

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

**На правах рукопису**

**Терновський Валентин Борисович**

**УДК 539.184: 539.192**

**СПЕКТРОСКОПІЯ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ  
ТА РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ КВАНТОВИЙ ХАОС**

**01.04.05 – оптика та лазерна фізика**

**ДИ С Е Р Т А Ц І Я**

**на здобуття наукового ступеня**

**кандидата фізико-математичних наук**

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

**ОДЕСА – 2015**

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b>	<b>6</b>
<b>РОЗДІЛ 1. СУЧАСНИЙ СТАН ОПТИКИ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У ЗОВНІШНЬОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ. ОГЛЯД ТЕОРЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕНЬ ЕЛЕМЕНТІВ КВАНТОВОГО ХАОСУ В АТОМНИХ СИСТЕМАХ</b>	<b>14</b>
1.1. Вступні зауваження. Якісна оптика та спектроскопія рідбергівських атомів	14
1.2. Огляд ключових методів теоретичних обчислень в квантовій оптиці та спектроскопії рідбергівських атомів	16
1.3. Сучасні методи квантової оптики та спектроскопії і теорії систем та хаосу та їх застосування для дослідження динаміки рідбергівських атомів у зовнішньому електромагнітному полі	19
1.3.1. Феномен хаосу в динаміці нелінійних процесів у складних системах: Огляд стандартних методик	19
1.3.2. Нерелятивістські атомні системи в електромагнітному полі та актуальні проблеми теорій ефекту Штарку та квантового хаосу	
Релятивістський квантовий хаос – новий феномен	23
1.4. Заключні зауваження	27
<b>РОЗДІЛ 2. НОВІ РЕЛЯТИВІСТСЬКІ ПІДХОДИ В СПЕКТРОСКОПІЇ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У DC, AC ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ</b>	<b>29</b>
2.1. Вступні зауваження	29
2.2. Новий релятивістський підхід в спектроскопії важких рідбергівських систем	31
2.2.1. Фундаментальні основи нового релятивістського методу в спектроскопії важких рідбергівських атомів: Нульове наближення релятивістської ТЗ	31

2.2.2. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: узагальнена Glushkov-Ivanov версія	37
2.2.3. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: Урахування обмінно-кореляційних ефектів та мінімізація калібрувальних-неінваріантних внесків	40
2.3. Новий релятивістський квантово-динамічний підхід до опису хаотичної динаміки важких рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі	43
2.3.1. Елементи нової версії операторної ТЗ для багатоелектронних атомних систем в електромагнітному полі, теорії квазіенергетичних станів та методу комплексних координат	43
2.3.2. Новий релятивістський квантово-динамічний підхід до обчислення характеристик атомних систем у електромагнітному полі	48
2.4. Висновки до розділу 2	53
<b>РОЗДІЛ 3. НОВИЙ КОМПЛЕКСНИЙ ХАОС-КІБЕРНЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ, АНАЛІЗУ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМНИХ СИСТЕМАХ</b>	54
3.1. Вступні зауваження. Тест на хаос Готтвода-Мелбена	54
3.2. Технологія аналізу та реконструкції фазового простору	57
3.3. Відновлення розмірності атрактора динамічної системи	60
3.4. Характеристики часового ряду: топологічні та динамічні інваріанти важких рідбергівських атомних систем	64
3.5. Новий хаос-кібернетичний підхід до побудови моделі прогнозу хаотичних особливостей динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем з використанням поліноміальних та вейвлет-розкладань	68
3.6. Блок-схема загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем	71
3.6.1. Спектральні методи дослідження та характеристики хаосу в рідбергівських атомних системах	71

3.6.2. Блок-схема загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем	74
3.7. Висновок до розділу 3	76
<b>РОЗДІЛ 4. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ МІКРОХВИЛЬОВОМУ ПОЛІ З ЕЛЕМЕНТАМИ РЕЛЯТИВІСТСЬКОГО ХАОСУ: НОВІ ЕФЕКТИ І НОВІ ДАНІ</b>	78
4.1. Вступні зауваження	78
4.2. Тестовий розрахунок ймовірностей та сил осциляторів у важких Li-подібних багатозарядних іонах: Експериментальні та тестові теоретичні дані	79
4.3. Результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик релятивістських рідбергівських атомних систем: Rb, Cs, Fr	83
4.3.1. Енергії рівнів, ймовірності та радіаційні матричні елементи для переходів у спектрах важких багатоелектронних атомах: Rb, Cs, Fr	83
4.3.2. Енергії рівнів, радіаційні матричні елементи переходів та часи життя для важких атомів Rb, Cs, Fr у високозбуджених рідбергівських станах	89
4.4. Спектроскопія і релятивістська хаотична динаміка важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі: Дані квантово-динамічного, спектроскопічного та хаос-кібернетичного обчислень	97
4.4.1. Результати розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів рідбергівських важких багатоелектронних атомах: Rb, Cs, Fr	97
4.4.2. Спектроскопія та іонізаційна динаміка релятивістських рідбергівських атомів рубідію і францію в мікрохвильовому полі: Квантовий розрахунок	104
4.4.3. Хаос-кібернетичного моделювання динаміки важких рідбергівських атомів у мікрохвильовому полі: Релятивістський квантовий хаос	111
<b>ВИСНОВКИ</b>	118
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b>	121

## Список скорочень в тексті дисертації, сталі, одиниці

- ДФ (DF) – Дірака-Фока (метод)  
 ДКШ (DKS) – Дірака-Кона-Шема (метод)  
 ЕФ (EF) – енергетичний формалізм (energy formalism)  
 КАМ – Колмогорова-Арнольда-Мозера (...теорема)  
 КЕД (QED) – квантовоелектродинамічний (quantum electrodynamics)  
 ККЕС (QQES) - квазістаціонарних, квазіенергетичних станів (формалізм)  
 КН - кулонівське наближення  
 НКД (QDA) – наближення квантового дефекту  
 МКОК – метод комплексного обертання координат  
 МКК (CCR) – метод комплексних координат (complex coordinates method)  
 ММП (MP) – метод модельного потенціалу (model-potential)  
 НКД (QDA) – наближення квантового дефекту  
 ОК (ефекти) – обмінно-кореляційні (ефекти)  
 ОТЗ (OPT) – операторна теорія збурень  
 ЕФ (EF) – енергетичний формалізм (energy formalism)  
 РМР – релятивістське наближення МР (ab initio)  
 РХФ – релятивістське наближення Хартрі-Фоку  
 РОТЗ (ROPT) – релятивістська операторна теорія збурень  
 ТЗ (PT) – теорія збурень (perturbation theory)  
 ТЗДФ – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням;  
 ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням;  
 Coupled Cluster (CC) – зв'язаних кластерів (наближення)  
 Correlation dimension – Кореляційна розмірність  
 DC – direct current  
 Embedding dimension – розмірність вкладення  
 LE – показники Ляпунова (Lyapunov's exponents)  
 ҚР – квазі-частинка (quasi-particle)  
 QQES – quasi-stationary quasienergy states (formalism)  
 Single-Double (SD) (states, configurations) – 1-,2- збуджені (стани, конфігурації)
- Фундаментальні сталі:**  
 Швидкість світла  $c=2,997925 \cdot 10^8$  м/с; Елементарний заряд  $e=1,60219 \cdot 10^{-19}$  Кл;  
 Маса електрона  $m=9,1095 \cdot 10^{-31}$  кг; Постійна Планка  $\hbar=1,05459 \cdot 10^{-34}$  Дж·с;  
 Постійна Рідберга  $R_\infty=1,0973732 \cdot 10^7$  м<sup>-1</sup> Борівський радіус  $\hbar^2/me^2=0,5291773$  Å;  
 Постійна тонкої структури  $\alpha=e^2/\hbar c, 1/\alpha=137,03597$ ;
- Одиниці.** Всюди, де не зазначено, використані атомні одиниці:  $e=1, \hbar=1, m=1$  ( $c=137,03597$ ). Атомні од. довжини, часу, швидкості:  $\hbar^2/me^2=5,291773 \cdot 10^{-11}$  м,  $\hbar^3/me^4=2,4189 \cdot 10^{-17}$  с,  $e^2/\hbar=2,1877 \cdot 10^6$  м/с. Атомна одиниця енергії (а.о.е.)  $me^4/\hbar^2=2Ry=27,2116$  eV= $4,3598 \cdot 10^{-18}$  Дж= $2,19475 \cdot 10^5$  см<sup>-1</sup> ( $me^4/2\hbar^2= Ry$  – Рідберг). Енергія в кулонівських одиницях (к.о.): 1 к.о.е.= $Z^2$  а.о.е. ( $Z$  – заряд ядра атома). Релятивістські одиниці:  $\hbar=1, c=1, m=1, e^2=1/137,03597$ .

## ВСТУП

**Актуальність теми.** За теперішнього часу до числа вкрай актуальних та надто складних напрямків сучасної квантової (атомної) оптики та спектроскопії безумовно відноситься дослідження по спектроскопії рідбергівських атомів (тобто атомів, які знаходяться у високо збуджених станах з великим значенням головного квантового числа  $n \gg 1$ ). Величезна актуальність дослідження енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів, звичайно, обумовлена стандартними потребами в спектроскопічній інформації цілого ряду додатків та суміжних фізичних дисциплін, які включають атомну та молекулярну оптику і спектроскопію, квантову електроніку, лазерну фізику, побудову кінетичних моделей нових лазерних схем короткохвильового діапазону, фізику та хімію лабораторної, астрофізичної плазми, астрофізику та радіоастрономію (добре відомі факти про те, що у міжзоряних хмарах знайдені лінії поглинення між рідбергівськими станами з  $n \sim 300-700$ ). Унікальні властивості рідбергівських атомів, пов'язані із надто малими потенціалами іонізації, достатньо великими розмірами (характерний розмір рідбергівської орбіти  $n^2 a_0 / Z$ ,  $a_0 = \hbar^2 / me^2$ ), досить великим часом життя у порівнянні із звичайними атомними станами, нарешті, безпрецедентною для звичайних атомів чутливістю до зовнішніх електромагнітних полів, із-за чого ці поля є надто сильними, обумовили в останні роки ще більш інтенсивні дослідження рідбергівських атомів, зокрема, на основі й принципово нових експериментальних методів лазерної спектроскопії, магнітно-оптичних пасток, джерел синхротронного випромінювання, beam-foil спектроскопі, криогенної апаратури тощо. Відповідно, широкомасштабні дослідження привели до цілої низки унікальних наукових відкриттів, напр., про новий стан речовини – рідбергівську матерію, отримання бозе-конденсату у парах рідбергівських лужних атомів, фонтанів холодних атомів, нові види інтерферометрії, атомних часів, перші моделі атомних машин Карно тощо. В той же час, не дивлячись на наявність досить значної кількості теоретичних методів в атомній спектроскопії (напр., стандартні методи типу Дірака-Фока (ДФ), Харт-

