за вказаного ефекту точність обчислень рівнів таких складних атомних систем є дуже далекою від потреб різноманітних додатків. Більш того у більшості теоретичних підходів вказаний ефект або зовсім не спроможний бути описаним, або описується із дуже високою похибкою.

Шукані труднощі стають дуже значними у стандартних методах типу релятивістського ХФ або навіть багатоконфігураційного методу ДФ. В нашому підході, як і в методі релятивістської теорії збурень з емпіричним нульовим наближенням (див. версії [12,84,118-121,294-296]) шуканий ефект компенсації описується досить прецизійно, що й забезпечує цілком прийнятну згоду із даними експерименту.

4.5 Висновок до розділу 4

1. Наведені результати розрахунку енергій E і імовірностей A радіаційних переходів між рівнями конфігурацій $2s^22p^53s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ і $2s2p^63s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$, в спектрах Ne-подібних іонів. Порівняння отриманих в даній роботі результатів з альтернативними ДФ та ін. теоретичними даними для E , A ряду переходів в іонах Ca^{+10} , Sc^{+11} тощо (для цих іонів є уривчасті результати beam-foil експерименту і ін.) показує найкращий згоду даних КЕД ТЗ з експериментом внаслідок більш повного врахування кореляцій і використання оптимізованого 1QP уявлення.

Для ряду термів, зокрема, $2p^54d (3/2, 3/2)_2$, $2p^54d (3/2, 5/2)_1$ (для іонів Ca XI , Sc XII), $2s_{1/2}3p_{1/2}$, $2s_{1/2}3p_{3/2} (J=1)$ (Br XXVI) експериментальні дані наведені в літературі з досить високою похибкою. Розраховані залежності імовірностей $E2$, $M1$, $M2$ переходів в Ne-подібних іонах від Z виявляють

певні нерегулярності в усіх залежностях, пов'язані зі зміною ступеня взаємодії різних конфігурацій в шуканих спектрах, і сильну залежність E, A від ступеня обліку кореляційних і релятивістських ефектів. Переважна частина даних з прийнятною точністю отримана вперше і вкрай важлива для вирішення завдань діагностики плазми, розробки короткохвильових лазерів на багатозарядних іонах, астрофізичних додатків і т.д.

2. Наведені дані повного релятивістського розрахунку спектральних характеристик Na-подібних спектрів – сателітів $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$ ($J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$) до 2-3 переходів в Ne-подібних іонів з $Z=17-26$, включаючи Na-подобные ионы CIVII, ArVIII. Порівняння даних з уривчастими даними експерименту показало високу точність нашого розрахунку, особливо в порівнянні з розрахунком многоконфігураційним методом Дірака-Фока (МКДФ).

В спектрах спостерігається сильне змішування як низьколежачих станів, де змішуються, як правило, 2 стани, так і високо лежачих рівнів, для яких можливо змішування 3-х і більше рівнів. Урахування вищих порядків ТВ, в основному, зрушує абсолютне положення всіх рівнів будь-яких змін і в порівнянні з експериментом покращує на $\sim 2-10$ тис. см^{-1} відносно положення ліній.

Для цілого ряду сателітних ліній вперше отримані достовірні дані. Вперше наведена повна класифікація термів, що особливо цінно в умовах відсутності повного набору експериментальних даних і складності експерименту для Na- подібних іонів навіть з невеликим зарядом ядра внаслідок важкої можливості розв'язання виникає конгломерату ліній.

Нова схема більш точна в порівнянні з широко застосовувемими схемами на основі даних розрахунку в наближенні МКДФ (ХФ) і особливо ефективна при вивченні складних конфігурацій, де реалізується проміжний випадок і спектр є лінійно-смугоастим.

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [28-31, 32, 34, 38-40, 51-59].

РОЗДІЛ V

ПЕРЕРІЗИ І СИЛИ ЕЛЕКТРОН-АТОМНИХ (ІОННИХ) ЗІТКНЕНЬ ДЛЯ ЗБУДЖЕННЯ З ОСНОВНОГО СТАНУ АТОМА НЕОНУ І NE-ПОДІБНИХ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ

5.1 Збудження з основного стану атома неону і Ne-подібних багатозарядних іонів

Слід відразу ж зазначити, що спектри атома неону і Бі ізоелектронної послідовності Ne (двохквазічастинкові системи) вивчалися в досить великій кількості робіт (див., напр., [1-3, 8, 12, 25-34, 53, 66, 68, 81, 82, 189, 197-199]) з використанням різних теоретичних методів і різних експериментальних методик, що з величезною практичною важливістю надає інформацію про енергетичні і спектроскопічні характеристики шуканих атомних систем для численних додатків, зокрема, атомної оптики і спектроскопії, лазерної фізики та квантової електроніки (роботи зі створення лазерних систем з довжиною хвилі випромінювання в короткохвильовій ВУФ і рентгенівській частинах спектра), фізики астрофізичної, лабораторної, термоядерної плазми, плазми токамака і т.д. (зрозуміло, тут мова в першу чергу йде про спектроскопічну діагностику), фізику іонізованих газів Сонця, полярного саява та ін. (див., напр., [1-3, 8, 12, 25-34, 53, 66, 68, 81, 82, 189, 197-199]).

Незважаючи на це, проблема ідентифікації спектральних ліній в спектрах багатьох Ne-подібних іонів до цих пір не має адекватного і надійного вирішення, не кажучи вже про прийнятну точність радіаційних характеристик і характеристик за рахунок зіткнень.

Зрозуміло, такий стан справ в першу чергу пов'язаний як з винятковою теоретичною складністю розрахунку й ідентифікації спектрів шуканих атомів і іонів, так і з відомими експериментальними проблемами ідентифікації та інтерпретації.

Дамо короткий огляд відповідних досліджень (досить докладний список відповідних робіт наведено в [3, 81, 82]). У теорії розрахунку спектрів Ne-подібних іонів використовувалася ціла група відомих в атомній спектроскопії теоретичних методів, зокрема ХФ і ДФ (БКХФ і БКДФ), ТЗ по $1/Z$, релятивістська багаточастинкова ТЗ (RMBPT) [7, 10, 13, 62, 175 -177], ТЗ з емпіричним модельним наближенням, ab initio КЕД ТЗ та ін. (див., напр., [1-3, 8, 12, 25-34, 53, 66, 68, 81, 82, 189, 197-199]).

В останні роки для розрахунку спектрів та інших характеристик ряду неона-подібних іонів використовувалися найбільш розвинені методи типу мега-ДФ, МК R-матричний метод (на основі РС комплексів «GRASP», «R-MATR»).

Слід згадати і про використання поліпшених версій таких традиційних методів як метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBT), наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) [23, 165, 166].

Торкаючись експериментальних досліджень, слід перш за все згадати цикл робіт Burkhalter-Cohen-Cowan-Feldman [69], в яких з використанням пучково-плівкової методики вивчені спектри Ne-подібних іонів Ni, Fe, Ti, Cl, Ar і ідентифіковані цілий ряд нових ліній як в основному спектрі, так і в сателітному (див., напр., огляди в [3, 35, 81, 82]).

У шуканих експериментах м'який рентгенівський спектр був отриманий двома способами: плазма збуджувалася фокусуванням лазерного проміння та вакуумною іскрою і з використанням пучково-плівкової методики.

Крім того, Burkhalter та ін. досліджували рентгенівський спектр молібдену, отриманий вибухом дротинки, і виявили ряд нових ліній, відповідних Ne-подібним переходам, однак, через невелику різницю між ними ($\sim 1\text{mÅ}$) ідентифікацію шуканих ліній провести не змогли, а навели лише уривчасті дані, узгоджені з недостатньо точними даними ХФ розрахунку [69]. Слід згадати величезну роботу, проведenu в NIST (USA) Grance, Corliss-Sugar, Martin et al [199] з аналізу та компіляції спектральних даних, в т.ч. за рівнями і можливостями радіаційних переходів в ряді Ne-подібних іонів.

Серед недавніх робіт з вивчення спектральних параметрів і параметрів зіткнень атома неону (а також аргону) слід зазначити роботи групи Khakoo et al (California University, Fullerton, California Institute of Technology, Pasadena; Los Alamos Nat. Lab., Los Alamos, USA і ряду ін. університетів США і Канади) [23], які вперше одержали найбільш надійні експериментальні дані. Для теоретичних розрахунків були використані згадані вище методи МК R-MATR, UFOMBT, CI-DWBA, HF-DWBA, SCGS-RDWA, MCGS-RDWA.

На жаль, крім нейтрального атома неону ця група не вивчала неон-подібні іони. У ряді американських університетів у співпраці з Інститутом спектроскопії і Фізичним інститутом ім. П. Лебедева АН СРСР (РАН) проводилася широка програма досліджень неон-подібних іонів, зорієнтована на пошук лазерних ефектів у ВУФ і рентгенівському діапазонах спектра.

Серед створених до теперішнього часу когерентних джерел такого типу слід зазначити лазер на переході Ne-подібного іона Y ($\lambda=155\text{A}$) з енергією імпульсу $E_{\text{pul}}\sim 5\text{мДж}$, і тривалістю імпульсу $\tau_{\text{pul}}\sim 80\text{пс}$ (FIAN-ISAN, Russia; Livermor, USA; 1996), лазер на основі швидкого електричного розряду в капілярі в атмосфері Ar з використанням переходу $\lambda=469\text{A}$ в Ne-подібному іоні Ar з $E_{\text{pul}}\sim 0,88\text{ Дж}$ та $\tau_{\text{pul}}\sim 1,5\text{нс}$ (Salt Lake City University, Colorado University, USA; 1999).

Також слід згадати лазери на переходах $\lambda = 304\text{A}$ Ne-подібного іону V, $4d^1S_0-4p^1P_1$ Ni-подібних іонів Mo ($\lambda = 189\text{A}$), Ru ($\lambda = 165\text{A}$), Ag ($\lambda = 139\text{A}$) та ін. (2000-2005) (див., напр., [8, 15, 26, 53]).

Цікаво і доречно зауважити, що навряд чи ці найважливіші фізичні досягнення у фізиці короткохвильових лазерів були б реалізовані так швидко без участі і величезного внеску співробітників Інституту спектроскопії [8, 10, 12, 25-27, 53-55, 68, 81]. Протягом багатьох років широка програма експериментальних і теоретичних досліджень, зорієнтована в тому числі і на спектроскопію Сонця, і роботи зі створення перших радянських лазерів ВУФ і рентгенівського діапазонів, проводилися в Інституті спектроскопії АН СРСР під керівництвом академіка Мандельштама С.Л., а також професора Аглицкого Є.В. (експеримент) і паралельно теоретичних досліджень під керівництвом проф. Іванова Л.М., у Фізичному Інституті ім. П. Лебедева і пізніше в Інституті загальної фізики РАН) під керівництвом член-кор. Виноградова О.В. (див., напр., [8, 10, 12, 25-27, 53-55, 68, 81]).

Зауважимо [68], що саме співробітникам ІСАН СРСР належить перше спостереження лазерних ефектів в плазмі багатозарядних неон-подібних іонів в 1975р. Там же Жеріхін та ін. [68] вперше провели експериментальні дослідження лазерної плазми, яка збуджувалася фокусуванням випромінювання на мішень з КСІ, і виявили унікальне збільшення інтенсивностей декількох ліній, що відповідають переходам збуджених станів $2p^53s^2$, $2p^53s3p$, $2p^53p3d$ в стани $2p^63s$, $2p^63p$ іонів хлору і аргону.

Серед послідовних теоретичних розрахунків слід зазначити релятивістські ДФ розрахунки спектрів ряду Ne-подібних іонів, проведені

Johnson-Sapistein-Blundell (University Notre Dame, USA) [63]). Сафронова та ін. [61, 103, 104] (спочатку ІСАН, в останні роки University of Nebraska, USA) проводили розрахунок спектрів шуканих іонів методом релятивістської багаточастинкової ТЗ (RMBPT). Іванов-Іванова-Глушков виконали детальні дослідження спектрів іонів ізоелектронної послідовності неону з $Z=18-100$, використовуючи метод релятивістської ТЗ з емпіричним нульовим наближенням [8, 10, 12, 81, 84, 85, 108].

Слід особливо відзначити роботу Глушкова-Іванової [85] (див. також [12]), яка до цих пір є найбільш послідовною, інформаційно та найбільш точно описує спектри рівнів низько розташованих станів Ne-подібних іонів.

У серії робіт цей метод набув радикального розвитку і в наш час є методом ab initio КЕД ТЗ [3, 108, 109, 212, 222, 228, 229]. Використовуючи цей підхід як стартовий, в розділі 1 ми виклали основи нового КЕД енергетичного підходу до вирішення завдань теоретичної спектроскопії за рахунок зіткнень з урахуванням як релятивістських і обмінно-кореляційних ефектів, так і ефекту плазмового екранування, а також зовнішнього ЕМП. Перш ніж переходити до викладу отриманих нами результатів, прокоментуємо технічні моменти розрахунку неон-подібних систем.

Опис базису релятивістських хвильових функцій разом з штурмовським доповненням детально дано в розділі 1. Тут ми відзначимо лише, що відповідний базис включав одноквазічастинкові $1QP$ орбіталі реальних станів вакансії в неон-подібному остові $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ ($2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$) і електрона над остовом (nlj , $n=3-5$; $l=0-2$) плюс рідбергівські орбіталі і набір штурмовських орбіталей $6lj$ ($l=0-2$).

Порівнюючи наш базис з аналогічними базисами R-матричного методу та ін. вище згаданих методик, використаних групою Khakoo et al [23], Griffin et al [20], та Іванова і співр. [12, 25-27, 84, 85], а також наших ранніх робіт [226,241], можна констатувати його значно більшу повноту і коректність, а також ефективність.

Зауважимо також, що вибір значень плазмових параметрів (щільність частинок, температурний інтервал) був зумовлений метою потенційного застосування результатів до конкретних прикладних лазерно-спектроскопічних завдань і не мав мети виходу на область завдань термодинаміки та оптики відповідної плазми.

5.2 Перерізи збудження електронним ударом станів $2p^53s$ конфігурації з основного стану атома Ne

Як зазначалося вище, радіаційні характеристики та характеристики зіткнень нейтрального атома неону детально досліджені і експериментально, і на основі різних теоретичних підходів, і таким чином, цей атом може розглядатися як найважливіший тест для будь-якого нового теоретичного методу, а також нової експериментальної методики. Далі наведемо результати розрахунку диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стані $2p^53s$ конфігурації при енергії налітаючого електрона від 20 до 100eV.

Слід зазначити, що це інтервал енергій, де звичайне Борновське наближення використовувати не доцільно.

На (рис. 5.1a,б) наведені диференціальні перерізи збудження електроним ударом атома Ne (підсумовані за рівнями в стані $2p^53s$ при $E_0=20\text{eV}$ (a); $E_0=100\text{eV}$).

Аналізуючи представлені результати, очевидним є висновок: при меншій енергії налітаючого електрона, зокрема 20eV, узгодженість теоретичних і експериментальних даних є значно гіршою, ніж, скажімо, при 100 eV.

Методи типу UFOMBT, DWBA, RDWA, розроблені як методи пертурбаційного типу і розраховані на проміжні енергії, при малій енергії електрона 20 eV не дають прийняттого опису експерименту.

Наш енергетичний підхід, а також R-матричний метод в цьому сенсі є значно більш точними і цілком прийнято описують експериментальні дані. Відзначимо, що ЕП виявляється точнішим від R-матричного методу внаслідок більш коректного урахування кореляційних ефектів, використання більш повних базисів релятивістських орбіталей (оптимізоване 1QP одноквазічастинкове уявлення).

Для будь-якої прецизійної теорії релятивістських електрон-іон-атомних систем фундаментальне значення має послідовне і коректне урахування багаточастинкових, міжквазічастинкових, обмінно-кореляційних (обмінно-поляризаційних) ефектів, а також якість згенерованих у нульовому наближенні будь-якої теорії базисів релятивістських хвильових функцій, з чим безпосередньо є пов'язаним і виконання при дослідженні процесів розсіювання та зіткнень в електрон-іон-атомних системах фундаментального принципу калібрувальної інваріантності.

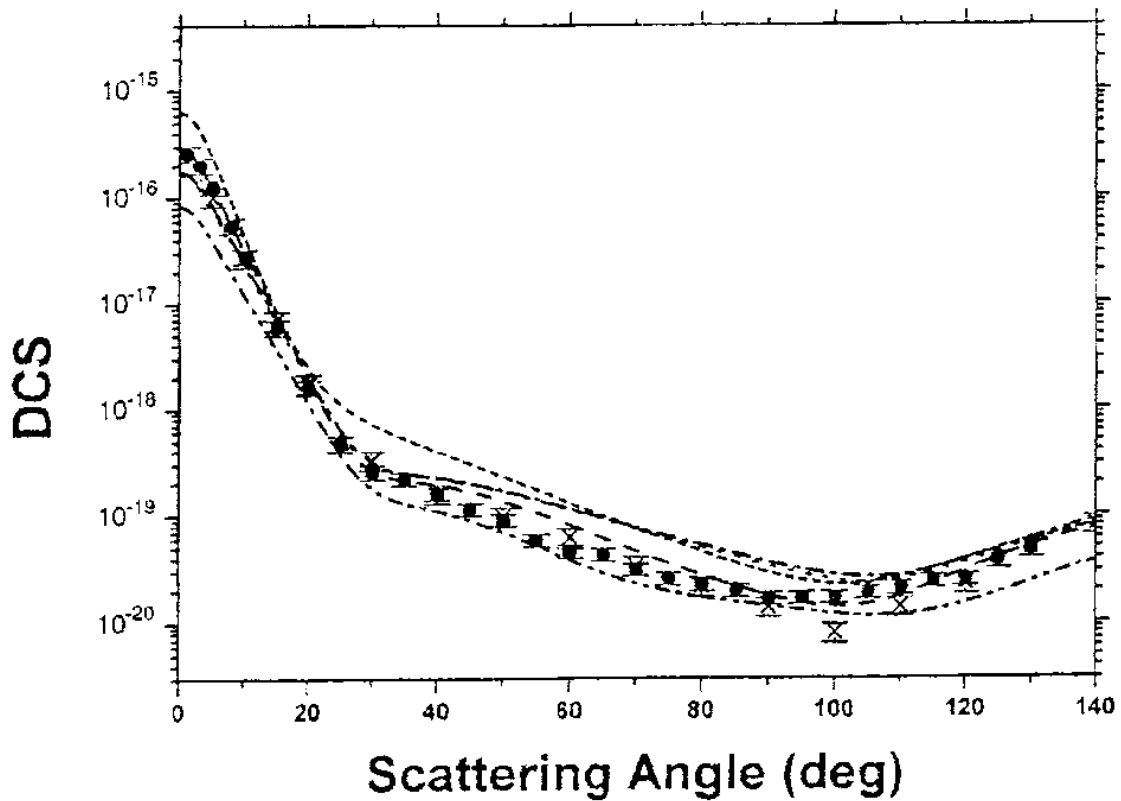


Рис. 5.1а. Диференціальні перерізи збудження (DCS; scattering angle - кут розсіювання) електроним ударом атома Ne (підсумовані по рівнях в стані $2p^53s$ при $E_0=20\text{eV}$ (а). Експеримент: дані Какоо et al [13] із зазначенням похибки; дані Register et al, Brunger et al. Теорія: наша робота, ЕП+ КЕД ТЗ (QEDPT-EA); R-матричний метод (R-MATR); метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBT); наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA); релятивістське наближення перекручених хвиль с 1-конфігураційних і багатоконфігураційних хвильових функцій основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (з [23, 211, 222, 228])

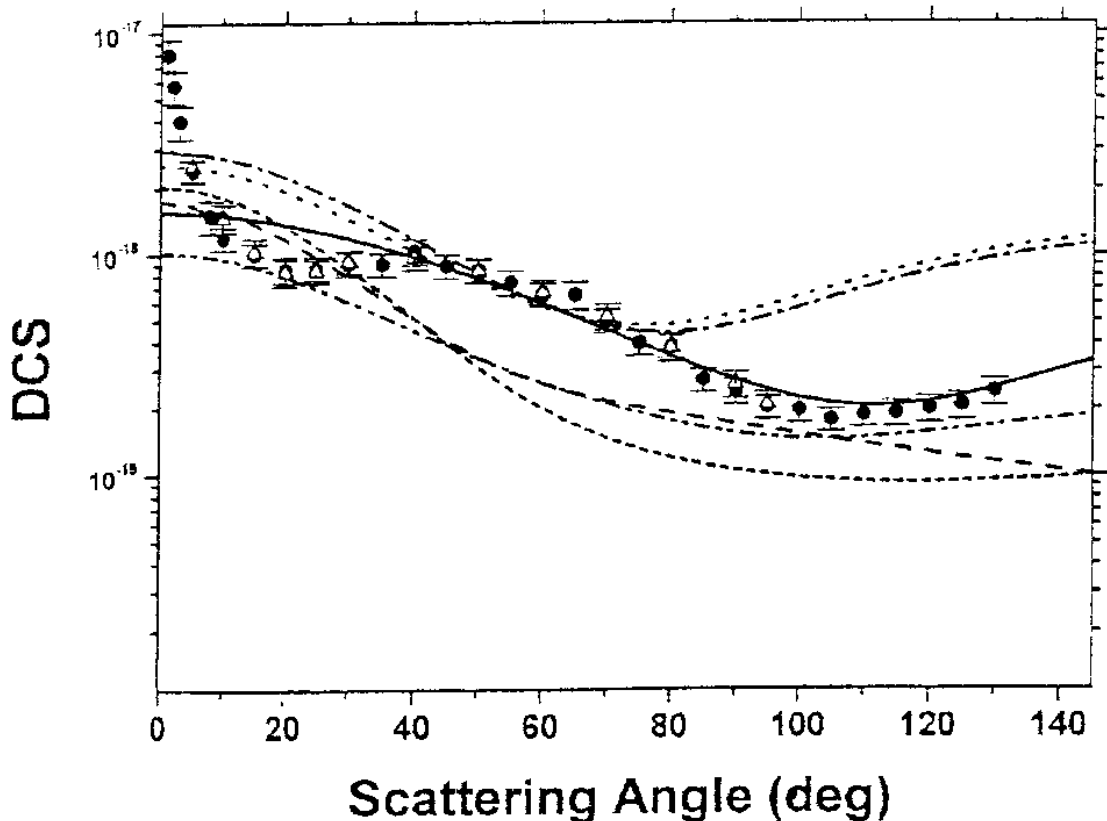


Рис. 5.1б. Диференціальні перерізи збудження (DCS; scattering angle – кут розсіювання) електроним ударом атома Ne (підсумовані за рівнями в стані $2p53s$ при $E_0=20\text{eV}$ (а); $E_0=100\text{eV}$. Експеримент: дані Kako et al [13] із зазначенням похибки. Дані Register et al; Brunger et al; Теорія: наша робота, ЕП+ КЕД ТЗ (QEDPT-EA); R-матричний метод (R-MATR); метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBT); наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA); релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційних і багатоконфігураційних хвильових функцій основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (з [23, 211, 222, 228])

На (рис. 5.2а,б) наведені дані про диференціальні перерізи збудження електроним ударом атома Ne в стані (с) $2p53s[1/2]^0_0$; (d) $2p53s[1/2]^0_1$ при $E_0=20\text{eV}$; Експеримент: дані Kako et al із зазначенням похибки; дані Register et al; Brunger et al; Теорія: наша робота, ЕП+ КЕД ТЗ (QEDPT-EA); R-матричний метод (R-MATR); метод ТЗ з урахуванням першого порядку

(UFOMBТ); наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA); релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (з [23, 211, 222, 228]).

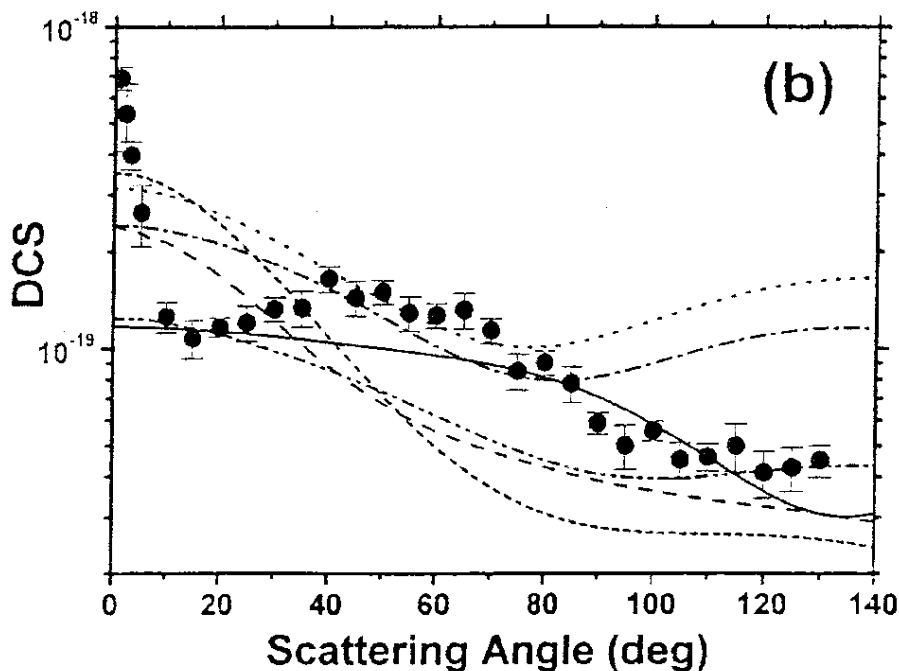


Рис. 5.2а. Диференціальні перерізи збудження електроним ударом атома Ne в стан (а) $2p53s[3/2]_1$ при $E_0=20\text{ЕВ}$; Експеримент: дані Какоо et al [23] із зазначенням похибки; дані Register et al; Brunger et al; Теорія: наша робота, ЕП+КЕД ТЗ (QEDPT-EA); R матричний метод (R-MATR); метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBТ); наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA); наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA); релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багато конфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) (з [23, 211, 222, 228])

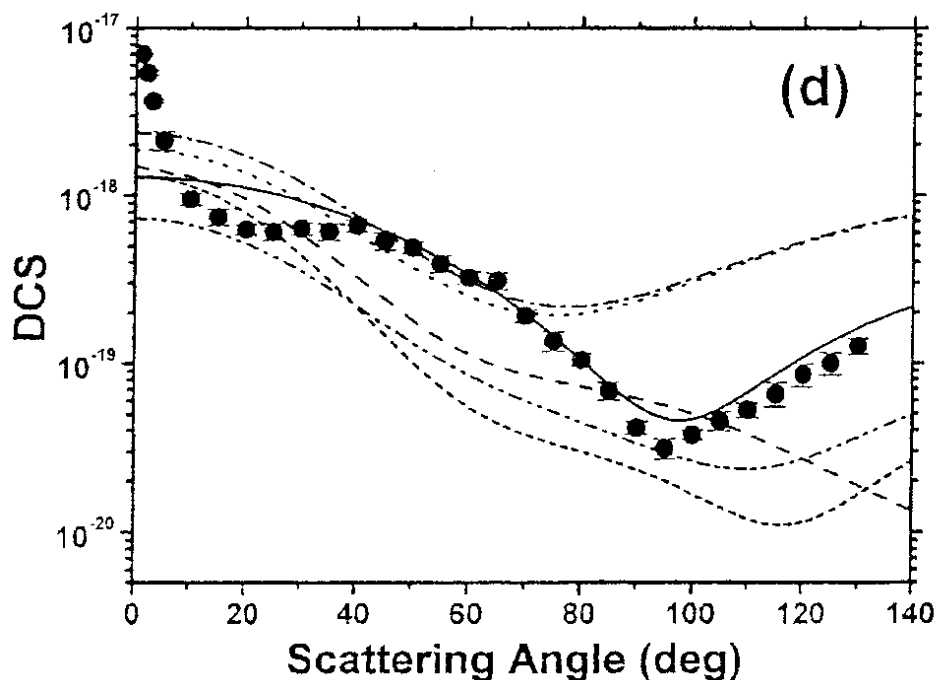
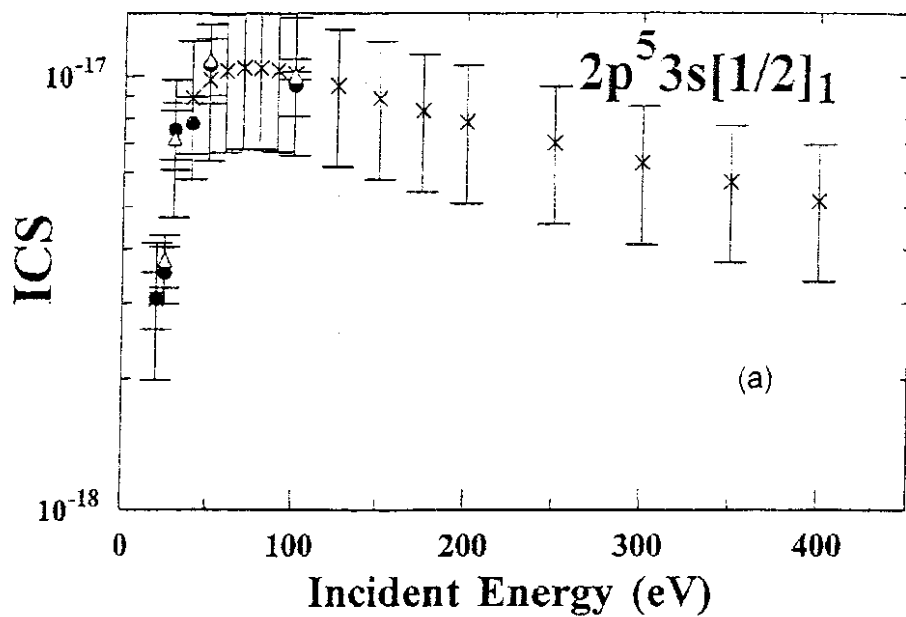
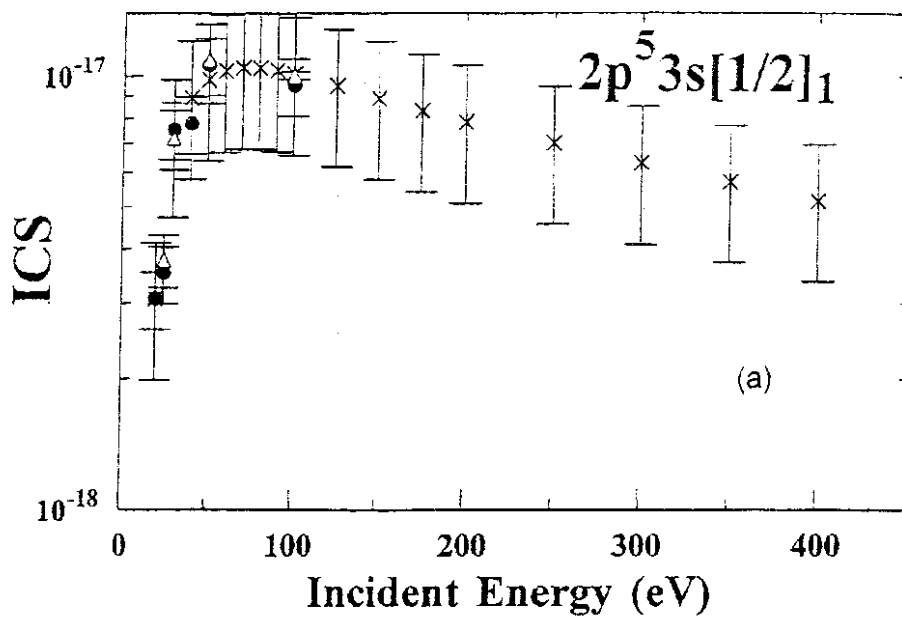


Рис. 5.26 Диференціальні перерізи збудження електроним ударом атома Ne в стані (b) $2p53s[1/2]^{\circ}_1$ при $E_0=20\text{eV}$; Експеримент: дані Kakoо et al [23] із зазначенням похибки; дані Register et al; Brunger et al; Теорія: див. підпис до (рис 5.2a)

Зазначений висновок особливо яскраво демонструє (рис. 5.2a) з якого видно, що методи типу UFOMBT, DWBA, RDWA дають великі похибки при описі всіх перерізів, а R-матричний метод, особливо при малих кутах розсіювання дає вкрай високу похибку. Провал в перерізі, який має місце при куті розсіювання 20° імітується (не повною мірою) тільки в рамках КЕД підходу. В разі енергії налітаючого електрона 100 eV ситуація при порівнянні експерименту з різними теоріями радикально поліпшується. В цьому випадку узгодженість між даними різних теорій, включаючи і теорії типу UFOMBT, DWBA, RDWA, а також R-матричний метод і наш КЕД ЕП (див. рис. 5.1б), спостерігається більш-менш прийнятною. У таблиці 5.1 представлені наші теоретичні, а також експериментальні (Khaоо et al [23]) значення інтегральних перерізів (у 10^{-19}cm^2) збудження електрона ударом атома Ne в стані $2p53s[3/2]^{\circ}_2$, $2p53s[1/2]^{\circ}_0$ конфігурації $2p^53s$, а на (рис. 5.3) – теоретичні (наші дані), а також дані різних експериментів для значень інтегральних перерізів збудження електрона ударом атома Ne.



(a)



(б)

Рис. 5.3 а,б. Теоретичні (наші дані) і дані різних експериментів для значень інтегральних перерізів збудження електроним ударом атома Ne в стані (а) $2p^5 3s[1/2]_1$; (б) $2p^5 3s[3/2]_1$; Експеримент: дані Kakoo et al [23] із зазначенням похибки; дані Register et al [13]; Kanik et al [13]

В останньому випадку, зокрема, при енергії $E_0=100$ еВ зазначені методи дають різні степені точності, проте, фізично адекватний опис перерізів.

Таблиця 5.1 – Теоретичні (наша робота) і експериментальні (Khakoo et al) значення інтегральних перерізів збудження електроним ударом атома Ne в стані $2p^53s[3/2]o_2$, $2p^53s[1/2]o_0$ при різних енергіях налітаючого електрона

E_0 , еВ	$2p^53s[3/2]o_2$ Експ.	$2p^53s[1/2]o_0$ Експ.	$2p^53s[3/2]o_2$ КЕД -ЕП	$2p^53s[1/2]o_0$ КЕД -ЕП
20	14.6	2.7	14.9	2.9
30	9.7	1.7	9.9	1.8
40	4.9	1.1	5.1	1.15
50	4.0	0.9	3.9	0.8
100	0.5	0.1	0.4	0.13

В цілому, аналіз отриманих теоретичних даних з диференціальних і інтегральних перерізів збудження електроним ударом різних термів конфігурації $2p^53s$ показує, що розроблений нами КЕД ЕП дає абсолютно прийнятний і адекватний опис всієї сукупності експериментальних даних, як в області малої енергії налітаючого електрона (повільні зіткнення), де стандартні теорії типу UFOMBT, DWBA, RDWA дають неадекватний, навіть якісно невірний опис перерізів, а R-матричний метод дає гіршу точність, ніж наш, так і в області великих енергій.

5.3 Перерізи збудження і сили електрон-іонних зіткнень для Ne-подібного іона Kr

В останні роки цей іон став об'єктом інтенсивного експериментального і теоретичного вивчення (див., напр., [3, 20]). У таблиці 5.2 а,б наведені енергії (в Ry) різних збуджених станів, відраховані від енергій основного стану. Наведені результати нашого розрахунку, розрахунку методом БКДФ і рекомендовані NIST компілюючі і експериментальні значення ([physics.nist.gov/PhysRefDat:a/contents-atomic.html](http://physics.nist.gov/PhysRefDat/a/contents-atomic.html)) [20, 199].

Слід зазначити, що розрахунок спектрів неон-подібних іонів є вкрай складним завданням через необхідність обов'язкового урахування

релятивістських, обмінно-кореляційних ефектів (радіаційні поправки при даному заряді ядра не є істотними), зокрема має місце сильна конфігураційна взаємодія, а роль ефектів поляризації остова і екранування зовнішніх квазічастинок (поправки другого і вищих порядків ТЗ) є вкрай істотною.

Таблиця 5.2а – Енергії (в Ry) збуджених станів Kr²⁶⁺, відраховані від енергії основного стану (стану 1-15)

No.	Конф.	Рівень (j-j)	КЕД ТЗ	БКДФ	Експ.
1	2s ² 2p ⁶	¹ S ₀	0000	0.000	0.000
2	2s ² 2p ⁵ 3s	(3/2,1/2) ₂	121.201	121.192	121.204
3	2s ² 2p ⁵ 3s	(3/2,1/2) ₁	121.438	121.426	121.441
4	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,1/2) ₁	124.963	124.964	124.966
5	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,1/2) ₂	125.192	125.200	125.194
6	2s ² 2p ⁵ 3s	(1/2,1/2) ₀	121.594	125.303	125.284
7	2s ² 2p ⁵ 3s	(1/2,1/2) ₁	121.672	125.430	125.400
8	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,3/2) ₃	126.038	126.072	126.041
9	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,3/2) ₁	126.082	126.100	126.084
10	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,3/2) ₂	126.395	126.410	126.397
11	2s ² 2p ⁵ 3p	(3/2,3/2) ₀	127.614	127.588	127.618
12	2s ² 2p ⁵ 3p	(1/2,1/2) ₁	129.172	129.225	129.175
13	2s ² 2p ⁵ 3p	(1/2,3/2) ₁	130.190	130.241	130.192
14	2s ² 2p ⁵ 3p	(1/2,3/2) ₂	130.286	130.347	130.280
15	2s ² 2p ⁵ 3p	(1/2,1/2) ₀	130.749	130.908	130.742

Ми провели розрахунок положень рівнів енергій в спектрі іона кріптоні, детальний аналіз і порівняння з даними NIST і результатами БКДФ. Наш аналіз показує, що і таблиці NIST, і результати БКДФ містять помилку у визначенні положення енергії рівнів конфігурації 2s²2p⁵3s, а саме,

термів $(1/2,1/2)_0$, $(1/2,1/2)_1$. Аналогічна помилка має місце і для рівня $(3/2,3/2)_0$ конфігурації $2s^22p^53d$.

Причина - вказані вище сильні конфігураційні взаємодії. Слід нагадати, що метод БКДФ, незважаючи на всі свої переваги, при використанні в розрахунках спектрів складних систем може давати помилку до 20-40 тисяч зворотних см ($\sim 2-4Ry$) [155].

Відомі таблиці NIST, як правило, створюються на базі експериментальних даних, шляхом компіляції значень енергії рівнів сусідніх іонів або шляхом додаткового БКДФ, або останнім часом мега-БКДФ розрахунку.

Наші результати розрахунку в рамках КЕД ТЗ в ряді випадків добре узгоджуються з експериментальними даними (за винятком згаданих вище термів) і значно перевершують за точністю дані БКДФ розрахунку. У світлі сказаного значний інтерес становлять оцінка сил осциляторів електрично-дипольних переходів між рівнями зазначеними в таблиці 5.2б.

Таблиця 5.2б – Енергії (в Ry) збуджених станів Kr^{26+} , відраховані від енергії основного стану (стану 16-37)

16	$2s^22p^53d$	$(3/2,3/2)_0$	130.613	130.745	130.694
17	$2s^22p^53d$	$(3/2,3/2)_1$	130.941	130.936	130.945
18	$2s^22p^53d$	$(3/2,3/2)_3$	131.170	131.232	131.173
19	$2s^22p^53d$	$(3/2,5/2)_2$	131.229	131.266	131.233
20	$2s^22p^53d$	$(3/2,5/2)_4$	131.211	131.274	131.214
21	$2s^22p^53d$	$(3/2,3/2)_2$	131.442	131.496	131.445
22	$2s^22p^53d$	$(3/2,5/2)_3$	131.663	131.723	131.664
23	$2s^22p^53d$	$(3/2,5/2)_1$	132.474	132.551	132.476
24	$2s^22p^53d$	$(1/2,3/2)_2$	135.257	135.304	135.260
25	$2s^22p^53d$	$(1/2,5/2)_2$	135.422	135.522	135.426
26	$2s^22p^53d$	$(1/2,5/2)_3$	135.529	135.640	135.531
27	$2s^22p^53d$	$(1/2,3/2)_1$	136.061	136.226	136.065
28	$2s2p^63s$	$(1/2,1/2)_1$	138.654	-	-

Продовження таблиці 5.2б

29	$2s2p^63s$	$(1/2,1/2)_0$	139.387	-	
30	$2s2p^63p$	$(1/2,1/2)_0$	142.596	-	
31	$2s2p^63p$	$(1/2,1/2)_1$	142.703	-	-
32	$2s2p^63p$	$(1/2,3/2)_2$	143.614	-	-
33	$2s2p^63p$	$(1/2,3/2)_1$	143.828	144.137	143.835
34	$2s2p^63d$	$(1/2,3/2)_1$	148.431	148.814	
35	$2s2p^63d$	$(1/2,3/2)_2$	148.501	148.884	
36	$2s2p^63d$	$(1/2,5/2)_3$	148.674	149.027	
37	$2s2p^63d$	$(1/2,5/2)_2$	149.287	149.623	149.295

В таблиці 5.3 наведені розраховані нами (ТЗ-ДКШ) відповідні значення усереднених сил осциляторів gf для ряду е-переходів в спектрі іона $Kr26+$. Також представлені рекомендовані емпіричні значення і дані розрахунку методом БКДФ [20,199]. Для обох теорій (БКДФ і ТЗ-ДКШ) визначені значення сил осциляторів з використанням оператора переходу в формі довжини і швидкості L/V (показник урахування обмінно-кореляційних ефектів в розрахунках відповідних термів і сил осциляторів). В цьому випадку аналіз показує, що і наші дані прийнятно узгоджуються з даними, рекомендованими NIST, і в деякій мірі мають більш високу точність, ніж дані БКДФ

Таблиця 5.3 – Сили осциляторів gf для ряду е-переходів зі збудженого стану (вказані № термів) в основний стан в спектрі іона $Kr26+$.

терм	Перехід	БКДФ	$L/V_{дф}$	ТЗ-ДКШ	$L/V_{кед}$	gf (реком.)
3	$2s^22p^53s (3/2,1/2)_1$	1.34×10^{-1}	0.98	1.27×10^{-1}	1.	-
7	$2s^22p^53s (1/2,1/2)_1$	8.45×10^{-2}	0.98	8.35×10^{-2}	0.99	-
17	$2s^22p^53d (3/2,3/2)_1$	6.41×10^{-3}	0.95	7.77×10^{-3}	1.00	7.79×10^{-3}
23	$2s^22p^53d (3/2,5/2)_1$	1.55×10^0	0.96	1.53×10^0	1.00	1.54×10^0

Продовження таблиці 5.3

терм	Перехід	БКДФ	$L/V_{\text{дф}}$	ТЗ-ДКШ	$L/V_{\text{КЕД}}$	gf (реком.)
27	$2s^2 2p^5 3d (1/2, 3/2)_1$	1.93×10^0	0.96	1.94×10^0	0.99	1.94×10^0
31	$2s 2p^6 3p (1/2, 1/2)_1$	8.97×10^{-2}	1.00	8.81×10^{-2}	1.00	8.75×10^{-2}
33	$2s 2p^6 3p (1/2, 3/2)_1$	3.05×10^{-1}	1.00	3.05×10^{-1}	1.00	3.05×10^{-1}

Слід підкреслити важливість коректного урахування найскладніших обмінно-кореляційних ефектів (поляризація остова, екранування), які наприклад, у БКДФ адекватно не враховані. Використання калібрувальних інваріантних базисів (як в КЕД ТЗ) орбіталей є також вкрай важливим аспектом теоретичної процедури.

Зауважимо, що значення сил осциляторів для зазначених в таблиці 5.3 переходів без урахування ефектів поляризації остова та інших кореляційних внесків виявляються вищими від наведених наших даних в середньому на 20-22%.

Цей ефект добре відомий в спектроскопії радіаційних переходів (див., напр., [1-5, 103]), але ми не будемо детально на цьому зупинятися.

У таблиці 5.4-5.7 наведені отримані нами в рамках КЕД ЕП значення перерізів збудження 37 станів іона $\text{Kr}26^+$ з основного стану (енергія налітаючого електрона 4.082 кеВ та 6.80 кеВ).

Для порівняння в таблиці 5.4 та 5.6 наведені також дані (для перших 26 збуджених станів) розрахунку R-матричним методом у наближенні Брейта-Паулі Gupta et al (BP-RM), в релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA), R-матричним методом в наближенні ДФ Griffin et al (MCDF-RM) [20, 165, 166, 211, 222].

Таблиця 5.4 – Значення перерізів збудження електроним ударом $\text{Kr}26^+$ збуджених станів (1-26) при енергії налітаючого електрона 4.082 кеВ

Рівень	BP-R-M	RDWA	DF-RM	Наша робота
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_2$	8.94(-23)	8.80(-23)	9.98(-23)	9.75(-23)
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_1$	5.22(-22)	6.63(-22)	7.29(-22)	7.05(-22)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_1$	1.60(-22)	1.73(-22)	1.85(-22)	1.80(-22)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_2$	4.25(-22)	4.72(-22)	4.88(-22)	4.81(-22)

Продовження таблиці 5.4

Рівень	BP-R-M	RDWA	DF-RM	Наша робота
$2p^53s (1/2,1/2)_0$	1.90(-23)	1.76(-23)	2.01(-23)	1.97(-23)
$2p^53s (1/2,1/2)_1$	2.99(-22)	4.16(-22)	4.52(-22)	4.38(-22)
$2p^53p (3/2,3/2)_3$	2.30(-22)	2.20(-22)	2.34(-22)	2.32(-22)
$2p^53p (3/2,3/2)_1$	1.10(-22)	1.06(-22)	1.20(-22)	1.17(-22)
$2p^53p (3/2,3/2)_2$	3.81(-22)	3.90(-22)	4.17(-22)	4.13(-22)
$2p^53p (3/2,3/2)_0$	2.06(-21)	2.05(-21)	2.02(-21)	1.98(-21)
$2p^53p (1/2,1/2)_1$	9.44(-23)	9.09(-23)	1.01(-22)	9.98(-23)
$2p^53p (1/2,3/2)_1$	1.11 (-22)	1.11(-22)	1.21(-22)	1.18(-22)
$2p^53p (1/2,3/2)_2$	3.81(-22)	4.31(-22)	4.41(-22)	4.37(-22)
$2p^53d (3/2,3/2)_0$	9.85(-23)	9.97(-23)	1.04(-22)	1.01(-22)
$2p^53p (1/2,1/2)_0$	5.48(-21)	5.40(-21)	5.08(-21)	5.03(-21)
$2p^53d (3/2,3/2)_1$	3.08(-22)	3.11(-22)	3.34(-22)	3.30(-22)
$2p^53d (3/2,3/2)_3$	4.75(-22)	4.66(-22)	4.78(-22)	4.71(-22)
$2p^53d (3/2,5/2)_2$	2.92(-22)	2.90(-22)	3.00(-22)	2.98(-22)
$2p^53d (3/2,5/2)_4$	3.11 (-22)	2.99(-22)	3.17(-22)	3.14(-22)
$2p^53d (3/2,3/2)_2$	1.33(-22)	1.26(-22)	1.42(-22)	1.39(-22)
$2p^53d (3/2,5/2)_3$	3.67(-22)	3.61(-22)	3.62(-22)	3.60(-22)
$2p^53d(3/2,5/2)_1$	1.30(-20)	1.46(-20)	1.45(-20)	1.42(-20)
$2p^53d (1/2,3/2)_2$	1.55(-22)	1.47(-22)	1.58(-22)	1.57(-22)
$2p^53d (1/2,5/2)_2$	2.44(-22)	2.32(-22)	2.44(-22)	2.42(-22)
$2p^53d (1/2,5/2)_3$	4.40(-22)	4.25(-22)	4.31(-22)	4.29(-22)
$2p^53d (1/2,3/2)_2$	1.64(-20)	1.46(-20)	1.72(-20)	1.69(-20)

У таблиці 5.5, 5.7 наведені тільки наші результати по перерізах електрон-іонних зіткнень з порушенням інших розглянутих нами станів, зокрема станів 27-37 (див. таблицю 5.2б). Відзначимо, що в літературі не наводяться будь-які дані по перерізах збудження станів 27-37, тож представлені в роботі дані можуть розглядатися як визначені вперше.

Таблиця 5.5 – Значення перерізів збудження електронним ударом з основного стану Kr26 + у збуджені стани (27-37) при енергії налітаючого електрона 4.082 кеВ (дані отримані в нашій роботі)

27	$2s^2 2p^5 3d$	$(1/2, 3/2)_1$	1.34(-19)
28	$2s 2p^6 3s$	$(1/2, 1/2)_1$	7.82(-23)
29	$2s 2p^6 3s$	$(1/2, 1/2)_0$	2.98(-21)
30	$2s 2p^6 3p$	$(1/2, 1/2)_0$	4.35(-23)
31	$2s 2p^6 3p$	$(1/2, 1/2)_1$	1.56(-22)
32	$2s 2p^6 3p$	$(1/2, 3/2)_2$	1.77(-22)
33	$2s 2p^6 3p$	$(1/2, 3/2)_1$	2.58(-21)
34	$2s 2p^6 3d$	$(1/2, 3/2)_1$	1.72(-21)
35	$2s 2p^6 3d$	$(1/2, 3/2)_2$	2.98(-21)
36	$2s 2p^6 3d$	$(1/2, 5/2)_3$	5.16(-21)
37	$2s 2p^6 3d$	$(1/2, 5/2)_2$	8.84(-20)

Аналізуючи представлені дані, слід звернути увагу на те, що в методах BP-RM і релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA) використані укорочені базиси, через що, як зазначалося також і Griffin et al [20], дані по перерізах збудження станів іона криптону виявляються сильно заниженими. З іншого боку, в R-матричному методі, хоча і використовується більш розширений базис орбіталей, ефект конфігураційної взаємодії виявляється врахованим неповною мірою. Звичайно, розглянуті нами випадки енергії налітаючого електрона є досить сприятливими з точки зору проблем урахування резонансів і відповідних стрибків перерізів.