рі-Фока (ХФ), наближення квантового дефекту (НКД), функціоналу густини, псевдопотенціалу тощо для атомів у вільному стані; різні версії теорії збурень (ТЗ) по зовнішньому полю, квазікласичні й класичні моделі тощо для атомів у полі), сучасний стан опису рідбергівських атомів є недостатньо задовільним, особливо, коли мова йде про важкі атоми. Для важких рідбергівських атомів як у вільному стані, так й в зовнішньому полі принципово важливим є прецизійне урахування як релятивістських, так й обмінно-кореляційних (ОК) ефектів, у т.ч. ефектів суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах (ефект, який не враховується в спрощених воднеподібних моделях) і тиску континууму, з обов'язковою оптимізацією базисів релятивістських рідбергівських орбіталей. Опис DC, AC ефектів Штарку на даний час час в спектроскопії рідбергівських атомів проводиться переважно на основі нерелятивістських підходів, які навряд чи можуть адекватно описувати важкі рідбергівські атоми. Це пояснює суттєво низький рівень необхідної кількості спектральних даних по цим атомам. Це ж стосується й відносно нового класу задач про спектральну динаміку іонізації рідбергівських атомів в НВЧ полі з проявом ефектів квантового хаосу, які досі уривчасто обчислювались лише у нерелятивістському наближенні, тоді як феномен релятивістського квантового хаосу у важких рідбергівських атомах (наш термін) залишається практично не розглянутим. Таким чином, в сучасній спектроскопії релятивістських рідбергівських атомів у вільному стані і в зовнішньому електромагнітному полі існує гостра необхідність, по-перше, прецизійних релятивістських методів обчислення спектрів та радіаційних характеристик цих атомів, по-друге, опис нового явища релятивістського квантово-оптичного хаосу в рідбергівських системах, напр., в НВЧ полі.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дослідження, виконані в роботі, увійшли в плани НДР Одеського державного екологічного університету (1997-2015): проект Державного фонду фундаментальних досліджень №3.4/382 Міністерства освіти і науки України “Електродинамічне і квантовохімічне моделювання каталітичних процесів за участю двохатомних молекул на металах, їх сполуках” (розд. “Вплив зовнішніх полів”; № держр.

0198U002193); “Квантово-механічні методи розрахунку атомно-молекулярних систем у зовнішніх електричному і лазерному полях. Нелінійні селективні фотопроцеси в атомах і молекулах”, “Квантово-механічні методи розрахунку ядерних, атомних та молекулярних систем у зовнішніх електричному, магнітному і лазерному полях. Динамічний хаос в атомних і мультіосциляторних системах”, “Нейронномережеве моделювання у кібернетиці, прикладній математиці, геофізиці та теорії викладання математики”, “Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах класичної, квантової механіки, КЕД” (№ держр. 0104U002222, 0104U 002223), “Розвиток нових високоточних методів розрахунку елементарних атомних процесів, вкл. процеси у полі лазерного випромінювання, та нових оптимальних технологічних схем лазерного розділення ізотопів” у відп. з грантом Президента України від 26.06.08 № 207/2008рп (N держр. 0108U010783), НДР “Розвиток та застосування нових квантово-механічних та КЕД методів в задачах обчислювальної математики та математичної фізики, теорії ядра і частинок, квантовій геометрії” (№ держр. 0109U000348), “Розвиток та застосування кібернетичних методів до дослідження динаміки ієрархічних хаотичних процесів у квантових, інформаційних системах” (№ держр. 0111U005226), “Розвиток і застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики і атомної та ядерної спектроскопії” (№ держр. 0111U005225).

**Мета і завдання дослідження.** Метою роботи є розробка нового прецизійного релятивістського методу розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів у вільному стані та у зовнішньому електромагнітному полі (DC, AC ефект Штарка), а також моделювання хаотичної спектроскопії і динаміки іонізації важких рідбергівських атомів в мікрохвильовому полі з кількісним описом релятивістського квантово-оптичного хаосу.

Для досягнення мети дослідження були сформульовані такі завдання:

1. Розробити новий, прецизійний суттєво релятивістський підхід до опису та обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів з обов'язковим прецизійним урахуванням ОК ефектів, у т.ч.



ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах і тиску континууму.

2. Провести розрахунки енергій рівнів, радіаційних ширин (амплітуд переходів) для переходів  $n'lj_{1/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах важких Li-подібних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$ , низько розташованих переходів  $n'lj - n'l'j'$  ( $n=5-10$ ,  $l=0-4$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах атомів Rb, Cs, Fr.

3. Провести розрахунки енергетичних та спектроскопічних характеристик (енергії рівнів, радіаційні ширини, амплітуди переходів, час життя рідбергівських станів) рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, для переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3/2} \rightarrow n'D_{3/2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs, Fr.

4. Розвинути новий прецизійний вперше релятивістський підхід до розрахунку та аналізу енергетичних та спектроскопічних характеристик (енергії та ширини штарківських резонансів) важких рідбергівських атомів в DC, AC електромагнітному полі, динаміки хаотичної іонізації важких рідбергівських систем у мікрохвильовому полі.

5. Провести обчислення енергії і та ширини штарківських резонансів (DC ефект Штарку) для рідбергівських атомів Cs і Fr в DC електричному полі для різних значень напруженостей електричного поля і різних рідбергівських станів.

6. Розробити та адаптувати універсальний, хаос-кібернетичний апарат для розв'язання задач кількісного опису та аналізу квантово-оптичних хаотичних особливостей в динаміці та спектроскопії релятивістських рідбергівських атомів в електромагнітному полі.

7. Провести моделювання спектроскопії та динаміки іонізації лужних атомів Rb (тест), Cs, Fr у рідбергівських станах ( $n=60-80$ ) в мікрохвильовому полі ( $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87$  ГГц, 36 ГГц) з розрахунком ймовірностей іонізації, а також характеристик релятивістського квантового хаосу, зокрема, кореляційних розмірностей, показників Ляпунова, ентропії Колмогорова тощо.

*Об'єкт дослідження* – квантова оптика, спектроскопія та динаміка релятивістських рідбергівських атомів.

*Предмет дослідження* – нові прецизійні релятивістські методи в спектроскопії важких рідбергівських атомів у вільному стані та зовнішньому електромагнітному полі з описом релятивістського квантового хаосу.

*Методи дослідження*: методи квантової механіки та квантової електродинаміки, атомної спектроскопії, методи теорії динамічних систем, хаосу, нелінійного аналізу (у т.ч., методи кореляційного інтегралу, фрактальної геометрії, спектральні методи тощо), обчислювальні методи в квантовій оптиці тощо.

**Наукова новизна отриманих результатів** визначається як принциповою новизною комплексу розроблених релятивістських моделей та методів в спектроскопії важких рідбергівських атомів як у вільному стані, так й зовнішньому електромагнітному полі, а також вперше чітко сформованим та кількісним описом нового явища “релятивістського квантового хаосу” в спектроскопії та динаміці рідбергівських систем. Основні елементи новизни полягають у такому:

1. Запропонований та реалізований новий прецизійний суттєво релятивістський підхід до опису та обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів з оптимізацією базисів релятивістських рідбергівських орбіталей, дотриманням принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні радіаційних ширин, прецизійним урахуванням ОК ефектів, у т.ч. ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах і тиску континууму.

2. На основі тестових обчислень енергій рівнів, радіаційних ширин (амплітуд переходів) для переходів  $n'l_{j/2} - n'l'j'$  ( $n=2-20$ ,  $l=0-5$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах важких Li-подібних іонів із зарядом ядра  $Z=20-87$ , низько розташованих переходів  $n'l - n'l'j'$  ( $n=5-10$ ,  $l=0-4$ ,  $j=1/2-5/2$ ) в спектрах атомів Rb, Cs, Fr показано, що розроблений релятивістський метод у порівнянні з експериментом переважає по точності як спрощені методи типу НКД, квазікласичні моделі, так й методи типу РХФ, ДФ за рахунок прецизійного урахування ОК ефектів, ефекту некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму тощо.

3. Вперше отримано прецизійні дані по енергіям рівнів, радіаційним ширинам, амплітудам переходів, часу життя станів рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, для переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3/2} \rightarrow n'D_{3/2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; вперше отримано прецизійні дані по ймовірностям переходів, часам життя рідбергівських станів та переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$ ,  $7P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n=20-80$ ) Fr.

4. Розвинуто новий прецизійний вперше релятивістський підхід до розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів важких рідбергівських атомів в DC, AC електромагнітному полі, динаміки хаотичної іонізації важких рідбергівських атомних систем у мікрохвильовому НВЧ полі та на його основі успішно реалізовано тестові обчислення DC ефекту Штарку для напруженостей  $\varepsilon=2.189$ кВ/см і рідбергівських станів  $n_1=18-23$  ( $n_2=0-2; m=0$ ) Rb; вперше отримано нові дані по штарківським резонансам та залежностям їх енергій від напруженості поля для низки рідбергівських станів Cs і Fr.

5. Розвинуто новий непертурбативний релятивістський підхід до моделювання та аналізу хаотичної динаміки релятивістських рідбергівських багатоелектронних атомних систем в НВЧ полі й вперше виконано кількісне повністю релятивістське квантово-динамічне обчислення (з обчисленням імовірності іонізації в залежності від параметрів НВЧ поля  $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$  ат.од;  $\omega/2\pi=8.87, 36$  ГГц) з з'ясуванням резонансного ускладнення спектра Флоке, суттєвого значення зв'язку квазістаціонарних станів з континуумом і релятивістського багатоелектронного остова.

6. На основі розробленого та удосконаленого універсального, хаоскібернетичного апарату кількісного опису релятивістської спектроскопії та хаотичної динаміки рідбергівських систем в електромагнітному полі вперше виконано кількісне хаоскібернетичне (з обчисленням розмірностей кореляційної, вкладення, Каплан-Йорка, показників Ляпунова (+, +), ентропії Колмогорова та ін., особливостей КАМ, переходу “хаотична іонізація- стабілізація”) моделювання динаміки іонізації рідбергівських ( $n=60-80$ ) атомів Rb (тест), Cs, Fr (вперше) в мікрохвильовому НВЧ полі й вперше кількісно описано феномен релятивістського квантово-оптичного хаосу.