Таблиця 5.6 – Значення перерізів збудження електронним ударом Kr26 + збуджених станів (1-26) при енергії налітаючого електрона 6.80 кеВ

Рівень	BP-R-M	RDWA	DF-RM	Наша робота
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_2$	2.08(-23)	2.05(-23)	2.73(-23)	2.68(-23)
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_1$	4.87(-22)	5.43(-22)	7.04(-22)	6.82(-22)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_1$	3.87(-23)	4.11(-23)	5.26(-23)	5.01(-23)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_2$	2.92(-22)	2.52(-22)	3.14(-22)	3.03(-22)
$2p^5 3s (1/2, 1/2)_0$	4.37(-24)	4.40(-24)	5.53(-24)	5.39(-24)
$2p^5 3s (1/2, 1/2)_1$	2.60(-22)	3.18(-22)	4.24(-22)	4.11(-22)
$2p^5 3p (3/2, 3/2)_3$	5.22(-23)	4.84(-23)	6.21(-23)	5.93(-23)

Продовження таблиці 5.6

Рівень	BP-R-M	RDWA	DF-RM	Наша робота
$2p^53p (3/2,3/2)_1$	2.61(-23)	2.35(-23)	3.32(-23)	3.08(-23)
$2p^53p (3/2,3/2)_2$	2.84(-22)	2.16(-22)	2.80(-22)	2.76(-22)
$2p^53p (3/2,3/2)_0$	9.69(-22)	1.08(-21)	1.29(-21)	1.14(-21)
$2p^53p (1/2,1/2)_1$	2.14(-23)	2.05(-23)	2.69(-23)	2.56(-23)
$2p^53p (1/2,3/2)_1$	2.60(-23)	2.49(-23)	3.30(-23)	3.19(-23)
$2p^53p (1/2,3/2)_2$	2.51(-22)	2.32(-22)	2.84(-22)	2.72(-22)
$2p^53d (3/2,3/2)_0$	2.04(-23)	2.05(-23)	2.58(-23)	2.44(-23)
$2p^53p (1/2,1/2)_0$	3.27(-21)	2.83(-21)	3.27(-21)	3.21(-21)
$2p^53d (3/2,3/2)_1$	9.15(-23)	9.09(-23)	1.20(-22)	1.13(-22)
$2p^53d (3/2,3/2)_3$	2.39(-22)	2.26(-22)	2.76(-22)	2.65(-22)
$2p^53d (3/2,5/2)_2$	5.86(-23)	5.72(-23)	7.17(-23)	7.01(-23)
$2p^53d (3/2,5/2)_4$	6.00(-23)	5.72(-23)	7.28(-23)	7.02(-23)
$2p^53d (3/2,3/2)_2$	2.42(-23)	2.20(-23)	3.15(-23)	2.98(-23)
$2p^53d (3/2,5/2)_3$	2.02(-22)	1.88(-22)	2.29(-22)	2.16(-22)
$2p^53d(3/2,5/2)_1$	9.74(-21)	9.93(-21)	1.20(-20)	1.14(-20)
$2p^53d (1/2,3/2)_2$	2.89(-23)	2.79(-23)	3.58(-23)	3.43(-23)
$2p^53d (1/2,5/2)_2$	4.77(-23)	4.55(-23)	5.74(-23)	5.52(-23)
$2p^53d (1/2,5/2)_3$	2.26(-22)	2.11(-22)	2.58(-22)	2.46(-22)
$2p^53d (1/2,3/2)_1$	1.21(-20)	1.19(-20)	1.40(-20)	1.33(-20)

Таблиця 5.7 – Значення перерізів збудження електронним ударом з основного стану $Kr26^+$ збуджених станів (27-37) при енергії налітаючого електрона 6.80 КЕВ (наші дані)

27	$2s^22p^53d$	$(1/2,3/2)_1$	3.71(-20)
28	$2s2p^63s$	$(1/2,1/2)_1$	1.98(-23)
29	$2s2p^63s$	$(1/2,1/2)_0$	7.16(-22)
30	$2s2p^63p$	$(1/2,1/2)_0$	1.03(-23)
31	$2s2p^63p$	$(1/2,1/2)_1$	3.96(-23)

Продовження таблиці 5.7

32	2s2p ⁶ 3p	(1/2,3/2) ₂	4.32(-23)
33	2s2p ⁶ 3p	(1/2,3/2) ₁	6.14(-22)
34	2s2p ⁶ 3d	(1/2,3/2) ₁	5.64(-22)
35	2s2p ⁶ 3d	(1/2,3/2) ₂	7.29(-22)
36	2s2p ⁶ 3d	(1/2,5/2) ₃	1.08(-21)
37	2s2p ⁶ 3d	(1/2,5/2) ₂	2.25(-20)

Однак в будь-якому випадку облік обмінно-кореляційних і релятивістських ефектів є вкрай критичним. Сказане пояснить різницю всіх наведених теоретичних даних і за аналогією зрозглянутими в попередніх підрозділах результатами розрахунку перерізів і сил електрон-іонних зіткнень можна вважати отримані в роботі результати є найбільш точними.

У таблиці 5.8 представлені теоретичні дані по ефективних силах зіткнень, відповідальних за порушення станів Ne-подібного іона криптону Kr26+ (Стану 1-26; див. таблицю 5.2) при різних температурах $T=5 \times 10^6$ - 3×10^7 К та електронній густини (типова електронна щільність в плазмі токамака) $n_e=10^{14} \text{см}^{-3}$. Для порівняння в цій таблиці наведені також і дані (для перших 26 збуджених станів) розрахунку R-матричним методом у наближенні ДФ Griffin et al (DF-RM) [20], відповідні температури $T=5 \times 10^6$ К, порівняння обох теоретичних розрахунків демонструє розумну кореляцію, однак з причин, описаних вище, при аналізі відповідних перерізів електрон-іонних зіткнень, отримані в нашій роботі дані є більш точними.

Таблиця 5.8 – Ефективні сили зіткнень Kr26+ при різних T і густини 10^{14}см^{-3} (нд-наші дані)

Терм	$T=5 \times 10^6$ К DF-RM	$T=5 \times 10^6$ К ЕП (нд)	$T=1 \times 10^7$ К ЕП(нд)	$T=3 \times 10^7$ К ЕП (нд)
2p ⁵ 3s (3/2,1/2) ₂	8.29(-3)	8.13(-3)	4.56(-3)	1.81(-3)
2p ⁵ 3s (3/2,1/2) ₁	9.36(-3)	9.19(-3)	5.65(-3)	3.82(-3)
2p ⁵ 3p (3/2,1/2) ₁	3.49(-3)	3.38(-3)	2.25(-3)	1.13(-3)
2p ⁵ 3p (3/2,1/2) ₂	4.30(-3)	4.18(-3)	3.04(-3)	2.22(-3)

Продовження таблиці 5.8

Терм	T=5×10 ⁶ К DF-RM	T=5×10 ⁶ К ЕП (нд)	T=1×10 ⁷ К ЕП(нд)	T=3×10 ⁷ К ЕП (нд)
2p ⁵ 3s (1/2,1/2) ₀	1.32(-3)	1.21(-3)	7.51(-4)	2.98(-4)
2p ⁵ 3s (1/2,1/2) ₁	7,69(-3)	7,56(-3)	4,62(-3)	2.73(-3)
2p ⁵ 3p (3/2,3/2) ₃	4.03(-3)	3.89(-3)	2.81(-3)	1.44(-3)
2p ⁵ 3p (3/2,3/2) ₁	3.14(-3)	3.01(-3)	2.00(-3)	9.82(-4)
2p ⁵ 3p (3/2,3/2) ₂	3.36(-3)	3.12(-3)	2.43(-3)	1.78(-3)
2p ⁵ 3p (3/2,3/2) ₀	8.67(-3)	8.49(-3)	7.67(-3)	7.14(-3)
2p ⁵ 3p (1/2,1/2) ₁	2.69(-3)	2.54(-3)	1.62(-3)	8.33(-4)
2p ⁵ 3p (1/2,3/2) ₁	2.80(-3)	2.72(-3)	1.81(-3)	9.45(-4)
2p ⁵ 3p (1/2,3/2) ₂	3.27(-3)	3.16(-3)	2.53(-3)	1.86(-3)
2p ⁵ 3d (3/2,3/2) ₀	1.24(-3)	1.13(-3)	9.72(-4)	5.69(-4)
2p ⁵ 3p (1/2,1/2) ₀	1.71(-2)	1.58(-2)	1.63(-2)	1.64(-2)
2p ⁵ 3d (3/2,3/2) ₁	3.45(-3)	3.31(-3)	2.68(-3)	1.61(-3)
2p ⁵ 3d (3/2,3/2) ₃	3.80(-3)	3.67(-3)	2.92(-3)	2.08(-3)
2p ⁵ 3d (3/2,5/2) ₂	4.13(-3)	3.96(-3)	3.07(-3)	1.73(-3)
2p ⁵ 3d (3/2,5/2) ₄	4.48(-03)	4.32(-03)	3.35(-03)	1.82(-03)
2p ⁵ 3d (3/2,3/2) ₂	3.08(-03)	2.97(-03)	2.13(-03)	9.97(-04)
2p ⁵ 3d (3/2,5/2) ₃	3.20(-03)	3.02(-03)	2.42(-03)	1.63(-03)
2p ⁵ 3d (3/2,5/2) ₁	3.37(-02)	3.16(-02)	3.66(-02)	4.84(-02)
2p ⁵ 3d (1/2,3/2) ₂	2.41(-03)	2.30(-03)	1.71(-03)	9.89(-04)
2p ⁵ 3d (1/2,5/2) ₂	3.61(-03)	3.51(-03)	2.65(-03)	1.41(-03)

5.4 Спектроскопія за рахунок зіткнень Ne-подібного іона Ar⁸⁺

В таблицях 5.9 наведені енергії (у 10² см⁻¹) різних збуджених станів, відраховані від енергії основного стану. Наведено результати нашого

розрахунку, розрахунку методом БКДФ Bhatia-Doschek (DF-BD) [31], ТЗ з модельним нульовим наближенням Ivanov-Ivanova-Knight (ІК), Ivanov-Ivanova-Glushkov (ІГ) [12,25-27,85] і експериментальні NIST значення [199].

Таблиця 5.9 – Енергії (в 10^2 см^{-1}) різних збуджених станів Ar^{8+} (див. текст)

	Стан	J	Експ.	ІГ	ІГ	ІК	DF-BD	Наші дані
№	Базис	-	-	{2;3}	{2;3,4,S5}	{2;3,4}	Огранич.	{2;3,4,5,S6}
2	$2p_{3/2}3s_{1/2}$	2	20263	20385	20265	20368	20398	20264
3	$2p_{3/2}3s_{1/2}$	1	20331	20361	20336	20333	20396	20331
4	$2p_{1/2}3s_{1/2}$	0	20445	20454	20425	20444	20502	20445
5	$2p_{3/2}3s_{1/2}$	1	20518	20529	20508	20523	20586	20516
6	$2p_{3/2}3p_{3/2}$	1	21493	21589	21491	21498	21561	21492
9	$2p_{3/2}3p_{1/2}$	1	21767	21833	21771	21763	22704	21769
11	$2p_{1/2}3p_{1/2}$	1	21892	21947	21885	21889	21926	21888
12	$2p_{1/2}3p_{1/2}$	0	21925	21991	21938	21916	21971	21928
14	$2p_{3/2}3p_{3/2}$	1	21961	22002	21949	21955	21998	21964
15	$2p_{3/2}3p_{3/2}$	0	22639	22705	22698	22754	22685	22642
16	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	0	23494	23631	23503	23486	23551	23501
17	$2p_{3/2}3d_{3/2}$	1	23513	23651	23524	23507	235725	23516
23	$2p_{3/2}3d_{5/2}$	1	23810	23917	23832	23815	23888	23813
27	$2p_{1/2}3d_{3/2}$	1	24110	24188	24162	24187	24176	24119
28	$2s_{1/2}3s_{1/2}$	1	-	26397	26355	26397	-	26421
29	$2s_{1/2}3s_{1/2}$	0	-	26673	26647	26688	-	26699
30	$2s_{1/2}3p_{1/2}$	0	-	27853	27802	27802	-	27854
31	$2s_{1/2}3p_{1/2}$	1	-	27859	27808	27810	-	27861
33	$2s_{1/2}3p_{3/2}$	1	-	27958	27907	27927	-	27977
34	$2p_{3/2}3s_{1/2}$	1	-	29779	29673	29674	-	27928

Необхідно пояснити позначення базисів, застосованих в різних порівнюваних розрахунках. У самому скороченому базисі, позначеному як {2; 3}, розраховувалася секулярна матриця між 36 функціями двохквaziчастинкових станів $2l_j$; $3l_j$, збудованими з восьми орбіталей реальних станів {2; 3} - базису.

Базис $\{2; 3, 4\}$ включає додатково п'ять $4l_j$ ($l = 0, 1, 2$) одноквазічастинкових реальних станів, що визначаються з рівняння Дірака з «точними» (експеримент) одноелектронними енергіями. Далі, включаючи п'ять $5l_j$ - орбіталей реальних станів виходить одноквазічастинковий $\{2; 3, 4, 5\}$ - базис. Секулярна матриця для $\{2; 3, 4\}$ - та $\{2; 3, 4, 5\}$ - базисів відповідно містить 72 і 108 станів.

Базис $\{2; 3, 4, 5, 6S\}$ включає додатково f-орбіталі і штурмовські доповнення.

Спектр штурмовського доповнення може містити нескінченне, але таке число рішень, яке можливо обчислити.

Власне значення $= 1$ відповідає орбіталі реального стану, інші значення < 1 відповідають орбіталям штурмовського доповнення, $4l_j$, $5l_j$ або $6l_j$ з $l = 0, 1, 2, 3$ тобто кожна серія орбіталей реальних станів доповнюється лише однією штурмовською орбітальною тієї ж симетрії, яка генерує 36 додаткових віртуальних станів Ne-подібного іона.

Порівняння представлених теоретичних даних з експериментом показує, що метод БКДФ дає вкрай низьку точність опису шуканого спектра, розширення базису в рамках методу ТЗ з модельним нульовим наближенням Ivanov-Ivanova-Knight (ІК), Ivanov-Ivanova-Glushkov (ІІГ) дозволило збільшити точність розрахунку, однак, найбільш точні результати отримані на основі розробленої теорії в нашій роботі.

Якщо точність розрахунку методом БКДФ становить в середньому кілька тисяч зворотних см^{-1} , то наша теорія забезпечує точність порядку 1-3 сотні см^{-1} .

В таблицях 5.10, 5.11, 5.12 і 5.13 наведені розраховані нами (плазма θ -пінча: $n_e=10^{16} \text{ см}^{-3}$, $T_e=65\text{eV}$) значення сил електронних зіткнень для збудження з основного стану іона Ar ($E_0=0.425, 0.5, 0.750, 1.045 \text{ кеВ}$) на основі КЕД ЕП, а також результати аналогічних розрахунків методом ТЗ з модельним наближенням Кулева ІК-ІІГ [12, 25, 26] і ТЗ з обмеженим базисом (дані Корчевського) [211].

Таблиця 5.10 – Сили електронних зіткнень для збудження з основного стану Ne-подібного Ar (E - Енергія налітаючого електрона у eВ). Числа в дужках позначають мультиплікативну степінь десяти; переходи 1-20

Пер.	Рівень	J	E=425 [12,25]	E=425 [211]	E=425 Наша робота
5	2p _{1/2} 3s _{1/2}	1	1,468[-02]	1,508[-02]	1,515[-02]
6	2p _{3/2} 3p _{3/2}	1	6,300[-03]	6,412[-03]	6,442[-03]
7	2p _{3/2} 3p _{3/2}	3	7,219[-03]	7,349[-03]	7,374[-03]
8	2p _{3/2} 3p _{1/2}	2	6,238[-03]	6,368[-03]	6,382[-03]
9	2p _{3/2} 3p _{1/2}	1	2,173[-03]	2,280[-03]	2,302[-03]
10	2p _{3/2} 3p _{3/2}	2	6,770[-03]	6,810[-03]	6,964[-03]
11	2p _{1/2} 3p _{1/2}	1	2,029[-03]	2,138[-03]	2,315[-03]
12	2p _{1/2} 3p _{1/2}	0	1,604[-03]	1,724[-03]	1,893[-03]
13	2p _{1/2} 3p _{3/2}	2	8,090[-03]	8,214[-03]	8,242[-03]
14	2p _{1/2} 3p _{3/2}	1	1,793[-03]	1,922[-03]	1,989[-03]
15	2p _{3/2} 3p _{3/2}	0	8,607[-02]	8,715[-02]	8,801[-02]
16	2p _{3/2} 3d _{3/2}	0	2,807[-03]	2,914[-03]	2,997[-03]
17	2p _{3/2} 3d _{3/2}	1	8,829[-03]	8,973[-03]	9,065[-03]
18	2p _{3/2} 3d _{5/2}	2	1,296[-02]	1,423[-02]	1,503[-02]
19	2p _{3/2} 3d _{5/2}	4	9,348[-03]	9,512[-03]	9,615[-03]
20	2p _{3/2} 3d _{3/2}	3	7,349[-03]	7,515[-03]	7,609[-03]

Значення перерізів розраховані нами з використанням найбільш повного базису орбіталей з урахуванням рідбергівських і автоіонізаційних рідбергівських станів, в результаті їх точність вища, ніж точність представлених альтернативних результатів.

У таблицях 5.12, 5.13 наведено розрахований нами повний набір значень сил зіткнень для збудження з основного стану Ne-подібного іона Ar (енергія налітаючого електрона 0.5, 1.045 кеВ)

Далі розглянемо випадок зіткнень, який накачується за рахунок плазми неоподібних іонів, що представляє інтерес для генерації лазерного випромінювання в короткохвильовому діапазоні спектра, відповідно з параметрами - електронна температура $T_e=20-40\text{eV}$ і щільність $n_e=10^{19-20}\text{ см}^{-3}$.

Таблиця 5.11 – Сили електронних зіткнень для збудження з основного стану Ne-подібного Ar (E - Енергія налітаючого електрона у еВ). Числа в дужках позначають мультиплікативну степінь десяти; переходи 1-20.

Пер.	Уровень	J	E=750 [12,25]	E=750 [211]	E=750 Наст.
1-2	2s 2p	0	1,303[-03]	1,415[-03]	1,498[-03]
3	2p _{3/2} 3s _{1/2}	1	9,017[-03]	9,224[-03]	9,286[-03]
4	2p _{1/2} 3s _{1/2}	0	2,587[-04]	2,724[-04]	2,783[-04]
5	2p _{1/2} 3s _{1/2}	1	2,241[-02]	2,342[-02]	2,394[-02]
6	2p _{3/2} 3p _{3/2}	1	3,456[-03]	3,635[-03]	3,699[-03]
7	2p _{3/2} 3p _{3/2}	3	2,911[-03]	2,998[-03]	3,065[-03]
8	2p _{3/2} 3p _{1/2}	2	4,795[-03]	4,922[-03]	4,988[-03]
9	2p _{3/2} 3p _{1/2}	1	1,033[-03]	1,213[-03]	1,254[-03]
10	2p _{3/2} 3p _{3/2}	2	6,451[-03]	6,535[-03]	6,597[-03]
11	2p _{1/2} 3p _{1/2}	1	9,641[-04]	9,993[-04]	1,088[-03]
12	2p _{1/2} 3p _{1/2}	0	8,794[-04]	8,927[-04]	8,992[-04]
13	2p _{1/2} 3p _{3/2}	2	7,814[-03]	7,978[-03]	8,113[-03]
14	2p _{1/2} 3p _{3/2}	1	8,561[-04]	8,723[-04]	9,005[-04]
15	2p _{3/2} 3p _{3/2}	0	8,670[-02]	8,735[-02]	8,802[-02]
16	2p _{3/2} 3d _{3/2}	0	1,136[-03]	1,244[-03]	1,296[-03]
17	2p _{3/2} 3d _{3/2}	1	4,129[-03]	4,327[-03]	4,389[-03]
18	2p _{3/2} 3d _{5/2}	2	5,227[-03]	5,546[-03]	5,601[-03]
19	2p _{3/2} 3d _{5/2}	4	3,512[-03]	3,678[-03]	3,714[-03]
20	2p _{3/2} 3d _{3/2}	3	3,994[-03]	4,133[-03]	4,185[-03]

Цей випадок є значно складнішим порівняно з розглянутим вище випадком щодо проміжних енергії ~ кеВ.

Тут ключову роль відіграє вкрай точний облік рідбергівських, автоіонізаційних рідбергівських станів, а також станів континууму.

В таблиці 5.14 наведені теоретичні значення розрахованих нами швидкостей зіткнень збудження (ШЗЗ), зіткнень іонізації (ШЗІ), а також радіаційного розпаду (ШРР) станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму (див. підрозділ 2.5; рис. 2.3).

Таблиця 5.12 – Сили електронних зіткнень (наші дані) для збудження з основного стану Ne-подібного Ar (E - Енергія налітаючого електрона у eВ)

Пер.	Рівень	J	E=0.500	E=1.045
1-2	2s 2p	0	2,198[-03]	1,264[-03]
3	2p _{3/2} 3s _{1/2}	1	7,733[-03]	1,190[-02]
4	2p _{1/2} 3s _{1/2}	0	4,224[-04]	2,375[-04]
5	2p _{1/2} 3s _{1/2}	1	1,981[-02]	2,684[-02]
6	2p _{3/2} 3p _{3/2}	1	5,615[-03]	3,267[-03]
7	2p _{3/2} 3p _{3/2}	3	5,214[-03]	2,754[-03]
8	2p _{3/2} 3p _{1/2}	2	6,082[-03]	3,723[-03]
9	2p _{3/2} 3p _{1/2}	1	1,987[-03]	9,904[-04]
10	2p _{3/2} 3p _{3/2}	2	6,996[-03]	6,294[-03]
11	2p _{1/2} 3p _{1/2}	1	1,811[-03]	8,799[-04]
12	2p _{1/2} 3p _{1/2}	0	1,179[-03]	7,705[-04]
13	2p _{1/2} 3p _{3/2}	2	8,396[-03]	7,689[-03]
14	2p _{1/2} 3p _{3/2}	1	1,612[-03]	7,391[-04]
15	2p _{3/2} 3p _{3/2}	0	8,907[-02]	8,599[-02]
16	2p _{3/2} 3d _{3/2}	0	2,388[-03]	1,115[-03]
17	2p _{3/2} 3d _{3/2}	1	7,269[-03]	4,110[-03]
18	2p _{3/2} 3d _{5/2}	2	1,272[-02]	4,132[-03]
19	2p _{3/2} 3d _{5/2}	4	7,401[-03]	2,498[-03]
20	2p _{3/2} 3d _{3/2}	3	6,285[-03]	3,916[-03]
21	2p _{3/2} 3d _{3/2}	2	3,503[-03]	1,506[-03]
22	2p _{3/2} 3d _{5/2}	3	6,068[-03]	5,496[-03]
23	2p _{3/2} 3d _{5/2}	1	1,714[-02]	2,013[-02]
24	2p _{1/2} 3d _{3/2}	2	3,025[-03]	1,408[-02]
25	2p _{1/2} 3d _{5/2}	3	5,790[-03]	4,495[-03]
26	2p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3,111[-03]	9,500[-04]

В таблиці 5.14 також вказані і розглянуті значення плазмових параметрів $n_e=10^{19-20}\text{см}^{-3}$ і електронної температури $T_e=20\text{eV}$. Для порівняння наведені також ($T=20\text{ eV}$) значення швидкостей, визначені на основі методу релятивістської ТЗ з модельним нульовим наближенням (РТЗМНН) [12,25-27]

Таблиця 5.13 – Сили електронних зіткнень (наші результати) для збудження з основного стану Ne-подібного Ar (E - Енергія налітаючого електрона у eV)

Пер.	Рівень	J	Ar E=0.500	Ar E=1.045
27	2p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3,122[-01]	3,922[-01]
28	2s _{1/2} 3s _{1/2}	1	1,674[-03]	6,742[-04]
29	2s _{1/2} 3s _{1/2}	0	3,338[-02]	3,774[-02]
30	2s _{1/2} 3p _{1/2}	0	3,614[-04]	2,001[-04]
31	2s _{1/2} 3p _{1/2}	1	1,315[-03]	8,675[-04]
32	2s _{1/2} 3p _{3/2}	2	1,911[-03]	9,884[-04]
33	2s _{1/2} 3p _{3/2}	1	7,624[-03]	1,422[-02]
34	2s _{1/2} 3d _{3/2}	1	2,526[-03]	1,021[-03]
35	2s _{1/2} 3d _{3/2}	2	4,159[-03]	1,542[-03]
36	2s _{1/2} 3d _{5/2}	3	5,788[-03]	1,944[-03]
37	2s _{1/2} 3d _{5/2}	2	2,896[-02]	3,964[-02]

Таблиця 5.14 – Швидкості збудження і дезбудження за рахунок зіткнень (ШЗЗ и ШДЗ: см³/с), іонізації за рахунок зіткнень (ШІЗ: см³/с), радіаційного розпаду (ШРР: в с⁻¹) для Ne-подібного Ar при плазмових параметрах n_e= 10¹⁹⁻²⁰см⁻³ та електронній температурі T_e=20eV

		РТЗМНН			Наша робота		
Параметри	n _e , см ⁻³	T _e =20eV	T _e =20eV	T _e =20eV	T _e =20eV	T _e =20eV	T _e =20eV
Перехід		1→f	2→f	3→f	1→f	2→f	3→f
ШЗЗ (i→i ;k)	1.0+19	2.36 -07	3.21-10	3.47-12	2.55 -07	3.45-10	3.82-12
	1.0+20	1.98-07	2.11-10	4.46-12	2.22-07	2.36-10	5.01-12
Перехід		1→2	1→3	2→3	1→2	1→3	2→3
ШРР (i→i ;k)	1.0+19	2.22+09	1.71+09	5.97+10	2.48+09	1.96+09	6.28+10
	1.0+20	1.41+09	1.03 +09	6.38+10	1.62+09	1.25 +09	6.57+10
ШДЗ (i→i ;k)	1.0+19	5.35-10	1.64-10	1.13-09	5.77-10	1.92-10	1.28-09
	1.0+20	5.51-10	1.60-10	1.12-09	5.94-10	1.78-10	1.25-09
Перехід		2→1	3→1	3→2	2→1	3→1	3→2
ШІЗ (i→i ;k)	1.0+19	5.43-10	5.39-12	2.26-11	5.79-10	1.88-12	2.64-11
	1.0+20	3.70-10	8.32-12	2.30-11	4.85-10	1.13-11	2.78-11

В таблиці 5.15 наведені теоретичні значення швидкостей (cm^3/c) збудження з електронним захопленням для Ne-подібного іону Ar^{8+} і захватом вільного електрона у k рідбергівській зоні (див. рис. 2.3). Методика розрахунку шуканих коефіцієнтів викладена в підрозділі 2.5. Для порівняння наведені також ($T = 20 \text{ eV}$) оцінки S, отримані на основі методу релятивістської ТЗ з модельним нульовим наближенням та квазікласичним визначенням швидкості діелектронного захоплення [12, 25-27].

Таблиця 5.15 – Теоретичні значення швидкостей (cm^3/c) діелектронного захоплення з для Ne-подібного іону Ar^{8+} та захопленням вільного електрона в k рідбергівській зоні

K		$T_e = 20\text{eV}$ РТЗМНН	$T_e = 20\text{eV}$ Наша робота	$T_e = 40\text{eV}$ Наша робота
1	S	2.79 -14	3.13 -14	7.37 -12
2	S	1.59 -13	1.78 -13	1.93 -11
3	S	5.92 -12	6.48 -12	1.38 -10

Аналізуючи наведені дані по швидкостях зіткнень збудження, зіткнень іонізації, радіаційного розпаду і діелектронного захоплення для станів Ne-подібного аргону, що відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму відзначимо, що вказувалося Івановим та ін. [12, 25-27], результати розрахунку на основі РТЗМНН виявляються заниженими в порівнянні з істинними на 10-15%. Отримані нами значення різних швидкостей в цілому на 8-12% перевищують дані РТЗМНН. Зрозуміло, великого значення тут набуває прецизійне експериментальне дослідження відповідних характеристик.

У прикладному відношенні представлені дані є дуже важливими, оскільки розрахунок кінетики і можливостей генерації лазерного випромінювання в короткохвильовому діапазоні спектра для конкретного активного середовища з плазмою неону-подібних іонів виявляється неможливим без знання з досить високою точністю відповідних числових значень всього набору радіаційних характеристик і характеристик зіткнень, в тому числі, перерізів зіткнень збудження (дезбудження) і іонізації, швидкостей зіткнень збудження, зіткнень іонізації, радіаційного розпаду, діелектронного захоплення і т.д. (див. детальніше [3, 8, 15, 103, 106, 108, 228, 229]).

5.5 Висновок до розділу 5

Основні результати і висновок цього розділу зводяться до наступного:

1. На основі нового КЕД ЕП виконаний розрахунок диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани $2p^53s$ конфігурації ($2p^53s[3/2]^{\circ}_2$, $2p^53s[1/2]^{\circ}_0$, $2p^53s[1/2]^{\circ}_1$, $2p^53s[3/2]^{\circ}_1$) нейтрального атома неону при енергії налітаючого електрона від 20 до 100 еВ, тобто ми обрали той інтервал енергії, де традиційно використовуване звичайне борнівське наближення не працює, і провели детальне порівняння для тих випадків, коли є альтернативні теоретичні та експериментальні дані, зокрема з даними експерименту Khakoo et al, Register et al, Kanik et al [13] і теоретичними даними, отриманими на основі розрахунку в рамках таких методів як метод ТЗ з урахуванням першого порядку (UFOMBТ), наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA).

2. Показано, що при енергії налітаючого електрона, зокрема 20 еВ узгодженість теоретичних і експериментальних даних є значно гіршою, ніж, скажімо, при 100 еВ. Наш ЕП, а також R-матричний метод є значно точнішими і істотно краще описують експериментальні дані (ЕП виявляється точніше від R-матричного методу внаслідок більш коректного урахування кореляційних ефектів, використання більш повних базисів релятивістських орбіталей) в порівнянні з методами типу UFOMBТ, DWBA, RDWA, які фактично не доцільно використовувати при описі всіх перерізів; R-матричний метод, особливо при малих кутах розсіювання дає вкрай високу похибку. Показано, що провал в перерізі, який має місце при куті розсіювання 20° імітується (не повною мірою) тільки в рамках КЕД підходу. Далі показано, що в разі енергії налітаючого електрона 100 еВ ситуація при порівнянні експерименту з різними теоріями радикально поліпшується, в тому числі і узгодженість між даними різних теорій, включаючи і теорії типу UFOMBТ, DWBA, RDWA, а також R-матричний метод і наш КЕД ЕП.

3. На основі нового КЕД ЕП виконано детальний розрахунок енергетичного спектра, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом 37 станів «лазерних» конфігурацій $1s^22s^22p^53s,3p,3d$ Ne- подібного іона $Kr26^+$ з основного стану (енергія

налітаючого електрона 4.082 кеВ та 6.80 кеВ). Проведено порівняння з наявними для ряду термів альтернативними даними розрахунку R-матричним методом у наближенні Брейта-Паулі Gupta et al (BP-R-M), у релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA), R- матричним методом в наближенні ДФ Griffin et al (MCDF-RM). Для 12 термів вперше в світовій науковій літературі представлені результати по перерізах електрон-іонних зіткнень.

4. Показано, що таблиці експериментальних і компілюючих даних NIST і результати розрахунку методом БКДФ містять помилку у визначенні положення (енергії) рівнів конфігурації $2s^2 2p^5 3s$, а саме, термів $(1/2, 1/2)_0$, $(1/2, 1/2)_1$, а також для рівня $(3/2, 3/2)_0$ конфігурації $2s^2 2p^5 3d$, що пов'язано з наявною гігантською міжконфігураційною взаємодією. Показано, що значення сил осциляторів для E_1 переходів без урахування ефектів поляризації основа та інших кореляційних внесків виявляються вищими від експериментальних значень в середньому на 20-22%.

5. Показано, що теоретичні значення, отримані в рамках енергетичного КЕД підходу і R-матричного методу, перерізів збудження електронним ударом станів «лазерних» конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ Kr26+ з основного стану (енергії налітаючого електрона 4.082 кеВ та 6.80 кеВ) виявляються найбільш близькими до експериментальних значень, в той час як у методах BP-R-M і релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA) використані скорочені базиси, через що, дані по перерізах збудження станів іона криптому виявляються сильно заниженими. З іншого боку, у R-матричному методі, хоча і використовується більш розширений базис орбіталей, ефект конфігураційної взаємодії виявляється врахованим в меншій (неповній) мірі порівняно з енергетичним підходом.

6. Представлені теоретичні дані по ефективних силах зіткнень, відповідальних за порушення станів Ne-подібного іона криптому Kr26+ при різних температурах $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7$ К та електронній густині (типова щільність в плазмі токамака) $n_e=10^{14} \text{ см}^{-3}$; Порівняння наших результатів з даними (для перших 26 збуджених станів) розрахунку R-матричним методом у наближенні ДФ Griffin et al (DF-RM) ($T=5 \times 10^6$ К) демонструє розумну кореляцію, однак, з причин, описаних вище при аналізі відповідних перерізів електрон-іонних зіткнень, отримані в даній роботі дані є більш точними.

7. Виконано детальне дослідження спектроскопії за рахунок зіткнень Ne-подібного іона Ar^{8+} , як одного з найбільш оптимальних кандидатів на лазерну короткохвильову генерацію. Розраховані енергії

рівнів, сили осциляторів, сили електронних зіткнень (плазма θ -пінча: $n_e=10^{16}$ см⁻³, $T_e=65$ еВ) для збудження з основного стану іона Ar ($E_0=0.425, 0.5, 0.750, 1.045$ кеВ) і проведено порівняння з альтернативними результатами розрахунку методом БКДФ Bhatia-Doschek DF-BD), ТЗ з модельним нульовим наближенням (РТЗМНН) Ivanov-Ivanova-Knight (ІК), Ivanov-Ivanova-Glushkov (ІГ) і нечисленними експериментальними NIST значеннями. Вперше розраховані, також з прийнятною точністю, значення швидкостей зіткнень збудження (ШЗЗ), зіткнень іонізації (ШІЗ), радіаційного розпаду (ШРР) станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в станах континууму (див. підрозділ 1.3.5; рис. 1.4) при плазмових параметрах $n_e=10^{19-20}$ см⁻³ і електронній температурі $T_e=40, 60$ еВ.

8. Аналіз даних по швидкостях зіткнень збудження, зіткнень іонізації, радіаційного розпаду та діелектронного захоплення для станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в станах континууму, показує, що результати розрахунку на основі РТЗМНН виявляються заниженими в порівнянні з експериментальними на 10-15%, в той час як отримані нами значення різних швидкостей в цілому на 8-12% перевищують дані РТЗМНН. Очевидно, більш детальне, прецизійне експериментальне дослідження відповідних характеристик видається вкрай необхідним для подальшого вирішення проблеми генерації лазерного випромінювання на основі плазми Ne-подібних іонів, і зокрема аргону, заліза і хрому.

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [1-4, 11, 15,16, 37, 47, 49, 51, 52, 54-60].

РОЗДІЛ VI

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД В ТЕОРЕТИЧНІЙ СПЕКТРОСКОПІІ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ В ПРИСУТНОСТІ ЗОВНІШНЬОГО ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ

6.1 Вступні зауваження. Атомні системи у зовнішньому електромагнітному полі

Облік зовнішніх полів, впливу плазмового середовища на спектри іонів і характеристики різних елементарних процесів зіткнень досі належить до далеких від свого вирішення проблем спектроскопії за рахунок зіткнень і лише в останні роки (див., напр., [1-3, 103-108]) з'явилися ідеї розвитку послідовних підходів, які враховують плазмове оточення.

Причому, слід зауважити, що в певному інтервалі густини і температур вплив плазмового середовища на радіаційні процеси та процеси зіткнень за участю фотонів, електронів, іонів може бути дуже радикальним, у таких випадках традиційно використовують методи типу Борновського наближення і спрощених версій ТЗ, які тут принципово не відповідають дійсності.

Слід нагадати (див., напр., [101-103]), що питання про можливість класичного опису сильного світлового поля в більшості процесів його взаємодії з вільними і пов'язаними електронами добре вивчений і викладений в стандартних курсах КЕД (див., напр., [101, 107, 1-3], а також у відомих книгах Швебер та ін., 1957; Швебер, 1963; Jauch and Rohrlich, 1980; Б'еркен і Дрелла, 1978). Питанню про поведінку ізольованих і вироджених атомних рівнів і атомних мультиплетів в сильному електромагнітному полі, а також методам опису відповідних квантових станів також присвячена велика кількість літератури (див., напр., [3, 101, 103, 107]). У періодичному в часі зовнішньому полі квантова система описується в рамках формалізму квазіенергетичних станів (теорема Флоке-Зельдовича), що призводить до відомої концепції «одягненого» полем атома. У разі нерезонансного поля, як правило, хвильові функції пов'язаних станів збуджені лазерним випромінюванням слабо.

У стандартному вигляді рівняння Шредінгера для нерелятивістського електрона, який знаходиться в атомному полі $U(\vec{r})$ і в світловому полі з векторним потенціалом $\vec{A}(\vec{r}, t)$ і скалярним потенціалом $\Phi(\vec{r}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{H}(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) + e \cdot \Phi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}, t), \quad (6.1)$$

де $\vec{\mu}$ - оператор магнітного моменту, $\vec{H}(\vec{r}, t)$ - напруженість магнітного поля.

Зрозуміло, оператор імпульсу $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ комутує з $\vec{A}(\vec{r}, t)$, якщо

$$\text{div} \vec{A}(\vec{r}, t) = 0,$$

Вибір потенціалів $\vec{A}(\vec{r}, t)$ та $\Phi(\vec{r}, t)$ неоднозначний, що обумовлено незмінністю напруженостей електричного і магнітного полів, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ та $\vec{H}(\vec{r}, t)$, при калібрувальних перетвореннях

$$\vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \Lambda(\vec{r}, t), \quad (6.2)$$

$$\vec{\Phi}'(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (6.3)$$

Тут $\Lambda(\vec{r}, t)$ - довільна двічі диференційована скалярна функція координат і часу.

Перетворення (6.2)-(6.3), як відомо, призводять до рівняння Шредінгера для гамільтоніана $\vec{H}'(\vec{r}, t)$ і хвильових функцій $\Psi'(\vec{r}, t)$, пов'язаних з $\vec{H}(\vec{r}, t)$ та $\Psi(\vec{r}, t)$ такими співвідношеннями:

$$\vec{H}'(\vec{r}, t) = \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} \cdot \Lambda(\vec{r}, t) \right\} \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot \exp \left\{ -\frac{ie}{\hbar c} \cdot \Lambda(\vec{r}, t) \right\}, \quad (6.4)$$

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} \cdot \Lambda(\vec{r}, t) \right\} \cdot \Psi(\vec{r}, t) \quad , \quad (6.5)$$

Поряд з кулонівським калібруванням,

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}, t) &= 0, \\ \operatorname{div} \vec{A}(\vec{r}, t) &= 0,\end{aligned}\quad (6.6)$$

в якому гамільтоніан безспінового нерелятивістського електрона

$$\vec{H}_c(\vec{r}, t) = \vec{H}_0(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \cdot [\vec{A}(\vec{r}, t)]^2, \quad (6.7)$$

має власні хвильові функції $\Psi_c(\vec{r}, t)$, для опису станів електронів в сильних однорідних $\vec{A}(\vec{r}, t) \approx \vec{A}(t)$ світлових полях часто використовується електричне калібрування:

$$\begin{aligned}\Phi'(\vec{r}, t) &= -\vec{E}(t) \cdot \vec{r}, \\ \vec{A}'(\vec{r}, t) &= 0,\end{aligned}\quad (6.8)$$

в якому гамільтоніан

$$\vec{H}_E(\vec{r}, t) = \vec{H}_0(\vec{r}) - e\vec{E}(t) \cdot \vec{r}, \quad (6.9)$$

$\vec{E}(\vec{r}, t) \approx \vec{E}(t)$ - напруженість електричного поля. Хвильові функції в електричному калібруванні $\Psi_E(\vec{r}, t)$ пов'язані з функціями $\Psi_c(\vec{r}, t)$ унітарним калібрувальним перетворенням

$$\Psi_E(\vec{r}, t) = \exp\left\{-\frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(t) \cdot \vec{r}\right\} \cdot \Psi_c(\vec{r}, t), \quad (6.10)$$

Слід зауважити, що в квантовомеханічних обчисленнях з точними хвильовими функціями вибір калібрування не важливий, тому що в цьому випадку це не призводить до фізично спостережуваним наслідкам в можливостях або перерізах процесів зіткнень.

З іншого боку, в наближених обчисленнях, як це практично завжди має місце, може виявитися, що більш точним є вибір потенціалу збурення в $\vec{p}\vec{A}$ - (формула швидкості) або $\vec{E}\vec{r}$ - формі (формула довжини), або нарешті, у вигляді лінійної комбінації різних форм. Все це зумовлено специфікою конкретного радіаційного процесу за рахунок зіткнення і, головним чином,

вибором хвильових функцій мішені, тому, як правило, ця проблема вирішується в конкретній постановці завдання.

Проблеми калібрувальної інваріантності амплітуд квантово-механічних переходів і взагалі калібрувальної коваріантності в квантовій теорії присвячена досить велика кількість робіт (див. [1-3, 10, 62, 92, 106, 107]).

Серед усього різноманіття електрон-атомних зіткнень у полі лазерного випромінювання, зручно виділити кілька більш-менш самостійних проблем. У найпростішому напівкласичному випадку можна вважати, що основний процес зіткнення, зумовлений математичною мовою оператором $\vec{V}(\vec{r}, t)$ (добавкою до повного гамільтоніану мішені, вміщеній в інтенсивне зовнішнє поле) має такий характер, що оператор переходу у відповідній амплітуді не залежить від параметрів світлового поля.

Наприклад, у цьому випадку мова йде про обчислення амплітуди переходу в першому Борновському наближенні; вплив лазерного поля проявляється тільки у зміні вигляду хвильових функцій початкового і кінцевого станів системи $\Phi_i^0(t)$ и $\Phi_f^0(t)$, що зазвичай подається у вигляді [3, 101]:

$$\Phi_i^0(t) = \sum_{k,l} C_{kl} \cdot e^{-i(\omega_{kl} - \omega_i^0)t} \cdot \phi_i(\vec{r}), \quad (6.11)$$

$$\Phi_f^0(t) = \sum_{n,m} C_{nm} \cdot e^{-i(\omega_{nm} - \omega_f^0)t} \cdot \phi_f(\vec{r}), \quad (6.12)$$

Тобто, з формальної точки зору, загальна задача обчислення відповідних імовірностей і перерізів еквівалентна задачі про еволюцію резонансно-порушуваних систем.

Перерахуємо коротко інші методи розрахунку вимушених ефектів в потенційному розсіянні [1-3, 106, 107]. Один з їх напрямків пов'язаний з урахуванням потенціалу розсіювача в хвильових функціях електронів. Оскільки завдання про знаходження станів електрона в сильному світловому полі навіть в найпростішому, кулонівському наближенні не вирішується точно, зазвичай використовують перші поправки за потенціалом розсіювача до волковських хвильових функцій.

У наближенні струсу, яке називають також наближенням низької частоти, плоскохвильвий матричний елемент замінюється кулонівським матричним елементом:

$$\frac{d\sigma_{el}}{dO_f} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \cdot |\langle f | \vec{V}(\vec{r}) | i \rangle|^2, \quad (6.13)$$

де стани безперервного спектра $|i\rangle$ і $|f\rangle$ описуються кулонівськими хвильовими функціями (див. [1-3, 106, 107]).

Аналогічне узагальнення Борновського результату в наближенні низької частоти, яку полягає в заміні $d\sigma_{el}/dO_f$ у (1.110) на більш точний переріз, вперше було зроблено Kroll-Watson (1973) та ін. (див. [1-3, 101, 106, 107]).

Одним з виходів за рамки Борновського наближення і наближення низької частоти є напівкласичний аналіз вимушеного гальмівного випромінювання і аналіз розсіювання на модельному дельта-потенціалі, в якому точно враховують дію на електрон і потенціал розсіювача, а також сильного світлового поля.

В рамках Борновського наближення без умови застосовності струсу $|p_{i,f}\rangle\rangle |eA_0/c|$ відповідні результати істотно ускладнюються і, як правило, факторизація в амплітудах і перерізах в загальному випадку не має місця. Якщо розсіювальний потенційний бар'єр є атомною системою з екрануванням ядра електронами, то поляризованість мішені налітаючої частинки призводить до додаткового нестационарного доданка в потенціалі розсіювання (див. детальніше [3, 101, 107]).

Слід підкреслити, що хвильові функції станів безперервного і дискретного спектра для електрона в полі атома із сильною світловою хвилею, а також оператор переходу в амплітуді розсіювання для конкретного процесу зіткнення повинні вибиратися в одному калібруванні. Якщо наприклад, в безперервному спектрі волківська хвильова функція вибирається в кулонівському калібруванні в дипольному наближенні, нормованої на дельта-функцію:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p} \cdot \vec{r} + \frac{e\vec{p} \cdot \vec{E}_0}{m\omega^2} \sin \omega t - \frac{p^2}{2m} t\right)\right\}, \quad (6.14)$$

Тут векторний потенціал світлового поля обраний у вигляді $\vec{A}(t) = -(c\vec{E}_0/\omega) \cdot \cos \omega t$ і унітарним перетворенням виключений член, пропорційний $A^2(t)$.

У першому порядку по E_0 «одягнені» хвильові функції пов'язаних станів електрона можуть бути записані у вигляді:

$$\begin{aligned} \psi_i(\vec{r}, t) \approx & \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_i t\right\} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \frac{e\vec{E}_0 \cdot \vec{r}}{\omega}\right\} \times \\ & \times \left[\psi_i^{(0)}(\vec{r}) + \frac{i}{2} \sum_s \left(\frac{e^{i\omega t}}{E_s - E_i + \hbar\omega} - \frac{e^{-i\omega t}}{E_s - E_i - \hbar\omega} \right) \cdot D_{si} \cdot \psi_s^0(\vec{r}) \right], \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$D_{si} = -e \vec{E}_0 \cdot \langle \psi_s^{(0)} | \vec{r} | \psi_i^{(0)} \rangle, \quad (6.16)$$

де сума по s включає також інтегрування по станах безперервного спектра.

В електричному калібруванні, коли, відповідно до (6.9), (6.10) в хвильовій функції $\psi_p(\vec{r}, t)$ є додатковий доданок в експоненті вигляду (6.14), хвильова функція $\psi_i(\vec{r}, t)$ має вигляд (6.15) без другої експоненти в правій частині. Доречно нагадати, що такого типу хвильові функції і особливо їх асимптотики в низькочастотних межах $\hbar\omega = |E_s - E_i|$ використовувалися ще в праці Келдиша (1964), а також Вугон-Joachain (1987), Francken- Joachain (1987), Reiss (1989), Unnikrishnan-Prasad (1986), див. [3, 101, 107, 210].

В цілому, підсумовуючи стан проблематики радіаційних процесів за рахунок зіткнень в зовнішньому електромагнітному полі, треба констатувати, що незважаючи на досить фундаментальне опрацювання багатьох питань взаємодії квантових систем із зовнішнім полем, в області теоретичної спектроскопії за рахунок зіткнень з накладанням зовнішнього ЕМП спостерігається досить кризова ситуація, оскільки є лише найпростіші модельні оцінки (виключно, для атома водню і Н-подібних іонів) перерізів електрон-атомних зіткнень у присутності, як правило, слабкого зовнішнього поля (див. [13-16]), визначені фактично Борнівським наближенням.

В світлі сказаного вище, актуальним залишається розвиток послідовної КЕД теорії радіаційних процесів за рахунок зіткнень в присутності зовнішнього ЕМП.

6.2 Релятивістський енергетичний підхід в теорії електрон-іонних систем зіткнень в зовнішньому електромагнітному полі

Розглянемо радіаційний процес за рахунок зіткнення такого вигляду:

$$e^-(k_i) + A^{+Z-1}(1s) + l\omega \rightarrow A^{+Z} + e^-(k_f) + e^-(k_e), \quad (6.17)$$

Тут Z , як зазвичай, заряд залишкового іона. Вектори $k_{i,f}$ відповідають початковому (initial) і кінцевому (final) хвильовим векторам налітаючого електрона, а k_e – повільному атомному електрону, який залишає атом в процесі іонізації останнього електронним ударом. З фізичної точки зору (6.17) описує так званий (e,2e) процес, коли має місце процес іонізації атома (іона) електронним ударом в присутності зовнішнього поля лазерного випромінювання (частота ω), що супроводжується обміном l фотонами з полем. Напруженість поля лазерного випромінювання можна записати у вигляді:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin \omega t, \quad (6.18)$$

де \mathcal{E}_0 - амплітуда напруженості поля.