**Практичне значення одержаних результатів.** Розроблені в роботі нові релятивістські методи в спектроскопії важких рідбергівських атомів та отримані на їх основі масиви оптично-спектральних даних для рідбергівських атомів, як у вільному стані, так й зовнішньому електромагнітному полі, представляють значний теоретичний та практичний інтерес для цілого ряду додатків та суміжних фізичних дисциплін, які включають атомну, молекулярну, квантову оптику і спектроскопію, квантову електроніку, лазерну фізику, побудову кінетичних моделей нових лазерних схем короткохвильового діапазону, фізику та хімію лабораторної, астрофізичної плазми, астрофізику та радіоастрономію. На основі отриманих прецизійних спектральних даних по важким рідбергівським атомам з'являються можливості подальшого дослідження властивостей рідбергівської матерії, бозе-конденсату у парах рідбергівських лужних атомів, фонтанів холодних атомів, нових видів інтерферометрів, атомних часів, атомних машин Карно, моделей квантових комп'ютерів тощо. Дані по квантовому хаосу представляють інтерес для суміжних фізичних напрямків, зокрема, квантового комп'ютингу, квантової криптографії, фізики квантово-оптичних приладів та ін.

**Особистий внесок здобувача.** Всі результати, які складають основний зміст дисертації і закладають основи нового наукового напрямку в спектроскопії важких релятивістських рідбергівських атомів у вільному стані, а також у мікрохвильовому електромагнітному полі, включаючи побудову нових хаоскібернетичних моделей (блоків), отримані особисто автором. Одержані в роботі нові енергетичні та спектроскопічні характеристики низки рідбергівських атомів лужних елементів, у т.ч. енергії переходів, радіаційні амплітуди та ширини у вільному стані, а також рідбергівських систем у мікрохвильовому полі, належать особисто автору. У роботах у співавторстві з науковим керівником Глушковим О.В. і співр. автору належать основні ідеї, обґрунтування нових методів, їх реалізація, основні чисельні оцінки й аналіз даних. Автор вважає своїм обов'язком висловити глибоку подяку проф. Глушкову О.В. за багаторічне керівництво й консультації, а також проф. М. Feigenbaum, проф. G.Casati, проф. L.Bunimovich за корисні поради щодо феномену квантово-оптичного хаосу.

**Апробація результатів дисертації.** Головні результати роботи були представлені та обговорювались на таких наукових конференціях, конгресах:

XX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Varna, Bulgaria, 2015), 47<sup>th</sup> Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS-47, Riga, Latvia, 2015), XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC, Toledo, Spain, 2015), III, IV, V International School and Conference on Photonics (Belgrad, Serbia, 2013-2015), 21<sup>th</sup> Central European Workshop on Quantum Optics (Brussels, Belgium, 2014), 22<sup>nd</sup> International Conference on Spectral Line Shapes ( UT Space Institute, Tullahoma, USA, 2014), 13<sup>th</sup> International Conference on Artificial Intelligence, Knowledge Engineering and Data Bases (AIKED14; Gdansk, Poland, 2014), International Conference on Statistical Physics (Rhodes, Greece, 2014), 32<sup>nd</sup> European Congress on Molecular Spectroscopy (Heinrich-Heine-University, Düsseldorf, Germany, 2014), International Conference “Geometry-2014” (Odessa, Ukraine, 2014), 12<sup>th</sup> International Conference “Dynamical Systems-Theory and Applications” (DSTA-2013; Lodz, Poland, 2013), XXV IUPAP Conference on Computational Physics (Moscow, Russia, 2013), XVIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Paraty-Rio de Janeiro, Brasil, 2013), XI International Conference on Atomic and Molecular Pulsed Lasers (AMPL-13, Tomsk, Russia, 2013), Sensors Electronics and Microsystems Technology (SEMST-5; Odessa, Ukraine, 2012), 8<sup>th</sup> European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics” (Spetses, Greece, 2003), 5<sup>th</sup> European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics” (Uppsala, Sweden, 2000), REHE Workshop on “Spin-Orbit Coupling in Chemical Reactions” (Torun, Poland, 1998), та наукових семінарах ОНПУ, НДІ фізики ОНУ ім. І.І. Мечникова, ОДЕКУ, Технічного ун-ту Dresden (Germany), Софійського університету (Болгарія).

**Публікації.** Основні результати дисертаційної роботи викладені в більш ніж 37 наукових публікаціях, зокрема, 2 монографіях, 12 статтях у високорейтингових (Scopus тощо) міжнародних і вітчизняних фахових журналах і виданнях, 2 препрінтах, 1 навч. посібнику, більш ніж 20 тезах та матеріалах доповідей на міжнародних наукових конференціях.

**Структура і обсяг дисертації.** Дисертаційна робота викладена на 150 стор. машинописного тексту, містить у собі 15 рис., 23 таблиці, складається з вступу, 4-х розділів, висновків, списку використаних джерел (275 найм.).

## РОЗДІЛ 1

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

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

Дослідження енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів за сучасного стану трансформувалося в одну із галузей квантової оптики та спектроскопії, яка активно розвивається. Серед ключових класів задач особливо слід виділити клас завдань, пов'язаних з випромінюванням (поглинанням) фотонів внаслідок радіаційних переходів в спектрах рідбергівських атомів, обчисленням характеристик іонізації рідбергівських атомів у зовнішніх електричному та магнітному полях. Прикладне значення таких досліджень пов'язано з потребами широкого кола додатків, які включають безпосередньо квантову оптику, квантову електроніку, лазерну фізику, фізику та хімію плазми, зокрема, діагностику лабораторної, астрофізичної та лазерної плазми, фізику термоядерного синтезу тощо.

Слід також особливо виділити значення оптики та спектроскопії рідбергівських атомів для численних додатків в астрофізиці, фізиці Сонця, астроспектроскопії тощо (див. [1-182]). Добре відомо, що рідбергівські атоми знайдені в астрофізичних умовах з  $n \sim 300$ ; в радіоастрономії відомо, що у міжзоряних хмарах знайдені лінії поглинення між рідбергівськими станами з  $n \sim 300-700$  [1-10].

В останні роки суттєво виріс інтерес до вивчення спектрів важких і надважких рідбергівських атомів, які очевидно є істотно релятивістськими системами і додатково мають досить складні та одночасно цікаві оптичні та спектроскопічні властивості [1-10, 34-49, 103-108]. Таблиця 1.1 містить якісні значення

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

Таблиця 1.1

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

### 1.3. Сучасні методи квантової оптики та спектроскопії і теорії систем та хаосу та їх застосування для дослідження динаміки рідбергівських атомів у зовнішньому електромагнітному полі

#### 1.3.1. Феномен хаосу в динаміці нелінійних процесів у складних системах:

##### Огляд стандартних методик

Протягом останніх років інтенсивні дослідження регулярної та хаотичної динаміки були присвячені як широкому класу радіотехнічних, квантово-генераторних і лазерних систем, так і численним системам та приладам іншої природи [13-21, 35-97, 143-170, 198-214, 231-278]. Серед них можна назвати нелінійний коливальний контур із зовнішнім впливом, електронну схему Чуа, різні радіофізичні генератори, напівпровідникові, волоконно-оптичні квантово-генераторні та лазерні системи, а також практично всі відомі генератори з розподіленою взаємодією, які відносяться до мікрохвильової електроніки. У серії робіт Глушкова-Препелиці і співр. (див. напр., [231-256]) на основі нерелятивістського хаос-геометричного і квантово-динамічного підходу виконано кількісне моделювання та аналіз хаотичної динаміки нелінійних процесів в атомно-

молекулярних системах в однорідному і змінному електромагнітному полі квантово-генераторних, лазерних систем і приладів (у т.ч. волоконних, напівпровідникових лазерів зі зворотним зв'язком та ін.). Було теоретично досліджено сценарії генерації хаосу для цілого класу квантових систем в інтенсивному електромагнітному полі, зокрема, напівпровідникових, волоконних лазерних систем і пристроїв, отримано повні кількісні дані по характеристикам хаотичної динаміки і різним режимам функціонування систем і приладів, включаючи нові можливості. Крім того, у вказаних роботах вперше виконано дослідження характеристик хаосу в різних геофізичних, екологічних та гідрометеорологічних системах. Проте, за винятком [247-256], всі дослідження виконувалися по суті в нерелятивістському наближенні.

Як відомо, перші елементи теорії систем та хаосу були розроблені видатними вченими, зокрема Анрі Пуанкаре, Альбертом Ейнштейном, П'єром Лапласом, Вернером Гейзенбергом, А.Н. Колмогоровим, В.І. Арнольдом, Ю. Мозером (напр., теорема КАМ - Колмогорова-Арнольда-Мозера), Едвардом Лоренцом (E. Lorenz), Бенуа Мандельбротом (B. Mandelbrot) та багатьма іншими. Сучасний стан теорії динамічних систем і різних методів теорії хаосу викладено в цілому ряді відомих монографій, оглядів і статей (див., напр., [8-16, 31-34, 43-55, 90-102, 224-236, 240-253]). Характерною рисою хаосу є непередбачуваність хаотичної еволюції системи, що пояснюється в основному істотною залежністю від початкових умов (так званий "ефект метелика"). Ще однією "складною" особливістю хаосу є експоненціальне накопичення помилки. Сучасна теорія динамічних систем та хаосу, або в більш загальному уявленні, нелінійна теорія, включає в себе кілька ідейно пов'язаних напрямків (див. докладніше, напр., [239, 245-247, 250]), у т.ч. теорію нелінійних хвиль та коливань, якісну теорію диференціальних рівнянь, теорію траєкторій, теорію катастроф, теорію динамічних систем, теорію динамічного хаосу, фрактальну і мультифрактальну геометрію і, відповідно, вейвлет і мультифрактальний аналіз, комплексну аналітичну динаміку, нелінійний спектральний і трендовий аналіз, дослідження Марковських ланцюгів, формалізм матриць пам'яті, метод стохастичних функцій Гріну, еволюційних пропаторів і т.д. Однією з важливих харак-

теристик нелінійної динамічної системи, безперечно, є дивний атрактор (див., напр., [35, 43-47, 239, 250]), тобто, деяка складно влаштована множина в фазовому просторі, що притягує до себе хаотичні траєкторії з деякої прилягаючої області (басейну атрактора). Найменша ціла розмірність простору, що містить весь атрактор, називається розмірністю вкладення  $m$ . Вона відповідає кількості незалежних змінних, що однозначно визначає усталений рух динамічної системи. Множина, відповідна дивному атрактору, є фрактальною. Фрактальна множина (самоподібний об'єкт) характеризується дробовою фрактальною розмірністю [35, 43-56, 239].

В останні роки з'явилося досить велике число публікацій, присвячених аналізу, діагнозу, й навіть прогнозуванню просторово-часових рядів фундаментальних характеристик різних динамічних систем, в тому числі, аналізу з позиції теорії динамічних систем і хаосу фрактальних множин (див., напр., [8-16, 31-34, 43-55, 90-102, 224-236, 239-253]). Серед недавніх робіт відзначимо огляди Арнольда, Заславського, Мандельброта, Gottwald-Melbourne, Schreiber та ін., а також огляди Глушкова і співр. [3, 6, 35, 43-50, 136-163, 239-253]. Наприклад, в [3,161, 239-245] наведено огляд задач і методів управління хаосом, і розглянуто сферу їх застосування, як в різних наукових областях, в тому числі, механіці (управління маятниками, балками, пластинами, тертям), фізиці (управління турбулентністю, лазерами, управління хаосом в плазмі і поширенням дипольних доменів), хімії, біології, екології, економіці, медицині, так і в різних галузях техніки: механічних системах, електричних та електронних системах, системах зв'язку, інформаційних системах. В [162] запропоновано підходи до використання дискретних послідовностей експериментальних даних (часових рядів) для конструювання статистичних моделей, призначених для прогнозу поведінки об'єкта, зокрема, представлено: екстраполяцію тимчасової залежності, а також лінійні моделі авторегресії і проінтегрованого змінного середнього; застосування технології формування сурогатних сигналів; статистичне усереднення шуму спостереження і флуктуації параметрів сигналу при нормальному законі їх розподілу. Окрім відомих методик, які розвивалися в рамках математичної статистики і спектрального аналізу, а також теорії інформації [1-3, 57-64], з'яв-

илися такі досить екзотичні алгоритми, як розрахунок взаємних кореляційних функцій і функцій когерентності, аналіз проходження подій в часових рядах, оцінка розподілу найближчих сусідів в просторі станів, визначення характеристик “переносу інформації” між сигналами [136-163].

Аналізуючи застосування перелічених багаточисельних методів та алгоритмів сучасної теорії динамічних систем, слід особливо підкреслити досить цікаву обставину, що стосується якісного і кількісного стану досліджень регулярної та хаотичної динаміки різноманітних складних систем та приладів. Загальновідомим є той факт, що досить часто дослідники при вивченні властивостей тієї чи іншої системи або приладу вживають лише один, або в кращому випадку два-три методи або алгоритми, з якими вони, як правило, вже працювали. Наприклад, дуже розповсюдженим є підхід, коли в дослідженнях використовується лише метод фрактальних множин, а на його основі ідентифікують феномен хаосу, або використовують лише якісну теорію диференціальних рівнянь (в межах класичної механіки) і в її рамках аналізують особливості прояву хаосу. Альтернативний напрямок у моделюванні – застосовується лише аналіз на основі показників Ляпунова. Звичайно, подібні дослідження є, безумовно, важливими, але очевидно, що повне адекватне дослідження феномену хаосу в тій чи іншій складній системі має базуватися на єдиному універсальному підході, що повинен включати не тільки одну-дві методики, але й максимально широке коло методів та алгоритмів. Очевидно, що саме універсальний комплексний підхід може забезпечити адекватне розуміння усіх рис такого складного феномену, як хаос у різноманітних системах та приладах, у тому числі, НВЧ генераторах, релятивістських атомних системах в електромагнітному полі і т.д.

У серії робіт [226-253] було розроблено теоретичні та обчислювальні основи нового універсального, єдинообразного комплексного підходу до нелінійного моделювання та прогнозування хаотичних процесів в складних динамічних системах, який включає хаос-динамічний блок, блок симуляції компактного геометричного атратора і алгоритм передбачених фазових траєкторій системи, а також блоки, що містять тест на наявність хаосу в системі, відновлення мультифрактального спектра, спектру розмірностей Ляпунова, Каплана-Йорка,

ентропії Колмогорова, побудови еволюційно-траєкторної моделі прогнозу. Слід зазначити, що саме в нашій роботі вперше шуканий апарат застосований до дослідження особливостей такого відносно нового феномену, як хаос в релятивістських атомах в полі. Концептуально кажучи, можна вперше в теорії динамічних систем і хаосу в області квантової оптики та спектроскопії ввести поняття релятивістського квантового хаосу, зокрема, для складних релятивістських атомних систем у мікрохвильовому електромагнітному полі.

### 1.3.2. Нерелятивістські атомні системи в електромагнітному полі та актуальні проблеми теорій ефекту Штарку та квантового хаосу.

#### Релятивістський квантовий хаос – новий феномен

Згідно з [239, 245, 250-253] метою сучасної теорії квантового хаосу є вивчення квантово-механічних систем, які в класичних межах демонструють хаотичні властивості. Порівняно з хаосом у класичних системах та приладах теорія квантового хаосу є значно більш складною і незакінченою. У випадку квантового хаосу, фактично, мова йде про сукупність нелінійних ефектів, які спостерігаються в багаточисельних осциляторних, атомних, ядерних, молекулярних, лазерних системах, що описуються рівняннями типу Шредінгера або за допомогою матриці щільності. Фактично, динамічний хаос у нерелятивістських квантових системах у зовнішньому полі спостерігається в так званій квазікласичній області, де межа між дискретним і безперервним спектром відповідає сепаратрисі в фазовій площині системи, з якої починається руйнування регулярного руху з переходом безпосередньо до хаотичного режиму.

Квантово-механічний принцип відповідності вказує на безперервний перехід квантової механіки в класичну при масштабах системи, порівнянних з довжиною хвилі де Бройля. З іншого боку втрачає сенс відоме в класичній механіці поняття траєкторії, принаймні, у прагматичній або копенгагенській інтерпретації квантової механіки, (див. [6, 43-50, 239, 245, 250-253]). В інтерпретації феномена квантового хаосу [6, 48, 239, 250] більш зручним є понятійний апарат, що використовує такі терміни, як перетин енергетичних рівнів в багатопа-

раметричному просторі, елементи стохастичності в спектрах високозбуджених станів атомних систем, поняття кластеризації станів, інтерференції, флуктуації, злиття резонансних станів (квантових нелінійних резонансів) в стохастичні ша-ри та інші.

З початку 90-х років минулого сторіччя значно зросла кількість робіт, присвячених класично-механічним або квантово-механічним дослідженням явища хаосу в таких квантових системах, як атоми та молекули, а також ядра у зовнішніх (магнітному, електричному лазерному) полях. Феномен хаосу фактично досліджувався для нерелятивістських квантових систем у зовнішньому електромагнітному полі і базувався в основному на декількох теоретичних моделях, зокрема, моделях дифузії по достатньо великій кількості рівнів (рідбергівських) в спектрі системи, моделі переходів Ландау-Зенера, моделі сильно взаємодіючих резонансів та ін. [55-90, 99-118].

Перші прецизійні експериментальні дослідження поведінки високозбуджених атомів водню та лужних елементів (літію, рубідію) в сильному мікрохвильовому полі, а також експерименти з тими ж атомами водню, які були поміщені в магнітне поле, були виконані Клеппнером і співр., Бейфілдом і Кохом [95-118]. Експериментальні підтвердження наявності хаосу в атомних системах у мікрохвильовому полі були отримані в експериментах декількох груп із США та Германії (групи Kleppner D., Washigton group; Koch P., Stony Brook – Pittsburg group; Gallagher T., Virginia group; Walther H., Munich group) [112-118], зокрема, у відомих експериментах Коха та співр. з високозбудженими атомами водню ( $n \sim 60$ ) у полі частоти  $\omega_0 = 9,9\text{ГГц}$  [112, 113].

Касаті і співр. [101, 102] провели напівкількісне дослідження з метою пояснення феномену хаосу для атома водню методами нелінійної нерелятивістської класичної динаміки, надавши також дуже корисне інтерпретування динамічного хаосу в термінах теореми Колмогорова-Арнольда-Мозеса (КАМ). Касатті та ін. [101, 102] вперше вдалося досить якісно описати поведінку атомних систем в сильних магнітному та електричному полях, звичайно, на нерелятивістському рівні. Серед інших робіт важливими представляються теоретичні дослі-



дження Krug-Buchleitner [110, 111] хаотичної іонізації рідбергівських лужних атомів (Li, Rb) у високо збуджених станах на основі методу чисельного рішення нестационарного рівняння Шредінгера.

З робіт [6, 239, 250] випливає, що резонансні стани з малими та аномально малими ширинами, виявлені в магнітному полі в спектрах водню та деяких лужних елементів, можна пояснити в рамках теорії хаосу, зокрема, випадковими інтерференційними явищами і флуктуаціями, сильною резонансною взаємодією, яка може привести до злиття резонансів з виникненням стохастичних шарів. Така інтерпретація хаосу в атомних системах в полі, звичайно, різко відрізняється від прийнятої у класичній механіці – якісної теорії диференціальних рівнянь, де, як правило, прийнято оперувати поняттями типу біфуркація, нестійкість, граничний цикл, дивний атрактор [35].

Стосовно до атомів у зовнішніх полях заслуговують уваги такі методи, як квазікласичні моделі, метод квантових траєкторій (квантування до класичної механіки), інтервалів по траєкторіях Фейнмана-Хігса, теорія “періодичних орбіт” Гутзвіллера, метод замкнутих орбіт Делоса, метод комплексних координат, теорія випадкової матриці Фрієдріха-Вінтгена, методи діагоналізації Хегерфелдта-Хеннеберга, Преображенського-Рапопорта, (див. [95-109, 239, 250]).

Окремо слід оцінити цілу низку принципово нових квантово-механічних та електродинамічних моделей Глушкова і співр. (див. [6, 7, 41, 42, 74-79, 82, 123-128, 179, 180, 213, 214, 219, 220, 231-236, 242, 244-247, 250]). Суттєвий прогрес в дослідженні динаміки атомних систем у полі, який був досягнутий в роботах Глушкова і співр. та Іванова і співр. (див., напр., [6, 7, 41, 42, 66, 67, 74, 209-214]), пов'язаний з розвитком принципово нового квантового (відзначимо для нас особливо нерелятивістський в оригінальній версії) методу – операторної ТЗ до опису штарківських резонансів в спектрі атому в полі, і отриманням високої кількісної точності в описі основних атомно-оптичних характеристик. Більш того, в [41, 42] був передбачений принципово новий в атомній оптиці та динаміці ефект (Глушкова-Іванова-Летохова) гігантського уширення штарківських резонансів в складних важких атомах у відносно слабкому електричному

полі з подальшим експериментальним підтвердженням Летоховим і співр. [41, 172].