В рамках енергетичного підходу завдання знову зводиться до визначення уявної частини енергетичного зсуву за рахунок зіткнень (1.2) $\text{Im}\Delta E$, яка вперше з'являється у другому порядку атомної ТЗ (четвертий порядок КЕД ТЗ) у вигляді інтеграла по енергії розсіяного електрона ε_{sc} [13, 201, 210]:

$$\int d\varepsilon_{sc} G(\varepsilon_{iv}, \varepsilon_{ie}, \varepsilon_{in}, \varepsilon_{sc}) / (\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{iv} - \varepsilon_{ie} - \varepsilon_{in} - i0), \quad (6.19)$$

з 6.1-6.4

$$\text{Im}\Delta E = \pi G(\varepsilon_{iv}, \varepsilon_{ie}, \varepsilon_{in}, \varepsilon_{sc}), \quad (6.20)$$

Тут G – певна піднесена до квадрата комбінація двох-електронних матричних елементів типу (2.80). За визначенням, величина являє переріз зіткнення електрона з іоном.

$$\sigma = -2 \text{Im}\Delta E, \quad (6.21)$$

Переріз електрон-іонного зіткнення визначається квадратом відповідної амплітуди як:

$$\sigma(IK \rightarrow 0) = 2\pi \sum_{J_{in}, J_{sc}} (2J_{sc} + 1) \left\{ \sum_{J_{ie}, J_{iv}} \langle 0 | J_{in}, J_{sc} | J_{ie}, J_{iv}, J_i \rangle B_{ie, iv}^{IK} \right\}^2, \quad (6.22)$$

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

Амплітудна комбінація у виразі (2.84) має вигляд (2.85). Однак в формулах фігурують хвильові функції зіткнень, з урахуванням вище сказаного, формули істотно відрізняються від розглянутих нами раніше. Початковий і кінцевий стани налітаючого електрона будемо описувати хвильовими функціями волківського типу, тобто

$$\chi_{k_i}(r_0, t) = (2\pi)^{-3/2} \exp \left\{ i \left[k_i \cdot r_0 - k_i \cdot \alpha_0 \sin \omega t - E_i t - \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A^2(t') dt' \right] \right\}$$

$$\chi_{k_f}(r_0, t) = (2\pi)^{-3/2} \exp \left\{ i \left[k_f \cdot r_0 - k_f \cdot \alpha_0 \sin \omega t - E_f t - \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A^2(t') dt' \right] \right\}, \quad (6.23)$$

де векторний потенціал:

$$A(t) = (c / \omega_0) \varepsilon_0 \sin \omega t, \quad (6.24)$$

Асимптотичні енергії налітаючого (розсіяного) електрона за відсутності поля лазерного випромінювання:

$$E_{i, f} = k_{i, f}^2 / 2, \quad (6.25)$$

$$\alpha_0 = \varepsilon_0 / \omega^2, \quad (6.26)$$

При цьому координата r_0 налітаючого (розсіяного) електрона по відношенню до атомного іона.

Електрон, який залишає атом при іонізації електронним ударом, природно, знаходиться в полі як потенціалу атомного іона, так і зовнішнього лазерного поля.

Відповідна функція континууму може бути записана у вигляді кулонівської волківської функції:

$$\chi_e(r_1, t) = (2\pi)^{-3/2} e^{\pi\xi/2} \Gamma(1+i\xi)_1 F_1(-i\xi, 1, -i(k_e r_1 + k_e \cdot r_1)) \times \\ \times \exp\left\{i\left[k_e \cdot r_1 - k_e \cdot \alpha_0 \sin \omega t - E_e t - \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A^2(t') dt'\right]\right\}, \quad (6.27)$$

тут r_1 – координата шуканого електрона по відношенню до атомного іона,

$\xi = Z/k_e$ - параметр Зоммерфельда,

$F_1(a, b, c)$ - гіпергеометрична функція.

Надалі будемо вважати, що напруженість електричного поля в лазерному імпульсі менша від характерного атомного значення: $\mathcal{E}_0 < 6.14 \cdot 10^9 \text{В/см}$, таким чином, далі зовнішнє поле буде пертурбативним.

Зауважимо, що використовуючи формалізм операторної ТЗ, теорія очевидним чином узагальнюється на випадок ЕМП довільної напруженості, включаючи і випадок сильного поля. Відповідно, хвильова функція «одягненого» зовнішнім полем іона (атома-мішені) запишеться у вигляді:

$$\psi_0(r_1, t) = \left(1 - \frac{i}{\omega} \varepsilon_0 \cdot r_1 \cos \omega t\right) \phi_0(r_1) \exp\left\{-i\left[W_0 t + \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t dt' A^2(t')\right]\right\}, \quad (6.28)$$

де $\phi_0(r_1)$ визначається, напр., в разі неіоно-подібного іона виразами вигляду (2.75).

Фігуруючий в (6.20), (6.21) енергетичний зсув виражається через S-матричні елементи вигляду:

$$S_{k_f f, k_i i} = (2\pi)^{-1} i \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta(E_{k_f} - E_{k_i} - E_f - E_i - l\omega) T_l^{fi}(k_f, k_i), \quad (6.29)$$

тут, як завжди, T_l – амплітуда для зіткнень процесу $(k_i, i) \rightarrow (k_f, f)$, який супроводжується обміном (поглинанням або випромінюванням) l фотонів і має форму типу (2.85), (2.88).

Можна показати за аналогією з [158, 159, 210, 228], що в разі водно-подібного іона неону з використанням відповідного виразу для орбіталі 1s і виразу для енергії вигляду $W_0 = -\lambda^2/2$ ат.од. ($\lambda = Z$, заряд ядра) буде таким:

$$S = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\langle \chi_{k_f}(r_0, t) \chi_e(r_1, t) \left| -\frac{Z}{r_0} + \frac{1}{r_{10}} \right| \chi_{k_i}(r_0, t) \psi_0(r_1, t) \right\rangle =$$

$$= -i2\pi \sum_{l=-\infty}^{\infty} T_l \delta(E_f + E_e - E_i - W_0 + l\omega) \quad (6.30)$$

з амплітудою:

$$T_l = -\frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{2\pi^3}} J_l(D \cdot \alpha_0) e^{\pi\xi/2} \Gamma(1-i\xi) \frac{1}{q^2} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left\{ Z \left(1 + \frac{l\omega}{D \cdot \varepsilon_0} \varepsilon_0 \cdot \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \right\}_{\gamma=0} \times$$

$$\times \frac{\left[\gamma^2 + (\lambda - ik_e)^2 \right]^{-i\xi}}{\left[(\gamma + k_e)^2 + \lambda^2 \right]^{1-i\xi}} - \left(1 + \frac{l\omega}{D \cdot \varepsilon_0} \varepsilon_0 \cdot \frac{\partial}{\partial q} \right) \frac{\left[q^2 + (\lambda - ik_e)^2 \right]^{-i\xi}}{\left[(q + k_e)^2 + \lambda^2 \right]^{1-i\xi}} \quad (6.31)$$

де величина $D = k_e + k_f - k_i$ – відповідає моменту віддачі ядра іона, а $q = k_f - k_i$ відповідає величині переданого моменту.

За аналогією з [159] при визначенні виразів (6.30) і (6.31) використані довідкові формули:

$$e^{iysinu} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(y) e^{ilu} \quad (6.32a)$$

$$J_{l-1}(y) + J_{l+1}(y) = \frac{2l}{y} J_l(y) \quad (6.32b)$$

а також:

$$\int \frac{e^{-i(k+p) \cdot r - \lambda r}}{r} F_1(i\xi, 1, i(kr + k \cdot r)) d^3r = 4\pi \frac{\left[p^2 + (\lambda - ik)^2 \right]^{-i\xi}}{\left[(k+p)^2 + \lambda^2 \right]^{1-i\xi}} \quad (6.32b)$$

Слід зробити таке важливе зауваження. В принципі викладена вище теорія електрон-іонних зіткнень в присутності зовнішнього ЕМП дає повний

опис відповідних кількісних характеристик (включаючи ймовірності і перерізи) як у випадку слабого поля, так і в разі сильного, з використанням формалізму операторної ТЗ.

Далі з метою незахарачення викладок, ми явно не враховували ефекти плазмового екранування, скажімо, в дебаєвському наближенні, хоча, узагальнення теорії в цьому випадку є абсолютно очевидним. Проте, повна реалізація викладеної нової теорії, оцінка відповідних амплітуд і перерізів представляється вкрай складною, важкою і громіздкою, перш за все в обчислювальному відношенні, завданням, що потребує істотної модифікації відповідного чисельного коду (в нашому випадку атомних комплексів "Superatom-ISAN", "Cowan-atom"). Проте для отримання, хоча б ілюстративних, нехай і напівкількісних оцінок, в наступному розділі ми застосуємо теорію для оцінки диференціального перерізу електрон-атомного зіткнення для атома неону в присутності лазерного поля з напруженістю $\varepsilon_0 \sim 10^8 \text{В/см}$, частотою $\hbar\omega = 1.17 \text{еВ}$ (це відповідає лазеру Nd: YAG) і досить великою енергією налітаючого електрона $\sim 100 \text{еВ}$.

Фактично, ми будемо працювати в так званому наближенні низької частоти, коли $\hbar\omega \ll k_i^2/2$ і справедлива відома формула Kroll-Watson, тобто

$$\frac{d\sigma^l}{d\Omega} = \frac{k_f^l}{k_i} J_l^2(q \cdot \alpha_0) \frac{d\sigma}{d\Omega}(k_f, k_i), \quad (6.33)$$

де $\frac{d\sigma^l}{d\Omega}$ - диференціальний переріз зіткнення в зовнішньому лазерному полі,

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k_f, k_i)$ - те ж саме під час відсутності лазерного поля, $k_f^2(l) = k_i^2 + 2l\omega$.

Корисно розписати докладніше аргумент функції Бесселя $J_l^2(q \cdot \alpha_0)$ в натуральному виразі (6.33), а саме (в звичайних од.):

$$q \cdot \alpha_0 = N = \frac{|e\varepsilon_0 \delta p|}{\hbar m \omega^2}, \quad (6.33a)$$

Очевидно, що аргумент N є фактично відношенням амплітуди (6.26) коливань електрона в зовнішньому полі

$$\alpha_0 = e\varepsilon_0 / m\omega^2, \quad (6.33b)$$

до де-бройлевої довжини хвилі електрона, розрахованої по поданому імпульсу $\hbar\delta p$.

Тоді стають очевидними основні особливості наближення низької частоти, тобто налітаючий електрон повинен бути достатньо швидким, а напруженість поля - досить великою, але в той же час, не перевищувати характерну атомну напруженість, хоча б для того, щоб не захаращувати оцінки додатковими елементами формалізму операторної ТЗ.

Зрозуміло, в цьому випадку виявляється, що $N > 1$, тобто процеси поглинання (випромінювання) фотонів в процесі зіткнення в зовнішньому полі стають найбільш ймовірними і помітними.

Саме в такому наближенні в наступному розділі будуть отримані нові, досить цікаві оцінки для атома Ne. Тобто, мова піде про результати, отримані вперше в світі для багатоелектронного атома. Як зазначалося вище, на цей момент є лише вкрай наближені оцінки для атома водню, а також гелію при 1-2 значеннях параметрів поля (див. [3, 101, 107, 158, 159, 210]).

6.3 Багатофотонні диференціальні перерізи електрон-іонних зіткнень для атома неону в полі випромінювання лазера Nd: YAG. Чисельні оцінки

Вище представлено нову теорію електрон-атомних (іонних) зіткнень в присутності зовнішнього ЕМП. В цьому підрозділі, на основі шуканої теорії ми отримаємо оцінки для перерізів іонізації електронним ударом в присутності поля лазерного випромінювання на прикладі атома неону. Як зазначалося вище, повна реалізація викладеної нової теорії є вкрай складним, важким і громіздким завданням, тож ми обмежимося оцінками перерізів іонізації в наближенні низької частоти.

Для цього випадку параметри поля лазерного випромінювання обрані таким чином: напруженість $\varepsilon_0 \sim 10^8 \text{В/см}$, частота $\hbar\omega = 1.17 \text{еВ}$ (ці параметри відповідають лазеру Nd: YAG), а енергія досить швидкого налітаючого електрона $\sim 100 \text{еВ}$.

Передбачається, що початок системи координат збігається з ядром атома неону, вісь z збігається з напрямом уздовж хвильового вектору налітаючого електрона, вісь x лежить в площині, утвореній хвильовим вектором налітаючого електрона і вектором поляризації лазерного поля (кут між даними векторами позначений Θ), кут розсіювання швидкого (розсіяного електрона) і кут вильоту повільного атомного $2p$ електрона позначені як θ_f та

θ_e відповідно, нарешті, кут між площиною розсіювання і площиною Oxz - ϕ (азимутальний кут).

На (рис. 6.1) наведена l -залежність (l - число фотонів, обмін якими супроводжує електрон-атомне зіткнення) багатофотонного диференціального перерізу іонізації [(e,2e) реакція] атома неону $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ електронним ударом в присутності поля випромінювання лазера Nd: YAG.

Параметри електрон-атомного зіткнення системи і поля: $\varepsilon_0=2 \cdot 10^8 \text{В/см}$, $\hbar\omega=1.17 \text{еВ}$, $E_i=100 \text{еВ}$, $\theta_f=5^\circ$, $\theta_e=45^\circ$, $\phi=0^\circ$. Відзначимо, що оцінка шуканого перерізу виконана з використанням формули (6.33) в наближенні низької частоти.

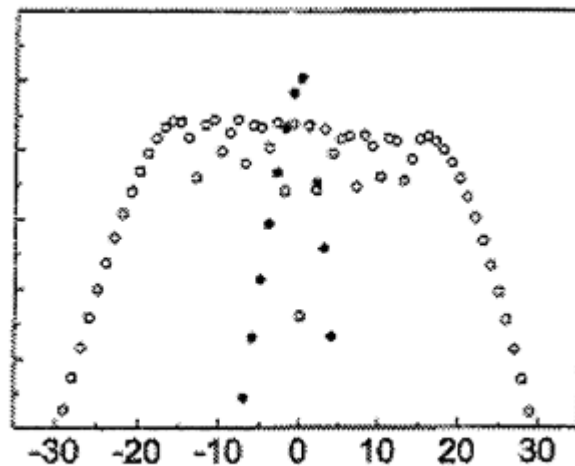


Рисунок 6.1 - Залежність (l - число фотонів) багатофотонного диференціального перерізу іонізації [(e, 2 e) реакція] атома Ne $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ електронним ударом ($E_i=100 \text{еВ}$) в полі випромінювання лазера Nd: YAG

$$(\varepsilon_0=2 \cdot 10^8 \text{В/см}, \hbar\omega=1.17 \text{еВ}, \frac{d\sigma^l}{d\Omega} \text{ (ат. од.)})$$

Точки - переріз в разі паралельності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору налітаючого електрона; незафарбовані кружки - переріз в разі перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору налітаючого електрона;

Тому, враховуючи останню обставину, представлені дані слід розглядати швидше як напівкількісну оцінку в частинному наближенні. З іншого боку, очевидно, що всі ці якісно нові фізичні ефекти повинні мати місце і без обмеження наближенням низької частоти, хоча природно, відмінності на рівні числових значень матимуть місце.

Отримані l -залежності багатофотонного диференціального перерізу іонізації $[(e,2e)$ реакція] атома $Ne\ 1s^2 2s^2 2p^6\ ^1S_0$ електронним ударом, як видно з (рис. 6.1), виявляються симетричними щодо $l=0$. Ця особливість пояснюється властивостями функції Бесселя та обліком лише множника J_l^2 у формулі (6.33). Аналогічна особливість, а саме, різкий пік поблизу $l=0$ ($\epsilon_0 \parallel \mathbf{k}_i$) була якісно відзначена і в разі оцінки багатофотонного диференціального перерізу $(e,2e)$ реакції для атома водню (див., напр., [158, 159, 201, 210]).

Зрозуміло, справжня залежність (маються на увазі параметри системи і поля), буде містити деяку асиметрію, яку легко пояснити наявністю більш складної функціональної залежності у виразах (6.31), (6.33) ніж просто $J_l(D \cdot \alpha_0)$. На (рис. 6.2) наведені залежності від кута розсіювання багатофотонних диференціальних перерізів іонізації $[(e,2e)$ реакція] атома неону $1s^2 2s^2 2p^6\ ^1S_0$ електронним ударом в присутності поля випромінювання лазера Nd: YAG; при цьому (рис. 6.2) - переріз, підсумований по багатофотонних процесах; (рис. 6.2б) - переріз з супроводжуючим електрон-атомним зіткненням, поглинаючим 1 фотон, тобто $l=-1$). Параметри зіткнень системи і поля - ті ж самі.

Випадок випромінювання фотона, тобто $l=1$ в розглянутому наближенні буде симетричний по відношенню до випадку поглинання, проте, в більш реалістичній картині, зрозуміло, буде мати місце деяка асиметрія. Осциляції, що мають місце у відповідних перерізах, спричиняються осциляціями функції Бесселя, тож в разі, скажімо, $l=2$ осциляцій буде більше. У разі сумарного багатофотонного перерізу шукані осциляції, природно, виявляються згладженими.

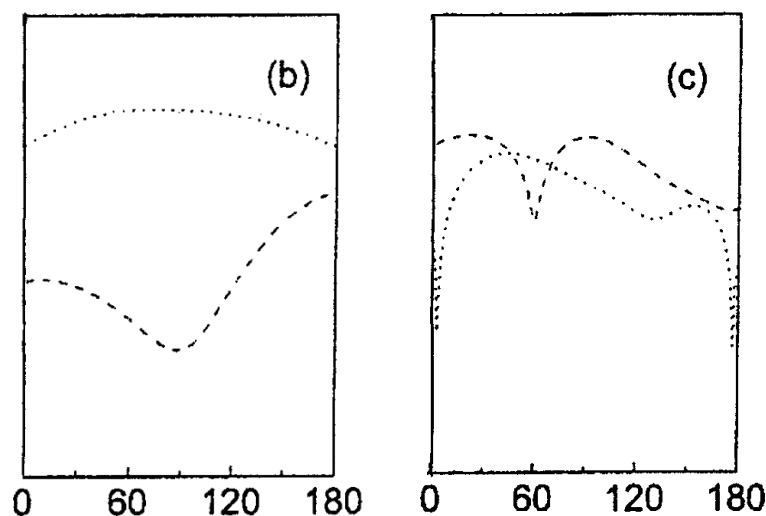


Рис. 6.2 Залежно від кута розсіювання багатофотонних диференціальних перерізів іонізації [(e,2e) реакція] атома неону $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ електронним ударом в присутності поля випромінювання лазера Nd: YAG; при цьому рис. 6.2 (b) - переріз, підсумований по багатофотонним процесам; рис. 6.2 (c) - переріз з супроводжуючим електрон-атомним зіткненням поглинаючим 1 фотон, тобто $l=-1$). Параметри зіткнень системи і поля - ті ж самі, $\frac{d\sigma^l}{d\Omega}$ (ат. од.)

Якісно новою рисою поведінки багатофотонних перерізів (e,2e) реакції для багатоелектронного атома, як неон, є велика відмінність у випадках, коли вектор поляризації лазерного випромінювання і хвильовий вектор налітаючого електрона або паралельні, або перпендикулярні. В разі $(\boldsymbol{\varepsilon}_0 \parallel \mathbf{k}_i)$ має місце різкий пік поблизу $l=0$. В разі $(\boldsymbol{\varepsilon}_0 \perp \mathbf{k}_i)$ переріз визначається багатофотонними процесами.

В обох випадках, скорочення по l визначається функцією Бесселя в (6.33), коли аргумент $J_l^2(q \cdot \alpha_0)$ порядку $l=0$, значення функції Бесселя швидко падає.

З фізичної точки зору, $D = k_e + k_f - k_i$ - відповідає моменту віддачі ядра іона, а $q = k_f - k_i$ відповідає величині переданого моменту, і в граничному випадку, коли D дуже мала, остов відіграє роль «спостерігача» акту зіткнення; аргумент малий і лазерне поле фактично відіграє мінорну роль. Відповідно, багатофотонні процеси істотно не проявляються.

У зворотному випадку, коли D досить велике, процеси розсіювання мають місце поблизу кістяка і ймовірність впливу на електрон лазерним

випромінюванням значно вища, ніж в попередньому випадку, за винятком ситуації, коли $D \perp \alpha_0$.

Важливо також зазначити, що відмінність випадку перпендикулярної геометрії в порівнянні з паралельною геометрією полягає і в збільшенні ймовірності іонізації в порівнянні також і з випадком вільного від поля акту іонізації електроним ударом.

В розглянутій задачі важливим є вибір величини напруженості електричного поля ϵ_0 , щоб багатофотонні процеси проявилися, однак, все ж меншою за характерну атомну напруженість.

Отже ми вперше для багатоелектронної атомної системи отримали в наближенні низької частоти числові оцінки, що вказують на різну поведінку перерізів реакції $(e, 2e)$ за умов паралельності і перпендикулярності вектора поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектора налітаючого електрона.

6.4 Висновок до розділу 6

Основні, вперше отримані результати і висновок цього розділу [232, 239, 241, 242] зводяться до наступного:

1. Вперше в калібрувальній-інваріантному формуванні розроблена нова версія релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у зовнішньому електромагнітному полі (полі лазерного випромінювання), що базується на адіабатичному S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській багаточастинковій ТЗ з оптимізованим модельним неемпіричним нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень (перерізів, сил зіткнень) істотно багатоелектронних атомів і багатозарядних іонів в присутності зовнішнього електромагнітного поля.

2. На основі нового послідовного теоретичного підходу який базується на енергетичному формалізмі до опису електрон-атомних зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля (додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання) виконана оцінка багатофотонних диференціальних перерізів $(e, 2e)$ реакції для нейтрального атома неону при параметрах електрон-атомних зіткнень системи і поля: $\epsilon_0 = 2 \cdot 10^8 \text{В/см}$, $\hbar\omega = 1.17 \text{еВ}$, $E_i = 100 \text{еВ}$.

3. Вперше в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень багатоелектронних релятивістських електрон-іонних систем в зовнішньому електромагнітному полі (додатковому полі лазерного випромінювання) в рамках нової теорії на основі обчислення в наближенні низької частоти для $(e,2e)$ реакції іонізації нейтрального атома неону електронним ударом передбачені нові фізичні ефекти радикально різної поведінки перерізів реакцій типу $(e,2e)$ за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору налітаючого електрона.

Основні положення цього розділу викладені у публікаціях: [6, 7, 13, 14, 24-26, 27, 46-49, 55-57, 59, 61].

ВИСНОВОК

Викладені в монографії нові підходи і отримані нові оригінальні наукові результати [231-291] в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці і спектроскопії, зокрема, релятивістської спектроскопії за рахунок зіткнень електрон- та іон-атомних систем, заснованої на використанні релятивістського енергетичного підходу у калібрувальній інваріантній формі.

Основні результати і висновки роботи можуть бути віднесені до декількох тематичних груп:

1. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень розвинуто новий релятивістський підхід до обчислення енергетичних і спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (у т.ч., перерізів, сил е-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного та радіаційного розпаду, сил осциляторів тощо) для атомів, багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів мішеней і налітаючого електрона (вкл. випадок повільних зіткнень), що базується на релятивістському енергетичному підході, S-матричному формалізмі Гелл-Мана та Лоу.

2. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень для урахування впливу ефектів плазмового середовища та багаточастинкових ефектів розвинутий новий формалізм релятивістській багаточастинкової теорії збурень з дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням і вперше узагальнена послідовна калібрувальна інваріантна *ab initio* методика генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей в класі розглянутих задач релятивістських електрон-іонних зіткнень у дебаєвській плазмі.

3. Вперше адаптовані нові в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антїекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ, які базуються на використанні ефективних коректних обмінно-кореляційних функціоналів густини; на основі релятивістської ТЗ з дебай-хюккелівським «0» наближенням розвинута

ефективна схема урахування станів континууму в межах релятивістської версії методу штурмовських розкладань.

4. Вперше з спектроскопічною точністю виконані обчислення енергій та імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перетинів збуджень для бериліє-подібних іонів з зарядом атомного ядра $Z=6-36$ з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища (параметри плазми густина $n_e=10^{22}-10^{24}\text{cm}^{-3}$, температура $T=0.5-2$ кеВ, параметр екранування $\mu\sim 0.01-0.3$); проведено детальне порівняння отриманих даних з аналогічними даними на основі обчислень в межах методу багатоконфігураційного наближення ДФ і наближення модельного потенціалу (МП) для урахування ефектів плазмового екранування моделі (Li et al), а також дані розрахунку в рамках простої моделі іонної сфери. Варто зазначити, що в досить акуратній реалізації методу ДФ розбіжність сил осциляторів складає $\sim 1.1\%$, в той час як в даній роботі калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційну ширину не перевищує 0.2% .