Важливо зазначити, що більшість методів дослідження характеристик атомних систем в електромагнітному полі, у тому числі нових методів, базувалось на нерелятивістському наближенні, завдяки чому фактично в них мова йшла про вивчення так званого нерелятивістського квантового хаосу. Серед найбільш відомих методів можна вказати на нерелятивістську квантово-механічну ТЗ за потенціалом зовнішнього електричного (магнітного) поля, квазікласичні та асимптотичні підходи: метод квазіенергій, метод стохастичних диференціальних рівнянь, R-матричний підхід, метод апроксимант Брандаса-Фрелиха, Паде-Ерміта,  $1/n$ -розкладання (див., напр., [5, 7, 41, 42, 56-71, 96-109, 181-189]). Серед релятивістських версій слід відзначити ряд підходів на основі S-матричного формалізму, КЕД апарат моментів радіаційних атомних ліній поглинання і випромінювання та ін., запропонованих для дослідження взаємодії атомних систем з високоінтенсивним полем лазерного випромінювання (див. [6, 52, 78, 85, 126-128, 219, 233, 250, 251]). Стохастична іонізація релятивістського атому водню якісно розглянута в [103]. Ситуація щодо досліджень найпростішої атомної системи – атома водню, що існувала, наприклад, до 1987 р., досить докладно відображена в огляді Лисиці [57], а після 1987 р. до 2013 р. – в огляді [7] (див. також [6, 233, 239]). У зазначених оглядах авторами піднімалися два особливо важливих для нас аспекти.

По-перше, більшість стандартних методів опису атомних систем у полі, особливо, звичайна ТЗ, квазікласичні та асимптотичні підходи зіштовхуються з суттєвими проблемами у випадку досить сильного зовнішнього поля, оскільки умови їх застосування потребують значної роздільності резонансів один від одного (що має місце саме для випадку слабого зовнішнього поля, яке на даний час добре досліджено), тобто фактично вони працюють в умовах не перекривання резонансів або в режимі регулярної динаміки. З точки зору теорії хаосу більш актуальним є вивчення властивостей якраз багатоелектронних атомних систем в рідбергівських станах у зовнішніх полях саме в критичній області спе-

ктра, де відбувається стохастичне розмивання резонансів аж до їх повного злиття в так звані стохастичні шари з подальшою реалізацією глобальної хаотизації.

По-друге, клас важких атомних систем, адекватний опис яких можливий тільки на основі релятивістських методів, вивчений частково або взагалі не досліджений, внаслідок чого теорія феномену релятивістського квантового хаосу на даний час відсутня. Таким чином, кількісне вивчення феномену релятивістського квантового хаосу в рідбергівських атомних системах в електромагнітному полі потребує розвитку як принципово нових релятивістських квантово-динамічних моделей, так і безпосереднє кількісного дослідження конкретних релятивістських атомних систем.

#### 1.4. Заключні зауваження

Таким чином, згідно з проведеним оглядом та аналізом можна констатувати високу актуальність і одночасно складність охарактеризованого вище класу задач, тому вивчення спектроскопічних характеристик важких рідбергівських систем у вільному стані й у зовнішньому електромагнітному полі, а також явища релятивістського оптичного квантового хаосу у важких рідбергівських атомних системах в електричному та електромагнітному полі природним чином потребує розвитку принципово нових релятивістських квантово-спектроскопічних та хаос-динамічних моделей та підходів. Принципово важливим є одночасне, прецизійне і теоретично коректне урахування релятивістських, ОК (одночасткових і багаточасткових) ефектів, ефектів, обумовлених впливом зовнішніх електромагнітних полів, а також ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у спектрах важких рідбергівських атомів, який принципово не враховується у достатній мірі ні в одній моделі чи методі, що використовуються у сучасній спектроскопії релятивістських рідбергівських атомів. Це ж стосується і проблематики опису квантового хаосу в рідбергівських системах, яка переважно на сьогодні розглядалася виключно в межах нерелятиві-

стських моделей, зокрема, на базі рівняння Шредінгера. Підкреслимо особливо також той факт, що термін “релятивістський хаос” (“релятивістський квантовий хаос”) у сенсі атомно-оптичної термінології вперше введений саме нами. В згаданих класах задач ми використовуємо, по-перше, низку нових узагальнених або удосконалених та розширених релятивістських квантово-динамічних моделей як для важких рідбергівських атомів у вільному стані, так й релятивістських атомних систем в мікрохвильовому полі. По-друге, розроблений нами універсальний, єдинообразний комплекс нелінійного аналізу квантово-оптичних явищ включає низку як нових, так й відомих суттєво удосконалених елементів, зокрема, блок симуляції компактного геометричного атрактора, кібернетичний алгоритм передбачених фазових траєкторій системи, тест на наявність хаосу в системі, алгоритми відновлення мультифрактального спектра, спектра розмірностей Ляпунова, Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова, метод взаємної інформації, метод кореляційного інтеграла (алгоритм Гроссбергера-Прокаччі), алгоритм помилкових найближчих сусідів, аналіз показників Ляпунова, метод сурогатних даних тощо [87-89, 226-250].

## РОЗДІЛ 2

# НОВІ РЕЛЯТИВІСТСЬКІ ПІДХОДИ В СПЕКТРОСКОПІІ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА У DC, AC ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

### 2.1. Вступні зауваження

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

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

блема узгодження фаз відсутня в енергетичному формалізмі. З іншого боку, вперше у калібрувальній-інваріантній формулюванні енергетичного формалізму [3, 11] органічно вирішується питання не тільки питання узгодження фаз, але й проблема послідовного та коректного виконання принципу калібрувальної інваріантності й, звичайно ж, урахування складних багаточастинкових ОК ефектів.

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

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

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

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

Як вказувалося вище, основою для побудови нового ефективного релятивістського методу опису радіаційних характеристик важких рідбергівських атомів нами вибрано енергетичний підхід EF обов'язково у калібрувально-інваріантному формулюванні [3, 4, 11], але на відміну від оригінальних версій ми будемо оптимізувати базис релятивістських орбіталей, виходячи не з воднеподібних функцій (як, напр., в [11]), а з розв'язків релятивістських рівнянь Дірака з *ab initio* МР та відповідними ОК функціоналами густини.

Як прийнято в релятивістському енергетичному підході EF згідно з [3, 11], застосованому до багатоелектронного атому, зсув електронної енергії важкого рідбергівського атому представляється у стандартному комплексному виді:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Звичайно, потенціал (2.4) на відміну від нерелятивістського означення враховує безпосередньо ефект запізнення та магнітну (зазвичай звану як брей-



тівська) взаємодію [3].

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

Гамільтоніан “0” наближення представимо у вигляді такого оператора:

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

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

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

$$V_N(r|R) = -((1/r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_N(r'|R) + \int_r^\infty dr' r' \rho_N(r'|R)), \quad (2.5b)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$c$  – швидкість світла,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Відомі чисельні труднощі при інтегруванні (2.9) в області  $r \rightarrow 0$  виключаються відомим прийомом. А саме (див. [3, 271]) при великих  $\chi$  функції  $F$  і  $G$  швидко змінюються в нулі, тому звичайно відокремлюється головна степенева залежність при малих  $r$ :  $f = Fr^{1-|\chi|}$ ,  $g = Gr^{1-|\chi|}$ , і прикінцева система діраківських рівнянь приймає в нашому підході такий вигляд:

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha Z[U_{MF}(r|b) + V_{XC}(r)]g - (\alpha Z E_{n\chi} + 2/\alpha Z)g$$

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

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

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

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

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

### 2.2.2. Енергетичний підхід для обчислення радіаційних амплітуд та матричних елементів радіаційних переходів: узагальнена

#### Glushkov-Ivanov версія

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$R_{\lambda}^{EFMP}(1\tilde{2}\tilde{4}3) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1^{EFMP}(r_1) f_3^{EFMP}(r_1) g_2^{EFMP}(r_2) g_4^{EFMP}(r_2) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{<}) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{>}) \quad (2.136)$$

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

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

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

Аналогічним чином визначається і брейтівська частина

$Q_{\lambda}^{Br} = Q_{\lambda, \lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda, \lambda}^{Br} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{Br}$  в матричних елементах оператора переходу, а саме:

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

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

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

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

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

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

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

$$V_{pol}^d(r_1, r_2) = X \left\{ \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'| \cdot |r' - r_2|} - \int \frac{dr' (\rho_c^{(0)}(r'))^{1/3} \theta(r')}{|r_1 - r'|} \int \frac{dr'' (\rho_c^{(0)}(r''))^{1/3} \theta(r'')}{|r'' - r_2|} \right\} / \langle (\rho_c^{(0)})^{1/3} \rangle, \\ \langle (\rho_c^{(0)})^{1/3} \rangle = \int dr (\rho_c^{(0)}(r))^{1/3} \theta(r), \quad \theta(r) = \left\{ 1 + [3\pi^2 \cdot \rho_c^{(0)}(r)]^{2/3} / c^2 \right\}^{1/2}, \quad (2.16)$$

де  $X$  – чисельний коефіцієнт. Поправка на ефект екранування врахована шляхом (використана процедура [3]) введення до гамільтоніану (2.6) *ab initio* екранувального ефективного потенціалу, який має вигляд:

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

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



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

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

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

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

$$\begin{aligned} Y_1' &= (\rho_1 r^2 Z_{\lambda}^{(1)} - (\lambda + 1)Y_1)/r; \\ Y_2' &= (\rho_2 r^2 Z_{\lambda}^{(1)} - (\lambda + 1)Y_2)/r; \\ Y_3' &= (\rho_c^{1/3} r^2 Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(1)} - (2\lambda + 1)Y_3)/r; \\ Y_4' &= (\rho_2 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_2 Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(2)} - (\lambda + 1)Y_4)/r; \\ Y_5' &= (\rho_1 r^2 Y_3 + \rho_c^{1/3} Y_1 Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(2)} - (\lambda + 1)Y_5)/r; \\ Y'(r) &= (\rho_1 r^2 Y_4 + \rho_2 r^2 Y_5 + \rho_c^{1/3} r^2 Y_2 Z_{\lambda}^{(2)}) Z_{\lambda}^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.18б)$$

Нарешті, ще одно із найголовніших питань нової релятивістської теорії для важких рідбергівських атомів – це оптимізація нульового наближення з метою максимального виконання принципу калібрувальної інваріантності в теорії обчислення радіаційних переходів та розпадів, тобто мова йде про побудову оптимізованого базису 1QR хвильових функцій (підр.2.2.1). Для цієї мети ми розвиваємо схему, яка узагальнює відому КЕД процедуру мінімізації внесків кореляційних діаграм четвертого та вище порядків КЕД ТЗ, що пов'язані з обміном подовжніми фотонами в уявну частину  $\Delta E$  (Glushkov-Ivanov, Phys.Lett.A, 1992). Цей внесок визначається матричними елементами поляризаційного оператора  $V_{pol}(r_1, r_2)$ :

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

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

Шукана поправка є фактично біспинором виду:

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

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

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

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

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

### 2.3. Новий релятивістський квантово-динамічний підхід до опису хаотичної динаміки важких рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі

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

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

$$E = E_r + i\Gamma/2, \quad (2.21)$$

де  $E_r$  – енергія резонансу,

$\Gamma$  – ширина резонансу.

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

Згідно з [42], головна ідея побудови оптимального гамільтоніану нульового наближення базується на тій умові, щоб він збігався з повним гамільтоніаном задачі для атома в електричному полі  $H$  при  $F \Rightarrow 0$  ( $F$  – напруженість електричного поля). Далі, з метою оптимізації базису функцій штарківських резонансів (що дає можливість використовувати метод операторної ТЗ в полях будь-якої напруженості), важливим моментом методу є заміна однорідного електричного поля початкової напруженості  $F_0$  полем, що описується функцією [6]:

$$F(t) = \frac{1}{t} F_0 \left[ (t - \tau) \frac{\tau^2}{\tau^2 + t^2} + \tau \right], \quad (2.22a)$$

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

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

$$k_{eff} = (E/2 + F\tau/4)^{1/2}. \quad (2.226)$$

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

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

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

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

$$R(\theta) = \exp(-i\theta/2[\vec{r}\vec{p} + \vec{p}\vec{r}]) . \quad (2.23)$$

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

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

$$i\partial_t |\Psi(r, t)\rangle = H |\Psi(r, t)\rangle , \quad (2.24)$$

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

Після цього відповідні рішення (2.24) шукаються у вигляді суперпозиції добутків фазового множника  $\exp(-iE_j t)$  і періодично залежної від часу функції  $|\Psi(r, t)\rangle$ :

$$|\Psi(r, t)\rangle = \sum_j c_j \exp(-iE_j t) |\Psi_{E_j}(r, t)\rangle \quad (2.25)$$

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

Так звані флоківські функції  $|\Psi_{E_j}(r, t)\rangle$  і квазіенергії  $E_j$  далі визначають-

ся стандартно власними функціями і власними значеннями гамільтоніану Флоке  $H_F = H - i\partial_t$ . Задача їх обчислення в подальшому зводиться до задачі рішення стаціонарного рівняння типу Шредінґеру:

$$H_F | \Psi_{E_j}(r, t) \rangle = E_j | \Psi_{E_j}(r, t) \rangle, \quad (2.26)$$

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

$$\exp(-i[E_j + k\omega]t) | \Psi_{E_j + k\omega}(r, t) \rangle = \exp(-iE_j t) | \Psi_{E_j}(r, t) \rangle. \quad (2.27)$$

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

З урахуванням виразу (2.23) для визначення величини ймовірності іонізації атомної системи в методі ККЕС вводиться оператор тимчасової еволюції  $U(t_1, t_2)$ , який для комплексного гамільтоніану Флоке записується у вигляді [239]:

$$U(t_2, t_1) = \sum_{j, k_1, k_2} e^{-iE_j(t_2-t_1)} e^{ik_1\omega t_1} e^{-ik_2\omega t_2} R(-\theta) | \Psi_{E_j, \theta}^{k_2} \rangle \langle \Psi_{E_j, \theta}^{k_1} | R(\theta). \quad (2.28)$$

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

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{k, j} \langle \Psi_{E_j, \theta}^k | R(\theta) | n_0 l_0 m_0 \rangle^2 \exp(-i\Gamma_j t), \quad (2.29a)$$

імовірність виживання атомної системи в акті взаємодії з полем:

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

$$P_{surv}(t) = \sum_{k,j} \langle \Psi_{E_j, \theta}^k | R(\theta) | n_0 l_0 m_0 \rangle^2 \exp(-i\Gamma_j t). \quad (2.296)$$

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

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{E_j} w_j \exp(-i\Gamma_j t) \quad (2.30)$$

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

### 2.3.2. Новий релятивістський квантово-динамічний підхід до обчислення характеристик атомних систем у електромагнітному полі

Розглянемо далі докладніше одноквазічастинковий атом (атом лужного елемента) в зовнішньому електромагнітному (з частотою  $\omega$ ) полі (АС Штарк ефект):

$$F(t) = F_o(t) \cos(\omega t). \quad (2.31)$$

Для циркулярно-поляризованої хвилі зазвичай можна записати:

$$F(t) = F_o \{ \cos \omega t, \sin \omega t, 0 \}. \quad (2.32)$$

Далі варто пояснити, що, по-перше, наша мета включає вивчення квантової динаміки атомів в області частот  $\omega$  мікрохвильових полів ( $\sim 10^{-6}$  ат.од.) і до-



вжин хвиль  $\lambda=2\pi c/\omega\sim 2\pi 137.04/\omega$ , тобто значно більші величини звичайного борівського радіуса. Тому послідовним і адекватним є використання надалі стандартного дипольного наближення (напр., виразу “довжина”). По-друге, весь нижче наведений розгляд повністю є справедливим для випадку, коли замість змінного електромагнітного поля враховується тільки постійне електричне поле, тобто мова йде про DC Штарк ефект. Звичайно, що для DC Штарк ефекту  $\omega=0$ ,  $F_o(t) = \text{const}$ .

В загальному випадку гамільтоніан нульового наближення релятивістської атомної системи, що складається з атомного остова і  $N_v$  валентних електронів (для лужно-подібних атомних систем, природно,  $N_v = 1$ ) в атомних одиницях запишеться у вигляді [250, 251]:

$$H = \sum_{i=1}^{N_v} [\hat{p}_i^2 / 2 - Z/r_i + V_C(r_i) + z_i F], \quad (2.33)$$

де  $(-Z/r)$  – кулонівський потенціал ядра;

$V_C(r)$  – некулонівський потенціал, що імітує потенціал замкнутих оболонок атомної системи, тобто  $V_C(r) \sim [U_{MF}(r_i | Z) + V_{XC}(r_i)]$ .

На цьому базисі далі стандартно (див. [6, 250, 251]) розвивається апарат релятивістської ТЗ з оператором збурення:

$$H_{int} = \sum_{ij}^N 1/r_{ij} - \sum_{i=1}^N V_C(r_j), \quad (2.34)$$

який враховує міжелектронну взаємодію і компенсаційний член з потенціалом  $V_C(r)$ .

Так як об'єктами нашого дослідження далі будуть важкі атомні системи типу лужних елементів в електромагнітному полі, в нашому новому релятивістському методі [250-252] ми вперше використовуємо повноцінний некулонівський модельний потенціал типу (2.7).

Оскільки, як вказувалось вище, поле є періодичним, далі варто використати теорему Флоке; тому власні флоківські стани  $|\Psi_{E_j}(r,t)\rangle$  і квазіенергії  $E_j$  визначаються як власні функції і власні значення енергії гамільтоніану Флоке  $H_F = H - i\partial_t$ . Показово нагадати, що у загальному вигляді, в межах методу МКК, в нерелятивістському наближенні задача зводиться до вирішення стаціонарного рівняння Шредінгера, яке у наближенні модельного потенціалу має вигляд [239]:

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 + V_{at}(r) + \omega L_z + F_0 z)\Psi_E(r) = E\Psi_E(r). \quad (2.35)$$

Далі фактично ми приступаємо до розв'язання стаціонарної задачі на власні значення і власні вектора деякої матриці  $A$  (з урахуванням кількох зон Флоке):

$$(A - E_j B)|E_j\rangle = 0. \quad (2.36)$$

В новій релятивістській моделі, природно, ми стартуємо з гамільтоніану Дірака (в релятивістських одиницях) [250]:

$$H = \alpha p + \beta - \alpha Z / r_i + \alpha V_C(r_i) + \sqrt{\alpha} F z. \quad (2.37)$$

Тут напруженість поля вже виражена в релятивістських одиницях, а саме:  $F_{rel} = \alpha^{5/2} F_{at.un.}$  ( $\alpha$  є стала тонкої структури). Звичайно, що релятивістська хвильова функція в Гілбертовому просторі є біспіно́р. Якщо використати формальну трансформацію  $r \rightarrow r \exp(i\theta)$ , тоді гамільтоніан (2.37) прийме вигляд [250]:

$$H(\theta) = (\alpha p - Z / r + V_C(r)) \exp(-i\theta) + \beta - \sqrt{\alpha} F z \exp(i\theta). \quad (2.38)$$

На відміну від відповідної нерелятивістської теорії, в релятивістській одразу виникає технічна проблема. У виразі (2.38) є член з  $\beta$ , який не допускає

автоматичну трансформацію. Одним із природних рецептів для врахування цього моменту є обмеження підпростору власних функцій гамільтоніану станами певної симетрії (а саме з моментом  $J$  та парністю  $P$ ) [239, 253]. Такі стани тоді описуються функціями:

$$\Psi_{PJ}^M = 1/r \begin{pmatrix} f(r) Y_{lJ}^M(n, \sigma) \\ g(r) Y_{l'J}^M(n, \sigma) \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Тут  $l$  ( $l'$ ) та  $\text{spin } 1/2$  в схемі зв'язку дають стан із загальним моментом  $J$  та його проекцією  $M_J=M$ . Дія оператора (2.38) на функції (2.39) з певним  $J$  в результаті дає [239, 250, 253]:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\theta) \Psi_{PJ}^M &= \alpha_r (\hat{p}_r - \frac{i\omega(J+1/2)}{r} \beta) \exp(-i\theta) \Psi_{PJ}^M + \\ &+ (\beta - [\frac{\alpha Z}{r} + \alpha V_c(r)] \exp(-i\theta) - \sqrt{\alpha} F_z \exp(-i\theta)) \Psi_{PJ}^M, \end{aligned} \quad (2.40)$$

де  $\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 \dots \sigma n \\ \sigma n \dots 0 \end{pmatrix}$ ,

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 \dots 0 \\ 0 \dots -1 \end{pmatrix},$$

$p_r = -i(1/r)(d/dr)r$ ,  $\vec{n} = \vec{r}/r$ ,  $\sigma$  – матриці Паулі;

параметр  $\omega=-1$ , якщо  $l=J-1/2$  і  $\omega=1$ , якщо  $l=J+1/2$ .