5. Вперше проведені детальні обчислення значень перерізів збудження за рахунок зіткнень переходів $[2s^2\ ^1S-(2s2p\ ^1P)]$, $[(2s2p\ ^3P^0)-(2s2p\ ^1P^0)]$, $[(2s2p\ ^3P^0)-(2s2p\ ^1P^0)]$, $[2s2p\ ^3P^0-(2p^2\ ^3P)]$ в спектрах Ве-подібних іонів з $Z=6-8, 26-36$; порівняння результатів обчислень перерізу збудження за рахунок електронних зіткнень вказаних вище переходів в спектрах іонів вуглецю, азоту, кисню з даними альтернативного 3-конфігураційного R-матричного розрахунку Vannister et al (1999) і експерименту показує, що при енергії нижчій ніж деяке E_0 (напр., $E_0\sim 20\text{eV}$ для Ве-подібного кисню) спостерігається розумна узгодженість даних обох теоретичних обчислень з експериментальними, однак, коли енергії вище E_0 має місце розбіжність наших даних і R-матричної теорії, яка зумовлена різним ступенем урахування кореляційних ефектів (взаємодія конфігурацій) і різницею використаних базисів; при цьому слід відзначити кількісну коректність нашої теорії, особливо у порівнянні з потужним R-матричним методом.

6. На основі релятивістських обчислень з урахуванням обмінно-кореляційних поправок отримані значення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури ($2p\ ^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$) основного стану F-подібних іонів з $Z=19-26$ (енергія налітаючого електрона $\epsilon_{in}=0,1294\cdot Z^2$ еВ, $T=z^2$ кеВ (z - заряд остова), $n_e=10^{18}\text{cm}^{-3}$) і показано, що наш підхід забезпечує цілком фізично розумну узгодженість теорії з експериментом, в декотрій мірі навіть кращу ніж дані альтернативних обчислень, у т.ч., на основі одного з найбільш ефективних і широко

використуємих за теперішнього часу R-матричного методу (версії ICFT, LS+JAJOM).

7. На основі обчислень в межах нового релятивістського енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським «0» наближенням отримані дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани $2p^53s$ конфігурації ($2p^53s[3/2]_2^o$, $2p^53s[1/2]_0^o$, $2p^53s[1/2]_1^o$, $2p^53s[3/2]_1^o$) нейтрального неону при енергії електрона, що налітає $E_i = 10-120$ еВ (тобто в інтервалі, де часто використовуване стандартне борнівське наближення не працює); проведено докладне порівняння з наявними альтернативними теоретичними та експериментальні результатами, у тому числі, даними експерименту Khakoo et al, Register et al, Kanik et al і теоретичними даними, отриманими на основі обчислень в межах наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA), а також методу ТЗ з урахуванням поправки першого порядку (UFOMBТ).

8. Докладний аналіз отриманих в роботі даних для диференціальних і інтегральних перерізів вище вказаних станів неону, а також порівняння з наявними альтернативними теоретичними даними показує що, по-перше, для малих енергій E_i електрона (в інтервалі 20-30eВ), що налітає, узгодженість даних теорії та експерименту є значно гіршою, ніж, для високих енергій E_i в районі 100 eВ; по-друге, дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують емпіричні дані, особливо у порівнянні з даними обчислень на основі методів UFOMBТ, DWBA, RDWA.

9. Аналіз отриманих даних для перерізів у випадку неону також показує, що релятивістський енергетичний формалізм в деяких випадках дає більш точні результати у порівнянні з іншими методами, що можна пояснити більш коректним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів та використанням більш повних базисів електронних хвильових функцій; R-матричний метод, особливо при малих кутах розсіювання може давати немало похибку. Показано, що провал у перерізі, який має місце при куті розсіювання 20° імітується (не повною мірою) тільки в рамках енергетичного підходу; також виявлено, що при енергії $E_i \sim 100$ eВ ситуація при порівнянні даних

експерименту з даними інших теорій суттєво поліпшується, зокрема, мова йде про UFOMBT, DWBA, RDWA, R-матричний метод та наш підхід.

10. На основі обчислень в межах нового енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим дебай-хюккелівським «0» наближенням отримані дані щодо спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом групи станів конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ Ne подібного іона Kr^{26+} з основного стану (енергія електрона, що налітає 4.082 кеВ і 6.80 кеВ). Проведено порівняння з наявними для ряду термів альтернативними даними обчислень R-матричним методом у наближенні Брейта -Паулі Gupta et al (БП-RM), у релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA), R- матричним методом в наближенні ДФ Griffin et al (ДФ-RM); для цілої групи термів в роботі вперше представлені результати по перерізах збудження; показано, що значення, отримані в рамках енергетичного підходу даної роботи і R-матричного методу для перерізів збудження станів «лазерних» конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ Kr^{26+} з основного стану за рахунок зіткнень ($E_i=4.082, 6.8$ кеВ) виявляються найбільш близькими до експериментальних значень, в той час як у методах БП-RM і наближенні перекручених хвиль RDWA використані скорочені базиси, через що, дані по перерізах збудження виявляються сильно заниженими; в той ж час, у R-матричному методі, хоча і використовується більш розширений базис, ефекти конфігураційної взаємодії виявляються врахованими в меншій мірі порівняно з нашим підходом.

11. Вперше представлені із спектроскопічною точністю теоретичні дані по ефективних силах зіткнень для Ne-подібного іона криптому Kr^{26+} для температур $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7 K$, електронної густини (типова густина в плазмі токамака) $n_e=10^{14} \text{см}^{-3}$; аналіз показує, що дані наших обчислень (для перших 36 станів) в певній мірі узгоджуються з даними обчислень R-матричним методом у багатоконфігураційному наближенні БКДФ Griffin et al ($T=5 \times 10^6$ К), але із-за більш коректного урахування складних обмінно-поляризаційних ефектів та застосування оптимізованих базисів хвильових функцій є більш точними.

12. Вперше розроблена нова версія релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому електромагнітному полі (полі лазерного випромінювання), яка базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській багаточастинковій ТЗ з оптимізованим нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та

радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів, зіткнень (перерізів, сил зіткнень) істотно багатоелектронних атомів і іонів в присутності зовнішнього електромагнітного поля.

13. На основі нової версії релятивістського енергетичного формалізму до опису електрон-атомних зіткнень в присутності полі лазерного випромінювання виконана оцінка багатофотонних диференціальних перерізів $(e,2e)$ реакції для атома неону при параметрах e -атомних зіткнень системи і поля: $\varepsilon_0=2 \cdot 10^8 \text{В/см}$, $\hbar\omega = 1.17 \text{eВ}$, $E_i=100 \text{eВ}$; Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень багатоелектронних релятивістських електрон-іонних систем у зовнішньому електромагнітному полі в рамках нової теорії на основі чисельних оцінок в наближенні низької частоти для $(e,2e)$ реакції іонізації нейтрального атома Ne електронним ударом передбачені нові фізичні ефекти радикально різної поведінки перерізів реакцій типу $(e,2e)$ за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору електрона, що налітає.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Grant I. Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules/ Grant I.-Oxford, 2007.-650P.
2. Dyall K. G. Introduction to relativistic quantum theory/ Dyall K. G., Faegri K.Jr.-Oxford, 2007.-590P.
3. Glushkov AV, Relativistic quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems / A.V. Glushkov. - Odessa: Astroprint, 2008.-700P.
4. Glushkov A.V. Relativistic and Correlation Effects in Spectra of Atomic Systems. Astroprint, Odessa, 2006
5. Glushkov A.V., Advanced relativistic energy approach to radiative decay processes in multielectron atoms and multicharged ions/ Glushkov A.V.// Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Progress in Theoretical Phys.and Chem.,Eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2012-Vol.26.-P.231-248.
6. Khetselius O.Yu. (2008) Hyperfine structure of atomic spectra. Astroprint, Odessa.
7. Oks E., Relation between Theories, Experiments, and Simulations of Spectral Line Shapes/Oks E.//Internat. Journ. of Spectroscopy.-2010.-Vol.10.-P. 852581; doi:10. 1155/2010/852581
8. Ivanova E.P. Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling/ Ivanova E.P., Grant I.//J.Phys.B.-1998.-Vol.31.-P.2871-2883.
9. Glushkov A.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // Europ.Phys.Journ. -2008.-Vol.160.-P.195-204.
10. Glushkov A.V. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//Phys. Lett.A.-1992.-Vol.170(1).-P.33-38.
11. Glushkov A.V. DC Strong-Field Stark-Effect: consistent quantum-mechanical approach/ Glushkov A.V.,Ivanov L.N. // J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1993.-Vol.26, N16.-P.L379-L386.

12. Ivanova E.P. High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. //Phys.Scripta –1985.- Vol.32,N4.-P.512-524.
13. Glushkov A.V. QED theory of radiation lines for atoms in strong laser field/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., Svinarenko A.A.//Phys.Scripta-2009-Vol.135.-P.014022.
14. Mikhailenko V.I., Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external electric field/ Mikhailenko V.I., Kuznetsova A.A.// Sensor Electronics and Microsyst.Techn.-2009.-N4.-P.17-22.
15. Рагозин Е.Н.,Лазерные источники в мягкой рентгеновской области спектра/ Рагозин Е.Н., Собельман И.И.// Усп.Физ.наук.-2005.-Т.175.- С.1139-1141.
16. Okutsu H., Electronic structure of atoms in laser plasmas: a Debae shielding approach/ Okutsu H., Sako I., Yamanouchi K., Diercksen G.H.F.// J.Phys.B.- 2005.-Vol.38.-P.917-927.
17. Nakamura N., Relativistic effects on resonant interactions between electrons and highly charged ions/ Nakamura N., Kavanagh A.P., Watanabe H., Sakaue H.A., Li Y., Kato D., Currell F.J., Ohtani S.// J.Phys.CS.-2007.- Vol.88.-P.012066 (6p).
18. Trzhaskovskaya M.B., An impact of multipole and relativistic effects on photoionization and radiative recombination cross sections in hot plasmas/ Trzhaskovskaya M.B.,Nikulin V. K.,Clark R.// Preprint of Petersburg Nuclear Physics Institute (Gatchina).-2007.-N13.-18P.
19. Badnell N.R., Calculations for electron-ion collisions and photoionization processes for plasma modeling/ Badnell N.R.// J.Phys.CS.-2007.-Vol.88.- P.012070 (12p.).
20. Griffin D.C., Dirac *R*-matrix calculations of electron-impact excitation of neon-like krypton/ Griffin D.C., Balance C.P., Mitnik D.M., Berengut J.C.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.215201.
21. Zeng S.L., Atomic collisions with screened Coulomb interactions: excitation and electron capture in $H^+ + H$ collisions/ Zeng S.L., Liu L., Wang J.G., Janev R.K.//J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.135202.
22. Yongqiang Li, Influence of hot and dense plasmas on energy levels and oscillator strengths of ions: Be-like ions for $Z = 26-36$ / Yongqiang Li, JianhuaWu, Yong Hou, Jianmin Yuan // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.- 2008.-Vol.41.-P.145002.

23. Guo-Xin Chen, Electron impact excitation cross sections in F-like selenium/Guo-Xin Chen, Ong P. P.// *Atom.Data and Nucl. Data Tabl.*-1998.-Vol.70.-P. 93-117.
24. Khakoo M.A., Differential cross-sections and cross-sections ratios for the electron-impact excitation of the neon $2p^53s$ configuration/Khakoo M.A., Wrkich J., Larsen M., Kleiban G., Kanik I., Trjmar S., Brubger M.J. et al//*Phys.Rev.A.*-2002.-Vol.65.-P.062711; Khakoo M.A., Electron-impact excitation of the argon $3p^54s$ configuration: Differential cross-sections and cross-sections ratios/Khakoo M.A., Vandeventer P., Childers J.G., Kanik I., Fontes C.J., Bartschat K., Zeman V., et al// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2004.-Vol.37.-P.247-281.
25. Ivanov L.N. Spectrum of plasma containing Ne-and Na-like ions: Consistent account for Rydberg and autoionization Rydberg series in balance equations/Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.V., Glushkov A.V.// *Phys. Scripta.*-1996.-Vol.53.-P.653-667.
26. Ivanov L.N. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths/ Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.//*Phys.Rev.A.*-1993.-Vol.48.-P.4365-4374.
27. Ivanov LN, Ivanova EP (1996) Method of Sturm orbitals in calculation of physical characteristics of radiation from atoms and ions. *JETP* 83:254-266
28. Marrs R., Electron-ion collisions and ionization processes in laser plasma/Marrs R., Levine M., Knapp D.,Henderson J.//*Phys.Rev.Lett.*-1988.-Vol.60.-P.1715-1720.
29. Zhang H., Cross-sections for electron-ion collisions in laser plasma/ Zhang H., Sampson D., Clark R., Mann J.//*Atom.Data Nucl.Data Tabl.* 1987.-Vol.57.-P.17-98.
30. Reed K.J., Relativistic theory of electron-ion collisions in plasma/ Reed K.J. //*Phys.Rev.A.*-1988.-Vol.37.-P.1791-1804.
31. Bhatia A.K., Doschek G.A., Cross-sections for electron-ion collisions for Ne-like multicharged ions/ Bhatia A.K., Doschek G.A.//*Atom.Data Nucl.Data Tabl.* 1982.-Vol.52.-P.121-168.
32. Yunfeng Shen, Electron impact collision strengths and transition rates for extreme ultraviolet emission from Xe^{10+} / Yunfeng Shen, Cheng Gao, Jiaolong Zeng//*Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.*-2009.-Vol.95.-P.1–53.
33. Kheifets A.S., DWBA-G calculations of electron impact ionization of noble gas atoms/ Kheifets A.S., Naja A., Staicu-Casagrande E.M., Lahmam-Bennani E., //*J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2008.-Vol.41.-P.145201.

34. Bommels J., Low-lying resonances in electron-neon scattering: Measurement at 4-meV resolution and comparison with theory/ Bommels J., Franz K., Hoffmann T.H., Gopalan A., Bartschat K., Zatsarinny O., Ruf M-F., Hotop H.//Phys.Rev.A.-2005.-Vol.71.-P.012074.
35. Bannister M. E., Djurić N., Voitke O., Dunn G. H., Chung Y. -S, Smith A. C. H., Wallbank B., Berrington K. A. Absolute cross sections for near-threshold electron-impact excitation of Be-like C^{2+} , N^{3+} , and O^{4+} ions/ Internat. Journ. of Mass Spectrometry. 1999. Vol.192. P.39-48;
36. Smith A. C. H., Bannister M. E., Chung Y. -S, Djurić N., Dunn G. H., Wallbank B., Voitke O. Near-threshold Electron-impact Excitation of Multiply-charged Be-like Ions. Phys.Scripta. 1999. Vol. T80. P.283-287.
37. Talukder, M. R., Electron impact total ionization cross sections of beryllium and boron isoelectronic ions/ Talukder, M. R.// Applied Phys. Lasers and Opt.-2008.-Vol.93.-P.576-574.
38. Quinet P., 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., Terranova C., Yushchenko A.V., Biémont E.// Astronomy & Astrophys.-2007.-Vol.474.-P.307-314; Fogle1 M., Electron-ion recombination of Be-like C, N, O/ Fogle1 M., Badnell N. R., Glans P. , Loch S.D., Madzunkov S., Abdel-Naby Sh-A., Pindzola M.S., Schuch R.//Astronomy & Astrophys.-2005.-Vol.442.-P.757-766.
39. Беляев В. 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; Беляев В.С. Генерация быстрых заряженных частиц и сверхсильных магнитных полей при взаимодействии сверхкоротких интенсивных лазерных импульсов с твердотельными мишенями/ В.С.Беляев, В.П. Крайнов, В.С.Лисица, А.П. Матафонов // УФН.-2008.-Т.178. -С.823-852.
40. Косарев И.Н. Кинетическая теория плазмы и газа. Взаимодействие мощных лазерных импульсов с плазмой/И.Н. Косарев// УФН.-2007.-Т.176.-С.1267-1284.
41. Колачевский Н.Н. Прецизионная лазерная спектроскопия холодных атомов и поиск дрейфа постоянной тонкой структуры /Н.Н.Колачевский//УФН.-2008.-Vol.178.-P.1225.

42. Питаевский Л.П. Конденсаты Бозе-Эйнштейна в поле лазерного излучения/ Л.П. Питаевский//УФН.-2006.-Т.176.-С.345-365.
43. 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.
44. Bieron J. Degree of accuracy in determining the nuclear electric quadrupole moment of radium/Bieron J., Pyykkö P.//Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.032502-1-8; Bieron J. Nuclear quadrupole moment of ^{201}Hg / Bieron J., Pyykkö P., Jonsson P.//Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.012502.
45. Dorofeev D. Method of quantum defect Green's function for calculating dynamic polarizability/ Dorofeev D, Zon B., Kretinin I., Chernov V.//Opt.Spectr.-2005-Vol.99.-P.540-548.
46. Jamieson M.J. Variational calculation of the dynamic polarizabilities of rare-earth metal atoms/ Jamieson M.J., Drake G.W.F., Dalgarno A.//Phys.Rev. A.-1995.-Vol.51.-P.3358-3370.
47. Buchachenko A.A. Calculation of the Van der Waals coefficients for interaction of rare-earth metal atoms with helium atoms / Buchachenko A.A., Szczesniak M.M., Chalasinski G.//J.Chem. Phys.-2006.-Vol.124.-P.114301.
48. Chu X. Dynamic polarizabilities of rare-earth metal atoms and dispersion coefficients for their interaction with helium atoms/ Chu X., Dalgarno A., Groenenboom G.C. //Phys. Rev. A.-2007.-Vol.75.-P.032723.
49. Glukhov I. Thermal photoionization of Rydberg states in He & alkali-metal atoms/ Glukhov I., Ovsianikov V.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2009.-Vol.42.-P.075001.
50. Li H., Sautenkov V.A. Excitation dependence of resonance line self-broadening at different atomic densities/ Li H., Sautenkov V.A., Rostovtsev Yu.V., Scully M.O.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.065203.
51. Khetselius O.Yu. Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products/ Khetselius O.Yu. //Phys. Scripta.-2009.-Vol.134.-P. 305090.
52. Glushkov A.V. Co-operative laser nuclear processes: border lines effects/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V.// In: New projects and new lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Sci.-2003.-P.242-268.

53. Glushkov A.V. Cooperative laser- electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multicharged ion in laser field/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Chernyakova Y.G., Svinarenko A.A.//Int.Journ. Quant. Chem.-2004.-Vol.99.-P.889-898.
54. Ivanova E.P. Zinoviev N.A. The possibility of X-ray lasers based on inner-shell transitions of Ne-like ions/ Ivanova E.P. // Phys. Lett.A.–2000– V.274 – P.239-246.
55. Koshelev K.V. The interelectron interaction corrections to the hyperfine structure of the $2p_{3/2}$ state in Li-like, B-like and N-like Bi ions/ Koshelev K.V., Labzowsky L.N., Tupitsyn I.I.//J.Phys.B.-2004.-Vol.37.-P.843-851.
56. Глушков А.В. Отрицательные ионы инертных газов.Письма в ЖЭТФ.- 1992.-Т.55,№2- С.104-107; JETP Lett.-1992.-Vol.55,№2.-P.97-100.
57. Derevianko A. Dressing lines and vertices in calculations of matrix elements with the coupled-cluster method and determination of Cs atomic properties/ Derevianko A., Porsev S.G.// Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.032509-1-10
58. Bieron J., Lifetime and hyperfine structure of 3D_2 state of radium/ Bieron J, Froese-Fischer C., Fritzsche S., Pachucki K.,Lifetime //J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2004.-Vol.37.-P.L305-311.
59. Glushkov A.V. 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., Kozlovskaya V.P., Gura V.I.// Int. Journ.Quant.Chem.-2005.-Vol.104, N4 .- P. 512-516
60. Sahoo B. Magnetic dipole hyperfine interactions in $^{137}Ba^+$ and accuracies of neutral weak interaction matrix elements/ Sahoo B., Gopakumar G., Chaudhuri R., Das B., Merlitz H., Mahapatra U., Makherjee D.//Phys.Rev.A-2003.-Vol.68.-P.040501.
61. Basar Gu. Hyperfine structure investigations of MnI: Experimental and theoretical studies of the hyperfine structure in the even configurations/ Basar Gu., Basar Go., Acar G., Ozturk I.K., Kroger S.// Phys.Scripta.-2003.- Vol.67.-P.476-484.
62. Safronova U.I. Third-order relativistic many-body calculations of energies, transition rates, hyperfine constants, and blackbody radiation shift in $^{171}Yb^+$ /Safronova U.I., Safronova M.S. //Phys. Rev. A.-2009.-Vol.79.- P.022512.
63. Quiney H.M. Partial-wave mass renormalization in atomic QED calculation/ Quiney H.M., Grant I.P. // Phys.Scripta T.-1993.-Vol.46.-P.132-138.

64. Johnson W.R. Atomic structure calculations associated with PNC experiments in atomic Cs/ Johnson W.R., Sapirstein J., Blundell S.A.// Phys.Scripta T.-1993.-Vol.46.-P.184-192.
65. Volz U. Precision lifetime measurements on alkali atoms on helium by beam-gas-laser spectroscopy/ Volz U., Schmoranzner H. //Phys.Scr.-1996.-Vol.65,N1.-P.48-56.
66. 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.-P.57-62.
67. Seely J.F. Laser –Produced Spectra and QED Effects for Fe-,Co-,Cu-like ions of Pb, Bi,Th,U/ Seely J.F., Ekberg J.O., Brown C. et al//Phys.Rev.Lett.-1996.-Vol.57-P.2924-26./
68. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/ Летохов В.С.-М.: Наука.-1983.-408С.; Laser Specktroskopie.-Berlin: Akad.-Verlag,1977.-330P.
69. Жерихин А.Н., Кошелев К.Н., Летохов В.С., Об усилении в области далекого вакуумного ультрафиолета на переходах многозарядных ионов// Квантовая Электроника.-1976.-Т.3,N2.-С.152-156.
70. Burkhalter P., Observation of the dielectronic satellite spectra of Na-like ions in a laser-produced plasma/ Burkhalter P., Cohen L., Cowan R., Feldman U.// Journal of Opt.Soc.Am.-1979.-Vol.69,N8.-P.1133-1140;
71. Berry H., Dielectronic satellite spectrum of the neon-like ions from beam-foil experiment/ Berry H., Desesquelles J., Cheng K.T., Schektman R. //Phys.Rev.A.-1978.-Vol.18,N2.-P.546-551.
72. Ivanov L.N., Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements atoms/ Ivanov L.N., Letokhov V.S//Com.Mod.Phys.D:At.Mol.Phys.-1985-Vol.4-P.169-184
73. Mössbauer R.L., Gammastrahlung in Ir¹⁹¹ /Mössbauer R.L.//Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei.-1958.-Vol.151.-P.124–143.
74. Гольданский В.И., О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер/ Гольданский В.И., Летохов В.С.// ЖЭТФ.-1974.-Т.67.-С.513-516; Baldwin G.G., Approaches to development of gamma ray lasers / Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I.// Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742;
75. Иванов Л.Н. Селективная ионизация атомов в электрическом и лазерном по-лях/ Иванов Л.Н.,Летохов В.С.// Квантовая Электроника.-1975.-Т.2.-С.585-590;

76. Letokhov V.S., Using lasers in Atomic, nuclear and molecular physics/ Letokhov V.S.// In: Application of Lasers in Atomic, Nuclear and Molecular Physics. Ed. Prokhorov A.M., Letokhov V.S.-Moscow:Nauka,1979.- P. 405-414.
77. Glushkov A.V.,Nuclear quantum optics/Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S //Preprint of Inst.e for Spectroscopy of USSR Acad. Sci.(ISAN), AS N4, 1991.-16P.
78. Adamenko S.V., Possible explanation of the anomalous localization effect of nuclear reaction products stimulated by controlled collapse abd the problem of stable superheavy nuclei/ Adamenko S.V., Vysotskii V.I.// In: New projects and new lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Sci.-2003.-P.383-390.
79. Vysotskii V.I., The problem of controlled spontaneous nuclear gamma-decay: theory of controlled excited and radioactive nuclei gamma-decay / Vysotskii V.I.// Phys. Rev.C.- 1998.- Vol. 58.- P. 337-350.
80. Zelentsova T.N., Pereyagina T.B., Thermal photoionization of the Rydberg atoms by the blackbody radiation: New relativistic approach/ Zelentsova T.N., Pereyagina T.B.// Sensor Electr. and Micr..Techn.-2009.-N4.-P.11-16.
81. Glushkov A.V., Atom ij an electromagnetic filed. Kiev: KNT, 2005.-405P.
82. Ivanova E.P. Modern Trends in Spectroscopy of multi-charged Ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V. // Physics Rep.-1988.- Vol.166,N6.-P.315-390; Mandelstam S.L., X-ray spectra of Ne-like Ba, La, Ce and Pr ions/ Mandelstam S.L., Aglitsky E.V., Antsiferov P.S., Panin A.M. // Canad. Journ.of Phys.1984.-Vol.62,N10.-P.1923-1930
83. Semenov R.I. Semiempirical calculation of atomic Characteristics of the $2p53d,4d, 2p5ns$ ($n=3-10$) Configurations of Ne/ Semenov R.I., Kapel'kina E.L., Tsygankova G.A., Tsygankov M.A.//Optics and Spectroscopy.-2005.- Vol.99,N4.-P.536-539.
84. Видолова-Ангелова Е.П. Природа узких и аномально узких резонансов в атомах редкоземельных элементов и их отрицательных ионах/ Видолова-Ангелова Е.П., Иванов Л.Н., Иванова Е.П., Летохов В.С.//Изв.АН СССР. Сер.Физ.-1981.-Т.45,N12.-С.2300-2304.
85. Ivanov L.N. Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra/ Ivanov L.N.,Ivanova E.P.// Atom.Data Nucl .Data Tab.-1979.-Vol.24.-P.95-121.