Для того, щоб далі провести діагоналізацію гамільтоніану (2.40) потрібно вибрати коректний базис функцій в підпросторі (2.39), зокрема, вибравши наступні функції (звичайно вибирають базис функції слетеровського або воднеподібного типу) [239, 253]:

$$\Psi_{PJ}^{a,M} = 1/r \begin{pmatrix} F(r) Y_{lJ}^M(n, \sigma) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.41a)$$

$$\Psi_{PJ}^{b,M} = 1/r \begin{pmatrix} 0 \\ iG(r)Y_{l,J}^M(n, \sigma) \end{pmatrix}. \quad (2.416)$$

Не важко зрозуміти, що матричні елементи (2.40) будуть ненульовими у випадку їх взяття між станами з однаковими  $M_J$ . Перетворення координат в гамільтоніані Паулі виконується аналогічним чином, але процедура в цьому випадку істотно спрощується. У порівнянні із гамільтоніаном рівняння Шредінгера тут міститься додатковий потенціальний член для магнітного диполя у зовнішньому полі. Квадратична інтегрованість функцій резонансів забезпечується при значеннях кута комплексного обернення  $\theta$ , що визначаються нерівностями:

$$|\arg[-(E + k\omega)]^{1/2} < \theta < \pi/2 - \arg\{-[E + (k-1)\omega]\}^{1/2}, \quad (2.42)$$

де  $k$  – порогове число фотонів, необхідних для іонізації.

При виборі скінченного базису, на якому діагоналізується (2.40), в різних версіях методу МКК ефективно використовувати систему функцій задачі Штурма в операторній ТЗ. З метою подальшого спрощення обчислювальної процедури в конкретних обчисленнях зазвичай використовується наближення однієї-двох флоківських зон; в результаті остаточно визначається набір власних квазіенергій резонансів  $E_j$ , власних векторів  $|E_j\rangle$ , ймовірності та швидкості їх розпаду  $\Gamma_j$  ( $E \rightarrow E - i\Gamma/2$ ). Розроблений нами підхід для обчислення енергій і ширин резонансів для атомів у змінному полі імплементовано у загальний комплекс атомних програм “Superatom” [6, 237], зокрема, програма діагоналізації матриці включена в “Superatom-Stark”, блок “DIAG” [237-240]. Для чисельної реалізації процедури діагоналізації використано алгоритм Ланцоша [239], що дозволяє отримати точність обчислення власних значень  $\sim 10^{-4}$  при цілком прийнятному розмірі базису (остаточні значення уточнюються емпірично в конкретних розрахунках кожного атома окремо).

## 2.4. Висновки до розділу 2

Підсумовуючи викладене, зазначимо, що, ми розробили принципово новий в спектроскопії релятивістських важких атомних систем квантово-динамічний підхід до опису енергетичних та спектроскопічних властивостей (енергії рівнів, сили осциляторів, редуковані матричні елементи радіаційних E1 переходів, часи життя) важких рідбергівських атомів як у вільному стані, так й в зовнішньому електромагнітному (мікрохвильовому) полі, зокрема, вперше реалізується релятивістський метод опису DC та AC ефектів Штарку для релятивістських атомних систем для будь-яких напруженостей поля. Новий підхід в спектроскопії рідбергівських атомів базується на *ab initio* релятивістському методі MP (RMP) в межах енергетичного підходу EF (S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу) з оптимізацією базисів релятивістських орбіталей, безумовним дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та коректним прецизійним урахуванням ОК ефектів на основі послідовних багаточастинкових функціоналів електронної густини, а також урахуванням ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у важких рідбергівських атомах, який досі в достатній мірі принципово не враховано ні в одній моделі або методі, що використовуються у спектроскопії важких рідбергівських атомів.

Також важливо зазначити, що введена нами вперше у нелінійній фізиці важких рідбергівських атомних систем термінологія типу “релятивістський квантовий хаос”, викладена вище, послідовно підкріплена відповідними релятивістськими динамічними (квантово-динамічними) моделями. Важливий фундаментальний аспект подальшого дослідження квантового хаосу пов'язаний із використанням адекватного, максимально повного та послідовного апарату дослідження хаосу з точки зору нелінійної динаміки, який викладається у наступному розділі.

**РОЗДІЛ 3**  
**НОВИЙ КОМПЛЕКСНИЙ ХАОС-КІБЕРНЕТИЧНИЙ**  
**ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ, АНАЛІЗУ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ**  
**НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ**  
**АТОМНИХ СИСТЕМАХ**

3.1. Вступні зауваження. Тест на хаос Готтвода-Мелбена

У цьому розділі, слідуючи нашим роботам [239, 247-250, 253], ми викладемо ключові елементи нового комплексного хаос-динамічного підходу, вперше розробленого нами для задач моделювання, аналізу та прогнозування характеристик релятивістських атомних систем в рідбергівських станах як у вільному стані, так й у зовнішньому електромагнітному полі. Звернемо увагу на абсолютну новизну, повноту та єдинообразність комплексного апарату дослідження хаотичних особливостей динаміки важких релятивістських рідбергівських атомів.

Слід додати, що хоча фундаментальні аспекти нового підходу були спочатку сформульовані незалежно від класу систем, що досліджуються, його застосування в різних за фізичною природою системах та приладах мало деякі досить суттєві відмінності. Зокрема, при дослідженні квантово-генераторних та лазерних систем в роботах Глушкова-Препелиці-Свинаренко та співр. (див., напр., [6, 198, 231-239, 250]) акцент було зроблено на використання нейромережних алгоритмів при прогнозуванні еволюції лазерних систем, що, на наш погляд, є безумовно коректним і перспективним, але при цьому варто враховувати й досить суттєві обчислювальні труднощі при використанні алгоритмів теорії нейромереж. Тому в цьому аспекті в нашій новій версії [239-246] ми зробили акцент на побудові та реалізації нових хаос-кібернетичних алгоритмів, тим більше, що їх спрощені хаос-алгебраїчні аналоги були надто ефективними при розв'язанні задач прикладної екології та гідрометеорології [5, 226-230].

Оскільки головним математичним об'єктом чисельного дослідження є ча-

совий або інший ряд амплітуди вихідного динамічного параметру системи, що досліджується, введемо його формальне визначення як:

$$F(t_0 + n\Delta t) = F(n), \quad (3.1a)$$

де  $t_0$  – деякий початковий момент часу,

$\Delta t$  – часовий інтервал, через який вибираються подальші члени часового ряду,

$t_n = t_0 + n\Delta t$  – “ $i$ ” момент часу.

За визначенням процедуру побудови (відновлення) по скалярному часовому ряду  $\{ F_i \}$  до ряду векторів станів  $\{ x_i \}$  називають реконструкцією фазової траєкторії. Потрібно зазначити, що в залежності від класу задачі, точніше, системи або приладу, що досліджується, в якості  $F(n)$  можуть виступати будь-які динамічні параметри, зокрема, в задачах квантової оптики та лазерної фізики звісно мова йде про часові залежності інтенсивності лазерного випромінювання, імовірності різноманітних елементарних квантових процесів [231-236], відповідно в задачах геофізики (гідрометеорології, екології тощо) – про часові залежності концентрацій, наприклад, забруднюючих речовин, або будь-яких термодинамічних, механічних параметрів атмосфери, океану і таке ін. [226-230].

У випадку наших класів систем та приладів, зокрема, релятивістських рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі, мова йде про вихідні залежності параметрів (амплітуди вихідного сигналу тощо), що отримуються при розв'язанні динамічних рівнянь відповідної моделі релятивістських важких атомних систем (розділ 2). Ключова ідея хаос-кібернетичного підходу полягає у чисельному відновленні фазового простору системи і далі фазової траєкторії (див., напр., [239, 253]). Згідно з [239, 253], ми стартуємо з міркування, що значення часового ряду, скажемо, амплітуди вихідного динамічного параметру системи, що досліджується, фактично визначають деяку дисипативну систему,

що лежать на геометричному об'єкті (атракторі) набагато меншої, ніж у реальному просторі станів, розмірності. Виходячи з цього, в подальшому стратегічною задачею дослідження буде фактично симуляція компактного геометричного атрактору і використання алгоритму передбачених фазових траєкторій системи для відновлення реальної траєкторії системи, і нарешті, її прогнозування.

Слід підкреслити, що до цих пір проблема прогнозування часової динаміки нелінійних процесів релятивістських рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі взагалі не розглядалася. Питання впливу фактору шумів на якість аналізу та прогнозу розв'язується просто, оскільки методи, що нами будуть у подальшому використовуватися, добре працюють й при наявності шуму.

Згідно з [239, 243-246, 253], наступні ключові етапи роботи з часовим рядом, скажемо, амплітуди вихідного динамічного параметру системи, що досліджується, включають тестування та ідентифікацію хаотичного режиму, симуляцію та реконструкцію фазового простору, обчислення геометричних, динамічних та топологічних інваріантів системи і, нарешті, побудову моделі прогнозу еволюції нелінійних процесів релятивістських рідбергівських атомних систем в полі.

З точки зору математичного моделювання мова йде про розгляд однозначних відображень вигляду:

$$F_{i+1} = \mathbf{G}(F_i), \quad (3.16)$$

де  $F \in \mathbf{R}^D$  – вектор стану,

$D$  – розмірність динамічної системи,

$i$  – дискретний час,

$\mathbf{G}$  –  $D$ -мірне відображення.

Перший крок всієї методології починається із застосування відомого тесту на наявність хаосу у системі з шумом, який був запропонований Готтвотом і Мелбеном [136, 137]. Його основна ідея зводиться до вибору деякої сталої  $c$ , точніше, декількох значень  $c$ , для яких з урахуванням (3.1) далі визначається величина:



$$p(n) = \sum_{j=1}^n F(j) \cos(jc), \quad (3.2)$$

потім середньоквадратичний зсув:

$$M(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [p(j+n) - p(j)]^2, \quad (3.3)$$

і, нарешті, швидкість асимптотичного зростання  $M(n)$ :

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log M(n)}{\log n}. \quad (3.4)$$

Згідно з моделлю Готтвода-Мелбена [136, 137], у випадку регулярної динаміки рідбергівських атомів в електромагнітному мікрохвильовому полі, з ймовірністю одиниця  $M(n)$  є обмеженою функцією від  $n$ , відповідно, у випадку хаотичної динаміки з ймовірністю одиниця  $M(n) = V(n) + O(1)$  для деяких  $V > 0$ . Якщо параметр  $K = 0$ , то динаміка системи вважається регулярною, а у випадку  $K = 1$  мова гарантовано йде про хаотичну динаміку.

На практиці більш реалістичною є ситуація, коли значення  $K$ , близьке до нуля, визначає регулярну динаміку, а близьке до 1 – хаотичну.