86. Glushkov A.V. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of F-, Ne- Isoelectronic Sequences/ Glushkov A.V., Ivanova E.P. // Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer. (USA).-1986.-Vol.36, N2.-P.127-145.
87. Vidolova-Angelova E. Autoionization decay of excited Rydberg Tm states//J. Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1988.-Vol.21.-P.3877-3890.
88. Vidolova-Angelova E. 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., Angelov D.A.// J.Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.-1986.-Vol.19.-P.2053-2069.
89. Vidolova-Angelova E. Autoionizing Rydberg states of thulium. Re-orientation decay due to monopole interaction/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N. // J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1991.-Vol.24.-P.4147-4158.
90. Беков Г.И. Лазерная спектроскопия узких двукратно возбужденных автоио-низационных состояний атома иттербия/ Г.И. Беков, Е. Видолова-Ангелова, Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, В. Мишин// ЖЭТФ.-1981.-Т.80, N3.-С.866-878.
91. Guivan M.M. Population density of $B^2 \Sigma_{1/2}$ state of mercury monobromide and monochloride in excimer radiation sources / Guivan M.M., Malinin A.N., Shimon L.L.//Uzhgorod Univ. Sci. Herald. Ser. Phys.-2000.-Vol.8,N2.-P.187-190.
92. Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Nonlinear Effects. Autoionization Resonances in Tm / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Borik S.A., Shpinareva I.M., Antonenko T. // Journ. of Techn. Phys.- 1997.- Vol.38,N2.- P.211-214.
93. Dietz K., Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics/ Dietz K., Heß B.A.// Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.-P.682-688
94. Глушков А.В. Релятивистский расчет спектроскопических характеристик Cl-, Ar-, K-подобных многозарядных ионов/ А.В. Глушков, С.В. Малиновская, В.В. Филатов // Многочастичные эффекты в атомах.-М.:Наука,1988.-С.73-189.
95. Indelicato P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method/ Indelicato P., Desclaux J.P.// Phys.Scripta.-1993.-Vol.46.-P.110-115.

96. Банд И.М. Расчет констант сверхтонкой структуры спектров тяжелых ионов на основе метода Хартри-Фока-Дирака / И.М. Банд, М.А. Листенгартен, М.В. Тржасковская //Изв.АН СССР.- 1986.-Т.50.-С.2240-2244.
97. Luc-Koenig E. Eigenchannel R-matrix study of two-photon processes including above-threshold ionization in Mg/ Luc-Koenig E., Lyras A., Lecomte J.-M., Aymar M. //J.Phys.B:At. Mol. Opt. Phys.-1997.-Vol.30.-P.5213-5232.
98. Grance M. Revised energy levels for neutral atoms and ions/ Grance M. // Atomic Data.-1973.-Vol.5.-P.185-220.
99. Johnson W.R. Relativistic random-phase approximation/ Johnson W.R.,Lin C.D.,Cheng K.T. // Phys.Scr.-1980.-Vol.21,N3.-P.409-422.
100. Johnson W. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines/ Johnson W., Sapistein J., Blundell S.// Phys.Rev.A.-1988.-Vol.37.-P.307-315.
101. Johnson W. Relativistic random phase approximation in calculations of negative ions/ Johnson W., Sapirstein J., Blundell S.//J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys-1989-Vol.23.-P.175-182.
102. Ullrich C. Superintense Laser Atoms Physics/ Ullrich C., Erhard S., Gross E.K.U.; N.-Y: Acad. Press., 2007.-580p.
103. Akhiezer A.I. Quantum electrodynamics / A.I. Akhiezer, V.B. Berestetsky.- М.: Fizmatgiz, 1981.-452S.
104. Brown M.A. Relativistic theory of the atom / M.A. Brown, A.D. Gurchumelia, U. Safronova.-N.-Y. Acad. Press, 1998.- 268p.
105. Aglitskiy E.V. Spectroscopy of autoionization states of atomic systems / E.V. Aglitsky, U. I. Safronova .- М.: Energoatomizdat, 1985.-160S.
106. Amusya M.Ya. Atomic photoelectric effect / M.Ya. Amusya.- N.-Y., Acad. Press. 1995.- 272p.
107. Vainshtein L.A. Structure and characteristics of ions in plasma / L.A. Weinstein, V.P. Shevelko.-М.: Nauka, 1986.-216S.
108. Dykhne A.M. Sudden disturbances and quantum evolution / A.M. Dykhne, G.L. Yudin. - М.: Nauka, 1996.-380С. Глушков А.В. Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем/ Александр Васильевич Глушков.-Одесса: Астропринт.-2006.-400С.
109. Хецелиус О.Ю. Сверхтонкая структура атомных спектров/ Ольга Юрьевна Хецелиус.-Одесса: Экология.-2006.-220С.

110. Дмитриев Ю.Ю. Релятивистские эффекты в спектрах атомных систем/ Ю.Ю. Дмитриев, Г.Л. Климчицкая, Л.Н. Лабзовский. -М: Энергоатомиздат, 1984.-230С.
111. Радциг А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике/ А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.- М.: Энергоиздат, 1986.- 240С.
112. Luc-Koenig E., Lyras A., Lecomte J.-M., Aymar M. Eigenchannel R-matrix study of two-photon processes including above-threshold ionization in magnesium// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1997.-Vol.30.-P.5213-5232.
113. Becker A., Faisal F.H.M., S-matrix analysis of coincident measurement of two-electron energy distribution for double ionization of He in an intense laser field//Phys.rev.Lett.-2002.-Vol.89,N18.-P.193003-1-193003-4.
114. Девдариани А.Л. Химия плазмы./ Под ред. Б.М. Смирнова А.Л. Девдариани, А.Л.Загребин , -1989.-Вып.15.-С.44-93.
115. Deloff A., Fundamentals in Hadronic Atom Theory/ Deloff A.- Singapore: World Sci., 2003.-352P.
116. Glushkov A.V.,Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Florko T.A., Sukharev D.E., Gurnitskaya E.P., Lovett L.// Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer).- 2008.-Vol.18.- P.507-522 .
117. Florko T.A., Loboda A.V., Svinarenko A.A., Sensing forbidden transitions in spectra of some heavy atoms and multicharged ions: new theoretical scheme/ //Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2009.-N3.-P.21-26
118. Florko T.A., Glushkov A.V.,Khetselius O.Yu., New QED approach to calculating probabilities for forbidden atomic transitions/ Proc.8th European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics”.-Spetses (Greece).-2003-P.117.
119. Chernyakova Yu.G., Shumlyansky I.I. Relativistic perturbation theory calculation of the Na-like spectra satellites of 2-3 Ne-like ions transitions// Науковий Вісник Ужгородського уні-ту.Сер.Фізика.-2000.-Т.8,Ч.2.- С.251-255 .
120. Chernyakova Yu.G., Ignatenko V.M.,Vitavetskaya L.A., Sensing the tokamak plasma parameters by means high resolution x-ray theoretical spectroscopy method: New scheme// Sensor Electr. and Micro syst. Techn.- 2004.-N2.-P.20-24.

121. Чернякова Ю.Г., Расчет сателлитной структуры линий в спектрах He и Ne-подобных ионов на основе релятивистской теории возмущений// Науковий Вісник Ужгородського уні-ту. Сер.Фізика.- 2001.-Т.10.- С.331-335.
122. Burkhalter P., Schneider R., Dozier C.M., Cowan R., Dielectronic satellite spectra of Na-like ions in laser-produced plasma// Phys.Rev.A.-1978.- Vol.18-P.718-725.
123. Driker M.N., Ivanova E.P., Ivanov L.N., Shestakov A.F. Relativistic calculation of spectra of 2-2 transitions in O-and F-like atomic ions// J.Quant.Spectr. Rad.Transfer.-1982.-Vol.28, N6.-P.531-535
124. Burkhalter P.,Nagel D.J. Advanced diagnostics based on observation of dielectronic satellite spectra of Ne-and Na-like ions in a laser produced plasmas// Phys.Rev.A.-1975.-Vol.11,N3.-P.782-788.
125. Corliss C., Sugar J. Energy levels of iron//J.Phys.Chem.Ref.Data.-1982.- Vol.11,N1.-P.135-241.
126. Froese Fischer C., Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences/ Froese Fischer C., Tachiev G.//Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2004.-Vol.87.-P.1–184.
127. Комаров И.В. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции/ И.В.Комаров, Л.И.Пономарев, С.Ю.Славянов.- М.: Наука, 1976.-340С.
128. Safronova U.I., Relativistic many-body calculations of electric dipole lifetimes, transition rates,oscillator strengths for $2l^{-1}3l'$ states in Ne-like ions /Safronova U.I., Cowan T.,Safronova M.S.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.- 2005.-Vol.38.-P.2741-2763.
129. Ivanova E.P., Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence/ Ivanova E.P., Gulov A.V.// Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.-1991.-Vol.49.-P.1-64.
130. Ivanova E.P., Calculation of Na-like spectra–satellites to 2-3 transitions in Ne-like ions/Ivanova E.P.,Gogava A.//В кн.: Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов. Под ред. Сафроновой У.И.-М.: Наука.-1988.-С.212-256.
131. Груздев П.Ф. Расчет параметров взаимодействия многоэлектронных атомов с внешними полями с использованием разложений по дискретному базису ХФ виртуальных орбиталей штурмовского типа/ П.Ф.Груздев, С.Г. Соловьева, А.И.Шерстюк//Изв.вузов. Сер.Физ.- 1988.-№8.-С.73-85.

132. Trabert E., Saathoff G., Wolf A., M1/E2 decay rates in CoXI, NiXII, CuXIII measured at heavy-ion storage ring. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* -2004.- Vol.37.-P.945-952
133. Glushkov A.V., Universal quasiparticle energy functional in the theory of the density functional for a relativistic atom / // *Opt. Spekt.* -1989.-T.66.- P.31-38.
134. Glushkov A.V. . Effective consideration of energy exchange and correlation effects in the theory of many-electron systems. *J. Struct. Chemistry.* - 1990.- T.31, N4.-C.3-7.
135. Glushkov A.V. A new approach to the theoretical determination of the ionization potentials of molecules based on the method of Green's functions *J. Phys. Chem.* -1992.-T.66, N10.-C.2671-2677.
136. Glushkov A.V., Calculation of quasi-molecular terms of the system "atom of an alkaline element - an atom of mercury. *FJ. Phys. Chem.* -1992.-T.66, No. 6.-S.1516-1524.
137. Glushkov A.V., Nitrogen Spectroscopy: Effective Consideration of Polarization Effects in Calculations of Probabilities and Transition Energies in the N2 Spectrum Optics of the Atmosphere. -1992.-T.5, N5.-C.457-
138. Khetselius O Yu, Glushkov A V, Gurskaya M Yu, Kuznetsova A A, Dubrovskaya Yu V, Serga I N and Vitavetskaya L A (2017) Computational modelling parity nonconservation and electroweak interaction effects in heavy atomic systems within the nuclear-relativistic many-body perturbation theory. *J. Phys.: Conf. Ser.* 905:012029
139. Khetselius O.Yu., Sensing hyperfine-structure parameters, scalar-pseudoscalar interaction constant and parity non- conservation effect in some isotopes: new approach/ Khetselius O.Yu., Lopatkin Yu.M., Dubrovskaya Yu.V., Svinarenko A.A.// *Sensor Electronics and Microsyst. Techn.* -2010.-N2.-P.5-10.
140. Kohn W. Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas/ Kohn W., Sham S.//*Phys. Rev.A.* -1965.-Vol.137.-P.1697-1710.
141. Gidopoulos N.I., Fundamentals of Electron Density, Density Matrix and Density Functional Theory in Atoms, Molecules, Solid State. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics/ Gidopoulos N.I.; Wilson, S. (Eds.).- 2004.-Vol.14.-P.1-244.
142. Zangwill A. Density-functional approach to local field effects in finite systems. Photoabsorption in rare gases/ Zangwill A., Soven P.//*Phys. Rev.A.* -1980.-Vol.21.-P.1561-1572.

143. Lagowski J.B. Analysis of local and gradient- correction correlation energy functionals using electron removal energies/ Lagowski J.B., Vosko S.H. // *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*-1988.-Vol.21,N1-P.203-208.
144. Kobayashi K.Bond-energy calculations of Cu , Ag, CuAg with generalized gradient approximation/ Kobayashi K., Kurita N., Kumahora H., Kuzatami T.// *Phys.Rev.A.*-1991.-Vol.43.-P.5810-5813.
145. Vosko S.H. Prediction of stable Sr, Ba, Ra from density-functional theory/ Vosko S.H., Lagowski J., Mayer I.L. // *Phys. Rev.A.*- 1989.-Vol.39.-P.446-449.
146. Guo Y. Effect of correlation correction on ionization potential and electron affinity in atoms/ Guo Y., Whitehead M.A.// *Phys.Rev.A*-1989.-Vol.39,N1.-P.28-34.
147. Köppel H., Green's function method in quantum chemistry/ Köppel H., Domcke W., Cederbaum L.S.// *Adv. Chem. Phys.*-1984.-Vol.57.-P.59-132.
148. Cederbaum L.S., On vibrational structure of photoelectron spectra by the Green's functions method/ Cederbaum L.S., Domcke W.// *J.Chem. Phys.*-1984.-Vol.60.-P.2878-2896.
149. Bartlett R.J., Coupled-cluster theory in quantum chemistry/ Bartlett R.J., Musiał M.N.//*Rev. Mod. Phys.*-2007.-Vol.79.-P.291-328.
150. Glushkov A V, Ambrosov S V, Loboda A V, Chernyakova Yu, Svinarenko A A , Khetselius O Yu (2004) QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections, and hfs for different nuclear models. *Nucl. Phys. A.: nucl. and hadr. Phys.* 734:21-26
151. Nayak M., Ab initio calculation of electron-nucleus scalar-pseudo-scalar interaction constant W_s in heavy polar molecules/ Nayak M., Chaudhuri R., Das.B.//*Phys.Rev.A.*-2007.-Vol.75.-P.022510.
152. Safronova MS, Rupsi P, Jiang D et al (2009) New directions in atomic PNC. *Nucl Phys A* 827: 411-413.
153. Khetselius, O.Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. Journ.Quant.Chem.* **2009**, 109, 3330-3335.
154. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V. Theoretical determination of the spectra of K-like multi-charged ions // *Izv. Vuz. Ser. Phys.*-1992.-T.41, N11.-P.3-9.
155. Durand P. Ab initio quantum chemistry methods/ Durand P., Malrieu J.-N.-Y.: Wiley, 1987.
156. Wilson W. Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry/ Wilson W.- Chichester: Wiley, 2003.-680P.

157. Glushkov AV (1990) Relativistic polarization potential of a many-electron atom. *Sov Phys Journal* 33(1):1-4
158. Li S-M., Laser-assisted (e,2e) reaction in one-electron atoms and ions/ Li S-M., Berakdar J., Zhang S-T, Chen J.//*J.Phys.B. At. Mol.Opt.Phys.*-2005.-Vol.38.-P.1291-1303.
159. Joachain C.J., Laser-assisted electron-ion collisions/ Joachain C.J.//*Laser Chem.*-1991.-Vol.11.-P.273-277.
160. Fischer C.F., Calculation of negative ions in multiconfiguration Hartree-Fock approximation : Ca , Sr / Fischer C.F.// *Phys.Rev.A.*-1989.-Vol.39,N3.- P.963-970.
161. Dzuba V.A., Fine structure of negative ions of alkaline-earth metal atoms/Dzuba V.A., Flambaum V. V.,Gribakin G., Sushkov D.E.//*Phys.Rev.A*-1991.-Vol.44.-P.2823-2829.
162. Jupen W.C. Transitions in the Al-like, Mg-like, Na-like Kr, Mo, observed in JET Tokamak/ Jupen W.C., Denne B.D., Martinson I.K. //*Phys.Scripta.*-1990.-Vol.41.-P.669-674.
163. Courade E.Etal, Two-photon ionization of cold rubidium atoms with near resonant intermediate state/ Courade E., Anderlini M., Ciampini D.//*J.Phys.B. At.Mol.Opt.Phys.*-2004.-Vol.37.-P.967-979
164. Curtis L.J. Fine structure intervals for the lowest terms in the Cu, Zn, Ga and Br isoelectronic sequence for $Z < 92$ / Curtis L.J.//*Phys.Rev.A.*-1987.-Vol.35.-P.2089-2094.
165. Botham C. Relativistic effects in atoms and molecules/ Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G.-Vancouver: Elseiver,1981.- 545p.
166. Photonic, Electronic, Atomic Collisions. Eds. Aumar F. and Winter H.-Singapore: World Sci.-1997. - 630P.
167. Turner D., Molecular Photoelectron Spectroscopy/ Turner D., Baker C., Baker A., Brunrile C.-New York: Wiley.- 1997.-540P.
168. Bodo E. Ultra-cold ion-atom collisions: near resonant charge exchange/ Bodo E., Zhang P., Dalgarno A.//*New Journal of Physics.*-2008.-Vol. 10.-P.033024.
169. Jamieson M.J. 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., Tharamel J.// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2009.-Vol.42.-P.095203.

170. Glushkov A.V., 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., Gopchenko E.D., Polischuk V.N. //Foundations of Physics Letters (Springer).-2002.-Vol.15,N1.-P.480-484.
171. Singer K., Spectral broadening of excitation induced by ultralong-range interactions in a cold gas of Rydberg atoms/ Singer K., Reetz-Lamour M., Amthor T., Marcassa L., Weidemuller M. //Phys. Rev. Lett. -2004.-Vol.93.-P.163001.
172. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля в теории атомов, молекул и твердых тел/ Слэтер Дж.-М.:Мир, 1974.-780С.
173. Wauters L., Study of the electron rearrangement induced by nuclear transmutation: A B-spline approach applied to the beta decay of ${}^6\text{He}$ / Wauters L., Vaeck N.//Phys. Rev. C.-1996.-Vol.53,N1.-P.497-500.
174. Wauters L., Recoil-induced electron excitation and ionization in one- and two-electron ions/ Wauters L., Vaeck N., Godefroid N., van der Hart H., Demeur M.// J. Phys. B.;Atom. Mol.Opt. Phys.-1997.-Vol.30.-P.4569-4588.
175. Glushkov A.V. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei during μ^- capture/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S., Dubrovskaya Y., Vitavetskaya L.// Recent Adv. in Theor. Phys. ad Systems (Berlin, Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-324.
176. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Consistent quantum theory of the recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu.,Dubrovskaya Yu.V.// J.Phys.CS.-2006.- Vol.35.-P.425-430.
177. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions/ Glushkov A.V.// Low Energy Antiproton Phys., AIP Serie.-2005.-Vol.796.-P.206-210.
178. Cohen J. Capture of antiprotons by some radioactive atoms and ions/ Cohen J. // Phys.Rev.A.-2004.-Vol.69.-P.022501-1-022501-10.
179. Korenman G. Collisions of cold antiprotonic helium atoms and ions with ordinary helium atoms/Korenman G., Yudin S.//J.Phys:CS.-2007.-Vol.88.-P.012060
180. Khetselius OYu (2009) 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 194:022009.

181. Крефт В.Д. Квантовая статистика систем заряженных частиц/ В.Д. Крефт, Д.Кремпп, В.Эбелинг, Г.Репке.-М.: Мир.-1990.-405С.
182. Окс Е.А. Спектроскопия плазмы с квазимонохроматическими электрическими полями/ Е.А. Окс.-М.:Энергоатомиздат.-1990.-240С.
183. Грим Г., Уширение спектральных линий в плазме/ Г.Грим.-М.: Мир.-1978.-480С.
184. Fortov V.E. Experimental study of optical properties of strongly coupled plasmas. Strongly Coupled Plasma Physics/ Fortov V.E., Bepobov V.E., Kulish M.I., Kuz S.I.- N-Y.: Elsevier Sci.Publ., 1990.- 571P.
185. Bonitz M. Introduction to Computational Methods in Many-Body Physics/ Eds. Bonitz M., Semkat D.-Rinton Press, Princeton.-2006.-540P.
186. Klimontovich Yu.L. Kinetic theory of non-ideal gases and non-ideal plasmas/ Klimontovich Yu.L.- N.-Y.: Pergamon Press,1982.-550С.; Kremp D.Progress in Nonequilibrium Green's Functions/ Kremp D., Semkat D.,Bonitz M.-Singapore: World. Sci., 2003.-480P.
187. Quiney H., Relativistic Quantum Mechanics of Atoms and Molecules/ Quiney H.//New Trends in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2002.-Vol.6.-P.135–173.
188. Scott N.S., 2DRMP: A suite of two-dimensional R-matrix propagation codes /Scott N.S., Scottb M.P., Burkeb P.G., Stitt T., Faro-Mazaa V., Denisd C., Maniopouloue A.//Computer Phys. Commun.-2009.-Vol.180.-P.2424–2449.
189. Ivanov L.N., PC atomic complex ‘Superatom-ISAN’: main possibilities and programs/Ivanov L.N., Ivanova E.P., Glushkov A.V., //e-Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Academy of Sciences, ASN1.-1991.-96P.
190. Cowan D., Methods of atomic structure calculations/Cowan D.-N.Y.:Acad., 1974.-280P.; Cowan Code, adapted by A.Kramida.-Troitsk: ISAN, version 1993.
191. Landau L.D., Lifshits E.M. Theoretical Physics: in 10 t. M.: Science, 1986. T.VI. Hydromechanics. 736P.
192. Parpia F.A., Generalized relativistic atomic structure package: GRASP/Parpia F.A., Froese-Fischer C., Grant I.//Comp.Phys.Commun.-1996.-Vol.94, N2.-P.249-270.

193. Reiher M., New Algorithms of Quantum Chemistry /Reiher M., Heß B.// Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, ed. by J.Grotendorst, John von Neumann Inst. for Computing, Julich, NIC Ser.-2000.-Vol 3.-P.479–505; Gedasimov V.N., An effect of chemical environment on spectra of conversion electrons for E3-transitions of ^{99m}Tc / Gedasimov V.N., Zelenkov A.G., Kulakov V.M., Pchelin V.A., Sokolovskaya M.V., Soldatov A.A., Chistyakov L.V.// JETP.-1984.-Vol.94.-P.1169-1178; Soldatov A.A., Relativistic X_α scattering waves method for molecular calculations//Preprint of I.V.Kurchatov Institute for Atomic Energy.-1983.-NIAE-3916.
194. Jensen H., DIRAC Code, a relativistic ab initio electronic structure program/ Jensen H., Saue T., Visscher L. with contr. 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 05.0.-2009; (<http://dirac.chem.sdu.dk>).
195. Bell, K.L., BERTHA: 4-Component Relativistic Molecular Quantum Mechanics/ Bell K.L., Berrington K., Crothers D., Hibbert A., Taylor K.T.//Supercomputing, Collision Processes, and Application, Series: Physics of Atoms and Molecules (Berlin, Springer).-2002.-P.213–224.
196. Martin W., NIST Spectra Database, version 2.0 / Martin C.//NIST.-Washington.-2004; (<http://physics.nist.gov/asd>); Moore C., NBS Spectra Database /Moore C.// NBS.-Washington.-1987.
197. Glushkov A.V.; Ivanov, L.N. DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **1993**, *26*, L379-386.
198. 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 / eds.: M. Hotokka, J. Maruani, E. Brändas, G. Delgado-Barrio (Berlin, Springer). 2013. Vol.28. Chapter 9. -P.161-178.*
199. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky E.B., Sukharev D.V. Resonance phenomena in heavy ions collisions and optimal laser ionization schemes for separating long-lived actinides and fission products in the nuclear fuel: Abs. of the Fifth International Conference on Radiation and Application in Various Fields of Research. Budva, Montenegro, 2017. -P.145.

200. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B. Spectroscopy of Rydberg atoms and relativistic quantum chaos. Odessa: TEC. 2018. -152P.
201. Glushkov A.V. Molecular Optics and Spectroscopy: The Perturbation Theory for Molecules. Odessa: ODEKU. 2018. -80P.
202. 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)*. 2018. Vol.78. Ch.9 <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.004>.
203. Glushkov, A.V. Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton Resonances. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2014, 548, -P.012020.
204. Glushkov, A.V. Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions. In *Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications*, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics; Nishikawa, K., Maruani, J., Brandas, E., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., Eds.; Springer: Dordrecht, 2012; Vol. 26, -P.231–252.
205. Glushkov, A.V. Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field. In *Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology*, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics; Hotokka, M., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Eds.; Springer: Cham, 2013; Vol. 27. -P.161-177.
206. Buyadzhi V.V. Laser multiphoton spectroscopy of atom embedded in Debye plasmas: multiphoton resonances and transitions. *Photoelectronics*. 2015, 24. -P.128-133.
207. 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* 2014, 23. -P.38-43.
208. Glushkov AV, Rusov VD, Ambrosov SV, Loboda AV (2003) Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions. In: Fazio G, Hanappe F (eds) *New Projects and New Lines of Research in Nuclear Physics*. World Scientific, Singapore, pp 126-132.
209. Glushkov AV, Khetselius OYu, DubrovskayaYuV, Loboda AV (2006) Sensing the capture of negative muon by atoms: Energy approach. *Sensor Electr. And Microsyst. Techn.* 3(4):31-35.

210. Glushkov AV, Khetselius OYu, Svinarenko AA (2012) Relativistic theory of cooperative muon- γ -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. In: Hoggan P, Brändas E, Maruani J, Delgado-Barrio G, Piecuch P (eds) *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 22. Springer, Dordrecht, pp 51-68.
211. Glushkov A.V., Relativistic quantum chemistry: Advanced approach to construction of the Green's Function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Florko T.A., Shakhman A.N.//*Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics*, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. M.Nascimento, J.Maruani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Berlin, **Springer**).-2015-Vol.29.-P.197-218.
212. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., *Computational methods of dynamics of classical and quantum systems*, Part 1. Odessa: OSENU, 2018.-150P.
213. Глушков О.В., Свинаренко А.А., Хецелиус О.Ю., Буюджи В.В., *Атомна оптика та спектрсокопія. Надтонка структура спектрів* Одеса: ОДЕКУ, 2018.-69С.
214. *Quantum Systems and Methods in Mathematics, Physics and Chemistry*, Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. A.V. Glushkov, O.Y. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi. Odessa.:TES, 2019. 200P.
215. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Dynamics of heat-mass-transfer, thermal turbulence and air ventilation in atmosphere of an industrial city. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2020. Vol.59. P.106-112.
216. O.Yu. Khetselius, A.V. Glushkov, Yu.Ya. Bunyakova, V.V. Buyadzhi, O.I. Bondar, V.N. Vaschenko, N. Bykowszczenko , New approach and microsystem technology to modelling dynamics of atmosphere ventilation of industrial city and elements of the “Green-City” construction technology// *Sensor Electronics and Microsystems Technologies*-2017.-Vol.14, N4.-P.37-46.

217. Sofronkov A.N., Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Romanova A.V., Ignatenko A.V., New geophysical complex-field approach to modelling dynamics of heat-mass-transfer and ventilation in atmosphere of the industrial region// *Physics of Aerodispersed Systems*. 2018. Vol.55. P.104-111.
218. Buyadzhi V.V., Sofronkov A.N., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Svinarenko A.A. New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. I. General Formalism// *Physics of Aerodispersed Syst.* 2018. Vol.55. P. 94-103.
219. Gubanova E.R., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Pavlenko E.P., New methods in analysis and project management of environmental activity: Electronic and radioactive waste. (Монографія) Kharkiv: FOP Panov A.N., 2017-116P.
220. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Stepanenko S.N., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. New energy, angle momentum and entropy balance approach to modelling climate and macroturbulent atmospheric dynamics, heat and mass transfer at macroscale. II. Computational algorithm. *Physics of Aerodispersed Systems*. 2019. Vol.57. P. 104-113
221. A.V. Glushkov, A.V. Romanova, V.V. Buyadzhi, E.V. Bakunina, O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, A. S. Belodonov, New balance approach to the modeling of macroturbulent atmospheric dynamics, spatial distribution of radionuclides in the global atmosphere, their environment impact after the nuclear accident at Fukushima nuclear power plant// *Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2017.-Vol.14, N4.-P.47-59*.
222. Bunyakova Yu.Ya., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Bykowszczenko N., Buyadzhi V.V., New approach and microsystem technology of advanced analysis and forecasting the air pollutant concentration temporal dynamics in atmosphere of the industrial cities// *Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2017.-Vol.14, N3.-P. 65-78*.
223. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N., Agayar E.V., Ternovsky V.B., Nonlinear chaos-dynamical approach to analysis of atmospheric radon ^{222}Rn concentration time series// *Indian Acad. Sci.-Conf.Ser.-2017.-Vol1.-P.31-36*.

224. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius, V.V. Buyadzhi Proceedings of the International Conference “Quantum systems in chemistry, physics and mathematics-2017” (QSCPM-2017), OSENU, MON of Ukraine.- Kh.: FOP Panov A.N., 2017-400P.
225. Smirnov A.V., Buyadzhi V.V., Ignatenko A.V., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of beryllium//Photoelectronics .-2016.-Vol.25.-P.26-33
226. Kuznetsova A. A., Glushkov A.V., Gurskaya M. Yu., Buyadzhi A.A., Ternovsky V.B., Optimized relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field: Sensing spectral parameters. Sensor Electronics and Microsystem Technologies. 2018. Vol.15, N4. P.50-57.
227. A.V. Glushkov, V.V. Buyadzhi, A.S. Kvasikova, A.V. Ignatenko, A.A. Kuznetsova, G.P. Prepelitsa and V.B. Ternovsky, Non-Linear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field and Laser Systems// Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Advances in Concepts and Applications, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer).-2017.-Vol.30.-P.169-180
228. *Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Gurskaya M.Y., Kuznetsova A.A., Ponomarenko E.L., Ternovsky V.B., Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field// Journal of Physics: Conf. Series (IOP, London, UK).-2017.-Vol.810.-P. 012047 (3p.).
229. Ignatenko A.V., Buyadzhi A.A., Buyadzhi V.V., Kuznetsova A.A., Mashkantsev A.A., Ternovsky E.V., Nonlinear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field. Advances in Quantum Chemistry (Elsevier).-2019.-Vol.78.-Ch.7.-P. 149-170;
a. <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.006>
230. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Smirnov A.V., Kuznetsova A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., An advanced laser photoionization separation scheme for radioactive isotopes and products of atomic energetics: Uranium and the transuranium elements. Sensor Electronics and Microsystem Technologies. 2017. Vol.14. N4. P.83-93.

231. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Glushkov A.V., Kuznetsova A.A., Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional and Radiative Spectroscopy of Ions in Plasmas In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 27-44.
232. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Buyadzhi V.V., Mykhailov O.L. Hyperfine and Electroweak Interaction in Heavy Finite Fermi-Systems and Parity Non-conservation Effect. In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. (eds) Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.65-81.
233. Buyadzhi V.V. Relativistic energy approach and many-body perturbation theory to computing electron-collision cross-sections of complex multielectron ions Photoelectronics. 2020. Vol.29. P.102-109.
234. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Advanced Quantum-Kinetic Model of Energy Exchange in Atmospheric Molecule Mixtures and CO₂ Laser-Molecule Interaction. In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 223-234.
235. Chernyshev A.S., Efimova E.A., Buyadzhi V.V., Nikola L.V., Cascade of Auger transitions in spectrum of xenon: Theoretical data. Photoelectronics. 2020. Vol.29. P.94-101
236. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Chernyshev A.S., Efimova E.A., Tsudik A.V., Theoretical Auger spectroscopy of solids: sensing energy parameters Sensor Electronics and Microsystem Technologies. 2020. Vol.17. N1. P.21-28.
237. *Buyadzhi V.V., Kuznetsova A.A., Buyadzhi A.A., Ternovsky E.V., Tkach T.B., Advanced Quantum Approach in Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas. Advances in Quantum Chemistry (Elsevier).- 2019.-Vol.78.- P.171-191;
<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.002> [Scopus}

238. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Mykhailov O.L., Khetselius O.Yu., Determination of radiation decay parameters for heavy complex atomic systems. *Sensor Electronics and Microsystem Techn.* 2019. Vol.16. N3. P.59-68.
239. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Sensing and analysis of radioactive radon ^{222}Rn concentration chaotic variability in an atmosphere environment *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol.16. N4. P.27-36.
240. E.A.Efimova, A.S.Chernyshev, V.V.Buyadzhi, L.V.Nikola, Theoretical Auger spectroscopy of the neon: transition energies and widths. *Photoelectronics.* 2019. Vol.28. P.24-31.
241. Buyadzhi V.V., Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions: advanced energy approach. *Photoelectronics.* 2019. Vol.28. P.62-67.
242. Буюджи В.В., Глушков О.В., Спектроскопія за рахунок зіткнень електрон- і іон-атомних систем: Енергетичний підхід. Одеса: Гельветика, 2020, 210С.
243. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Atoms in a laser field and laser separation of the radioactive isotopes. Odessa: TES, 2018.-152P.
244. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Tsudik A.V., Zaichko P.A., Relativistic approach to calculation of ionization characteristics for rydberg alkali atom in a black-body radiation field. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.* 2019. Vol.16. N3. P.69-77.
245. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Chernyakova Y.G., Tkach T.B., Buyadzhi A., Zaichko P.A. Advanced computational approach in electron-collisional spectroscopy of atoms and multicharged ions in plasmas. *Journal of Physics: C. Series (IOP, London).* 2018. Vol.1136. P.012011.
246. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Svinarenko A.A., Ternovsky E.V., Advanced relativistic energy approach in electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in plasma. In: *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. Yan A. Wang, Mark Thachuk, Roman Krems, Jean Maruani (Springer).*-2018-Vol.31.-Chapter 4.-P.55-69.
247. V.V. Buyadzhi, T.B. Tkach, A.P. Lavrenko, E.S. Romanenko, Spectroscopy of multicharged ions in plasmas: oscillator strengths of Be-like ions GaXXVIII and GeXXIX. *Photoelectronics.* 2018. Vol. 27. P.24-29.

248. Glushkov A.V., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Ignatenko A. V., Kuznetsova A. A., Mashkantsev A., A chaos-dynamical approach to analysis, processing and forecasting measurements data of the chaotic quantum and laser systems and sensors. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2018. Vol.15,N4. P.41-49.
249. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B. New Generalized Chaos-Geometric and Neural Networks Approach to Nonlinear Dynamics of the Complex Systems. *Int. Robotics & Automation Journ.* 2018. Vol. 4. P.167-169
250. Ternovsky E.V., Buyadzhi V.V., Tsudik A.V., Svinarenko A.A., Relativistic calculation of Rydberg autoionization states parameters in spectrum of barium. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.34-43.
251. Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Chaos and strange attractors in environmental radioactivity dynamics of some geosystems: Atmospheric radon ^{222}Rn // *Dynamical Systems Theory* Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski (Lodz, Poland).-2017.-P.BIF323 (10P.)
252. Buyadzhi V.V., Belodonov A.S., Mironenko D., Mashkantsev A.A., Kir'yanov S.A., Buyadzhi A.A., Glushkov A.V., Nonlinear dynamics of external cavity semiconductor laser system with elements of a chaos// *Dynamical Systems Theory* Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski (Lodz, Poland).-2017.-P.BIF325 (9P.).
253. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Gurskaya M., Khetselius O., Ternovsky E.V., Mashkantsev A.A., Kirianov S.V., A novel combined chaos-geometric and vibration blind source monitoring approach to damage analysis and detection of engineering structures (nuclear reactors) under varying environmental, operational conditions and emergency accidents// *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* 2017. Vol.17, N4.-P.60-72.
254. *Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B. and Mansarliysky V.F., *Computing of radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced Code. Journal of Physics: C. Series.* 2017. Vol.905. P. 012003. [doi:10.1088/1742-6596/905/1/012003](https://doi.org/10.1088/1742-6596/905/1/012003)*
255. Buyadzhi V.V., Chernyakova Yu.G., Antoshkina O.A., Tkach T.B., Spectroscopy of multicharged ions in plasmas: Oscillator strengths of Be-like ion Fe// *Photoelectronics*.-2017.-Vol.26.-P.94-102.

256. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuznetsova A.A., Buyadzhi A.A., Prepelitsa G.P. and Ternovsky V.B., Nonlinear dynamics of laser systems with elements of a chaos: Advanced computational code. *Journal of Physics: C. Series* (IOP, London). 2017. Vol.905. P. 012007. [doi:10.1088/1742-6596/905/1/012007](https://doi.org/10.1088/1742-6596/905/1/012007)
257. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Y.Y., Florko T. et al , An effective chaos-geometric computational approach to analysis and prediction of evolutionary dynamics of the environmental systems. *Journal of Physics: Conf. Series* (IOP, London, UK).-2017.-Vol.905.-P. 012036.
258. Glushkov A.V., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Khetselius O.Yu., New approach and microsystem technology of advanced non-linear analysis and modelling chaotic environmental radioactivity dynamics. *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* 2017. Vol.17, N3. P.24-37.
259. Khetselius OYu, Zaichko PA, Smirnov AV, Buyadzhi VV, Ternovsky VB, Florko TA, Mansarliysky VF (2017) Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Hyperfine Structure and Oscillator Strength Parameters for Some Heavy Element Atoms and Ions. In: Tadjer A, Pavlov R, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G (eds) *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 30. Springer, Cham, pp 271-281
260. Smirnov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Belodonov A.S., Advanced relativistic approach in spectroscopy of complex autoionization resonances in atomic spectra// *Photoelectronics*.-2017.-Vol.26.-P.114-123.
261. Glushkov A., Khetselius O., Svinarenko A., Buyadzhi V., Ternovsky V., Kuznetsova A., Bashkarev P., Relativistic perturbation theory formalism to computing spectra and radiation characteristics: Application to heavy elements. In: *Recent Studies in Perturbation Theory*, Ed. D. Uzunov (InTech, EU).-2017.-P.131-150.
262. Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Buyadzhi V.V., Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonances//In: *Rare-Earth Element*, Ed. Jose Edgar Alfonso Orjuela (Intech, EU).-2017.-P.83-104.

263. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Bunyakova Yu.Ya., New nonlinear chaos-dynamical analysis of atmospheric radon ^{222}Rn concentration time series from beta particles activity data of radon monitors// Photoelectronics.-2017.-Vol.26.-P.29-40.
264. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Geometry of Chaos: Advanced computational approach to treating chaotic dynamics of environmental radioactivity systems II. Proc.of Intern. Geometry Center.-2016.-Vol.9,N1.-P.4-9.
265. Buyadzhi V.V., Chernyakova Yu.G., Smirnov A.V., Tkach T.B., Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions in plasma: Be-like ions. Photoelectronics .-2016.-Vol.25.-P.97-101
266. Serga I.N., Kulakli T.A., Smirnov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Relativistic theory of spectra of usual and exotic atoms: nitrogen hyperfine transitions energies. Photoelectronics .-2016.-Vol.25.-P.34-39
267. Buyadzhi V. Electron-Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas: Relativistic Energy Approach. Abs. of the 24 International Workshop “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology QSCP – XXIV” (OSEN, Odessa) Ukraine. 2019. P.62
268. Buyadzhi V.V., Svinarenko A., Glushkov A., Plysetska Ye., Atomic ensemble in a laser pulse of the nonrectangular shape: Optical bi-stability, resonant, noise and chaos effects. Abs. of the 31st Int Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. (FR-064) P.485.
269. Buyadzhi V., Electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in Debye plasmas: Relativistic energy approach. Abs. of the 31st Int Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. (TU-131) P.916.
270. Buyadzhi V.V., Buyadzhi A., Chernyshev A., Plisetskaya E., Pavlov E., Kir'yanov S. Nonlinear dynamics of laser systems: Chaos, bifurcations and strange attractors". Abs. of the 15th International Conference "Dynamical Systems - Theory and Applications" (Lodz University; Lodz, Poland). 2019. (BIF271)
271. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Chernyakova Yu., Svinarenko A.A., Bogdanova D., Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions in plasma. Abs. of the III Internat.Conf."Quantum Systems in Physics and Mathematics". (OSEN, Odessa). Ukraine. 2019. P.

272. Buyadzhi V.V., Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions: Advanced Relativistic Approach. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII). Kruger Park (South Africa). 2018. P.47.
273. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T., Buyadzhi A.A., Chernyakova Y.G., Multi-photon Spectroscopy of Many-electron Atoms and Ions in the Debye Plasmas. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII). Kruger Park (South Africa). 2018. P.48.
274. Buyadzhi V., An advanced relativistic energy approach in electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in plasmas. Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics. Davis (USA). 2018. P.P31.
275. Buyadzhi V.V., Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions: Advanced Quantum Approach. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS). Dublin (Ireland). 2018. P.100 (Tu.P.22).
276. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T.B., Chernyakova Y.G., Multi-photon Spectroscopy of Many-electron Atoms and Ions in the Debye Plasmas. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS). Dublin (Ireland). 2018. P. 127 (We.P.22).
277. Buyadzhi V., Electron-Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in plas-mas: Relativistic Energy Approach. Abs. of the 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems. Torun (Poland). 2018. P.94(A33).
278. Buyadzhi V., Ternovsky E., Glushkov A., Khetselius O., Multi-photon spectroscopy of the many-electron atoms and ions in a laser field with accounting for the Debye plasma effects. Abs. of the 26th International Conference on Atomic Physics, (ICAP 2018). Barcelona (Spain). 2018. P.344.
279. Khetselius O., Glushkov A., Ternovsky E., Buyadzhi V., Laser Electron-Gamma-Nuclear Spectroscopy of Atoms and Multicharged Ions: Shake-Up and NEET Effects. Abs. of the 26th International Conference on Atomic Physics, (ICAP 2018).-Barcelona (Spain). 2018. P.346.
280. Buyadzhi V.V., Antoshkina O.A., Ternovsky E.V., Kulakli T.A., Advanced relativistic model potential approach to computing the radiation transition characteristics for atoms and multicharged ions. Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics. Paris (France). 2017. P.207.

281. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T.B., Advanced computational approach in electron-collisional spectroscopy of atoms and multicharged ions in plasmas. Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics. Paris (France). 2017. P.208.
282. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Dubrovskaya Y.V., Khetselius O.Yu., New electron- β -nuclear spectroscopy of molecules and chemical bond effect on the β -decay parameters// Abs. of the 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. (Munich, Germany). 2017. P. PO3-255.
283. Buyadzhi V.V., Multi-Photon Dynamics and Spectroscopy of the Many-Electron Atomic Systems in the Debye Plasma in presence of a Intense Laser Field. Abs. of the XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology. Vancouver, BC, Canada. 2016.
284. Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Smirnov A.V., Mansarliysky V.F., Relativistic density functional theory with accounting for nuclear and radiation corrections for heavy atomic (nuclear) systems. Abs. of the XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology. Vancouver, BC, Canada. 2016.
285. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Buyadzhi V.V., Quantum Geometry: An effective approach to quantization of quasi-stationary states for bispinor Dirac equation and photon propagator gauge problem// Abstr.of International Conference “Geometry in Odessa-2016”. Odessa (Ukraine). 2016. P.20.
286. Buyadzhi V.V., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Ignatenko A.V., Excitation rates for nuclear isomers in hot plasma and photon- plasmon transitions in positronium. Abs. of the International Nuclear Physics Conference. Adelaide (Australia). 2016. P.ID465.
287. Buyadzhi V., Khetselius O., Glushkov A., Antoshkina O., Kulakli T., Advanced relativistic model potential approach to computing the radiation transition and autoionization characteristics for atoms and multicharged ions. Abs. of the 23rd International Conference on Spectral Line Shapes. Torun (Polland). 2016. P.159.
288. Buyadzhi V.V., Smirnov A.V., Antoshkina O.A., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Spectroscopy of excited and autoionization states in spectra of multicharged ions: He-like ions. Abs. of the 8th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016). Kielce (Polland). 2016. P.86 (PA20).

289. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A., Computing radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced code. Abs. of the 28th IUPAP Conference on Computational Physics. Gauteng (South Africa). 2016. P.5 (ID-110).
290. Buyadzhi V.V., Multi-photon spectroscopy of the many-electron atoms and ions of the Debye plasma in a laser field. Abs. of the 23rd International Conference on Spectral Line Shapes. Torun (Poland). 2016. P.157
291. Глушков А.В., Хецелиус О.Ю., Свиначенко А.А., Буяджи В.В. Спектроскопія автоіонізаційних станів важких атомів і багатозарядних іонів: Чисельні моделі. ТЕС, Odessa, 2016.
292. Glushkov A.V., Atom in electromagnetic field.- Kiev, KNT. 2005. 405 P.
293. Chernyakova Yu.G., Ignatenko V.M., Vitavetskaya L.A., Sensing the tokamak plasma parameters by means high resolution x-ray theoretical spectroscopy method: New scheme// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2004.-N2.-P.20-24.
294. Glushkov A.V., Ivanova E.P. Calculation of the spectra of Ne- and F-like ions by the method of relativistic perturbation theory with a model zero approximation. In: Spectroscopy of multiply charged ions. Ed. Safronova U.I.- M.: Nauka.-1986.-P.5-95.
295. Gogava A.L., Ivanova E.P. Calculation of Na-like spectra – satellites to 2-3 transitions in Ne-like ions. In: Spectroscopy of autoionization states of atoms and ions. Ed. Safronova U.I.-M.: Nauka.-1988.-P.212-256.
296. Ivanova E.P., Gulov A.V. Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence. Atom.Data.Nucl.Data.Tabl. 1991. Vol.49. P.1-64.
297. Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., Ternovsky V.B., Serga I.N., Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems With Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects . Advances in Quantum Chemistry (Elsevier). 2019. Vol.78. Ch.9. P.193-222; <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.003>.
298. Khetselius OYu (2011) Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems. Astroprint, Odessa.
299. Khetselius O Yu (2019) Optimized relativistic many-body perturbation theory calculation of wavelengths and oscillator strengths for Li-like multicharged ions. Advances in Quantum Chemistry, Vol 78, Elsevier, Amsterdam, pp 223-247. <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.001>.

300. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Ingatenko A.V., Quantum geometry and dynamics of resonances.-Odessa: OSENU, 2020. 150p.
301. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Atomic optics and spectroscopy P.3.- Odessa: ODECU, 2020. 102p.
302. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
303. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Methods of computational mathematics and mathematical physics, P.1. Odessa: TEC, 2015.-180P.
304. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.M., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Nonlinear dynamics of the industrial city's atmospheric ventilation: New differential equations model and chaos. In: Awrejcewicz (Ed.) Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Perspectives in Dynamical Systems III: Control and Stability (Springer). 2021. Vol.364. P. 161-170;
<https://www.springer.com/gp/book/9783030773137>
305. Glushkov A.V., Tsudik, A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V. et al, Deterministic Chaos, Bifurcations and Strange Attractors in Nonlinear Dynamics of Relativistic Backward-Wave Tube In: Awrejcewicz (Ed.) Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Perspectives in Dynamical Systems II: Mathematical and Numerical Approaches (Springer). 2021. Vol.364. P. 121-130;
<https://www.springer.com/gp/book/9783030773090>
306. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Frontiers in green radiochemistry: New optimized quantum approach to laser separation of isotopes and transmutation of radioactive waste. In: Ed. L. Mammino, Green Chemistry and Computational Chemistry, 1st Ed.; Elsevier, 2022. Ch.16. P.385-402;
307. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Sofronkov A.N., Svinarenko A.A., Catalysis as an effective tool of green chemistry: Novel electrodynamic and quantum chemical computational approaches to catalytic processes modelling In: Ed. L. Mammino, Green Chemistry and Computational Chemistry, 1st Ed.; Elsevier, 2022. P.333-354;
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/B9780128198797000441>

Наукове електронне видання

**ТЕОРЕТИЧНА СПЕКТРОСКОПІЯ СКЛАДНИХ АТОМНИХ СИСТЕМ В
ІНТЕНСИВНОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ**

МОНОГРАФІЯ

д.ф.-м.н., проф. О.В. Глушков, д.ф.-м.н., проф. О.Ю. Хецеліус, А.А.,
д.ф.-м.н., проф. А.А. Свиначенко, д.ф.-м.н., доц. В.В. Буяджи

Відповідальний редактор:
Глушков Олександр Васильович

Видавець і виготовлювач
Одеський державний екологічний університет
вул. Львівська, 15, м. Одеса, 65016
тел./факс: (0482) 32-67-35
E-mail: info@odeku.edu.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
ДК № 5242 від 08.11.2016