### 3.2. Технологія аналізу та реконструкції фазового простору

Фундаментальні ідеї нашого нового комплексного апарату дослідження характеристик релятивістського хаосу у важких рідбергівських атомних системах, а також, до речі, у релятивістських мікрохвильових електронних приладах [239, 243-246, 253], ідеологічно зводяться до хаос-кібернетичного аналізу, відтворення (та реконструкції) фазового простору системи (приладу) і, відповідно, прогнозування фазової траєкторії щодо часової еволюції основних параметрів

приладу. Тому для реалізації ідеології симуляції компактного геометричного атрактору і застосування хаос-кібернетичного алгоритму передбачених фазових траєкторій системи для відновлення фазового простору системи, можливим варіантом є використання кількох концепцій, по-перше, концепції середньої взаємної інформації, по-друге, концепції використання властивостей відповідної лінійної автокореляційної функції.

Відновлення фазового простору з урахуванням багатовимірності хаотичних процесів потребує якнайкращого використання інформації в (3.1). Головна ідея полягає в тому [239, 253], що процес реконструкції має призвести до деякого набору  $d$ -мірних векторів  $y(n)$ , які замінюють скалярні дані (3.1). При цьому мають бути поєднані динамічні концепції нелінійних систем, як генераторів інформації, і геометричні уявлення з метою виявлення атрактору за допомогою координат, визначених на основі їх інформаційно-теоретичного змісту.

Згідно роботи Пекард та ін. [139] насправді немає необхідності мати похідні, щоб сформулювати систему координат, в якій захоплена структура орбіт в фазовому просторі, а можна напряму використовувати запізнілі змінні  $F(n+\tau)$ , де  $\tau$  – часовий лаг (деяке число), що має бути визначено. Наступний крок полягає у створенні певного вектору в  $d$ -вимірному просторі [239, 253]:

$$y(n) = [F(n), F(n + \tau), F(n + 2\tau), \dots, F(n + (d-1)\tau)]. \quad (3.5)$$

Вибір часового лага (затримки) має для подальшого розгляду принципове значення. Деякі корисні властивості  $\tau$  забезпечуються положеннями теореми вкладення Мане і Тейкенса [141, 142]. Існує декілька варіантів вибору часу затримки, наприклад, використання ідеї першого нуля автокореляційної функції, або першого мінімуму функції взаємної інформації спостережуваного процесу (див. деталі різних версій в [192, 139-145, 239-253]).

Першим найбільш ефективним підходом для обчислення  $\tau$  є розрахунок відповідної лінійної автокореляційної функції:

$$C_L(\delta) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [F(m+\delta) - \bar{F}][F(m) - \bar{F}]}{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [F(m) - \bar{F}]^2}, \quad (3.6)$$

де

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N F(m).$$

Далі зазначимо, що обчислення часового лага, на якому  $C_L(\delta)$  перший раз переходить через якусь значення (перший нуль), дає цілком допустиме, в принципі, значення  $\tau$ , при якому  $s(n+j\tau)$  і  $s(n+(j+1)\tau)$  лінійно незалежні, хоча зазвичай така незалежність не гарантує саме нелінійної незалежності.

Тому (з метою підстраховки) далі застосовується додатково алгоритм середньої взаємної інформації [139, 143, 239, 253]. Наша версія, яку ми використовуємо в подальшому, викладена в роботах [239, 253]. А саме, якщо є дві системи  $A$  і  $B$  з результатами вимірювань  $a_i$  і  $b_k$ , то кількість інформаційних бітів, за якими можна дізнатися про виміри  $a_i$  за вимірюваннями  $b_k$ , задається параметрами теорії інформації [143]:

$$I_{AB}(a_i, b_k) = \log_2 \left( \frac{P_{AB}(a_i, b_k)}{P_A(a_i)P_B(b_k)} \right), \quad (3.7)$$

де  $P_{AB}(a_i, b_k)$  – загальна щільність розподілу ймовірності,

$P_A(a_i)$  и  $P_B(b_k)$  – граничні щільності розподілу ймовірності для систем  $A$  і  $B$  відповідно.

Середня взаємна інформація між вимірами будь-яких значень  $a_i$  системи  $A$  і  $b_k$  системи  $B$ , за визначенням, є середньою величиною по всіх можливих вимірах від  $I_{AB}(a_i, b_k)$ , тобто

$$I_{AB}(\tau) = \sum_{a_i, b_k} P_{AB}(a_i, b_k) I_{AB}(a_i, b_k). \quad (3.8)$$

Якщо далі [239, 253] замінити систему  $A$  вимірами  $F(n)$ , а систему  $B$  – вимірами через певну часову затримку  $F(n + \tau)$ , то тоді середня кількість інформації про  $F(n + \tau)$ , що мається під час вимірювань  $F(n)$ , буде визначатися як

$$I(\tau) = \sum_{n=1}^N P(F(n), F(n + \tau)) \log_2 \left( \frac{P(F(n), F(n + \tau))}{P(F(n))P(F(n + \tau))} \right). \quad (3.9)$$

Подальша ідея вибору часової затримки  $\tau$  базується на моделі Фразера-Свінні [144] і зводиться до визначення такого значення  $\tau$ , при якому  $I(\tau)$  досягає свого першого локального мінімуму. Як показують різноманітні застосування [192, 139-145, 239-253], такий підхід забезпечує адекватні результати.

### 3.3. Відновлення розмірності атрактору динамічної системи

Головна мета визначення розмірності вкладення модельного простору, згідно з [239, 243-246, 253], полягає у відновленні настільки великого Евклідового простору  $R^d$ , щоб весь ряд точок розмірності  $d_A$  міг бути розгорнутий без будь-якої невизначеності. Згідно з положеннями відомої теореми вкладення [141, 142], адекватною може бути така розмірність  $d_E$ , яка звичайно більше  $d_A$ , тоді як вибір  $d_E < d_A$  неприйнятний в кожному разі. Іншими словами, не потрібно шукати розмірність  $d_A$ , а можна взяти якусь завідомо більшу розмірність  $d_E$ . Наприклад, у випадку розвинутого хаосу можна апіорі задати розмірність вкладення 10 або навіть 15 (випадок дивного атрактору). Хоча методик, що дозволяють відновити розмірність атрактору, досить багато, найбільш ефективними і часто використовуваними, на наш погляд, слід вважати дві. Множина, яка відповідає дивному аттрактору, є фрактальною. Фрактальна множина (самоподібний об'єкт) характеризується дробовою фрактальною розмірністю, точніше, цілим спектром розмірностей, співпадаючих для регулярних фракталів, але істотно різних для природних та технічних систем. Фундаментальною хара-

ктеристикою атрактору, яка несе інформацію про ступінь складності поведінки релятивістської рідбергівської атомної системи, є кореляційна розмірність. Серед відомих методик, що використовуються для дослідження наявності хаосу в часових рядах, найбільш широке застосування отримав так званий метод кореляційної розмірності. Цей метод використовує кореляційний інтеграл функції  $C(r)$  для того, щоб знайти відмінності між хаотичними і стохастичними системами. Для розрахунку кореляційного інтеграла найбільш часто використовується алгоритм Грассбергера-Прокаччі [121], відповідно до якого

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N(n-1)} \sum_{\substack{i,j \\ (1 \leq i < j \leq N)}} H(r - \| \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j \|), \quad (3.10)$$

де  $H$  – ступінчаста функція Хевісайда,  $H(u) = 1$  для  $u > 0$ ,  $H(u) = 0$  для  $u \leq 0$ ;

$r$  – радіус сфери з центром в  $\mathbf{y}_i$  або  $\mathbf{y}_j$ ;

$N$  – довжина часового ряду.

Якщо часовий ряд характеризується деяким атрактором, то можна ввести так звану кореляційну розмірність  $d_2$ , що може бути визначена як нахил лінії в координатах  $\log C(r)$  ( $C(r)$  – кореляційний інтеграл) і  $\log r$  (радіус  $r$ ) за допомогою простого співвідношення:

$$d_2 = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}. \quad (3.11)$$

При цьому фактично  $r$  задає так званий діапазон масштабування. Якісно відповідна залежність кореляційного інтеграла має ступеневий вигляд.

Далі зазвичай, якщо  $d_2$  досягає насичення на деякому значенні розмірності вкладення, це сигналізує про наявність хаосу у відповідній динаміці системи (приладу). Значення  $d_2$ , що відповідає насиченню, далі визначається як кореляційна розмірність атрактору ( $d_A$ ). Очевидно, що найближче ціле число, яке бі-

льше, ніж  $d_2$ , дає оптимальну (адекватну) розмірність вкладення  $d_E$  для реконструкції фазового простору. Ще один принциповий момент – це те, що  $d_E$  визначає кількість незалежних динамічних змінних, які необхідні для адекватного  $d_E$ -мірного моделювання динаміки системи. Як впливає з визначення розмірності вкладення, вона відповідає числу незалежних змінних, що описують систему. Таким чином, відновлюючи розмірність вкладення, ми отримуємо інформацію про складність системи. Додамо, що це дуже добре стикується з положеннями якісної теорії диференціальних рівнянь та механіки [35].

Наш підхід має принципово важливу рису, а саме, не залежить від типу та фізичної природи досліджуваних систем (приладів). Більш того, він є цілком вірним й у випадку встановлення основних характеристик відносно нового феномену – як просто релятивістського хаосу, так й релятивістського квантового хаосу, де мова далі буде йти про аналіз та прогнозування еволюції релятивістських атракторів (зазначимо, що згідно з нашою термінологією мова йде про “релятивістські спектральні атрактори”). Варто зазначити, що термін “спектральний атрактор” у нерелятивістському сенсі вперше введений в спільній роботі Глушкова А.В. й співав. [233] (див. також [239]).

Альтернативним по відношенню до методу кореляційної розмірності (інтегралу) є метод помилкових найближчих сусідніх точок. Цей підхід дозволяє визначити розмірність вкладення для реконструкції фазового простору, а також перевірити результати, отримані за методом кореляційної розмірності. Очевидно, це забезпечує більшу надійність всієї процедури моделювання та прогнозування. Головна ідея цього підходу пов'язана з кількісним визначенням проблеми теорії вкладення, а саме по версії [239], коли буде виключено помилковий перетин орбітою самої себе внаслідок проекції атрактору в простір занадто низької розмірності. Фактично мова йде про встановлення, коли точки в розмірності  $d$  є найближчими сусідами самих себе. Далі алгоритм зводиться до перегляду цілих значень розмірності  $d$  (1, 2, 3 і т.д.), при яких не залишиться помилкових найближчих сусідніх точок (чорні точки на рис. 3.1); тоді встановлюється значення необхідної розмірності вкладення, тобто  $d_E = d_N$ .

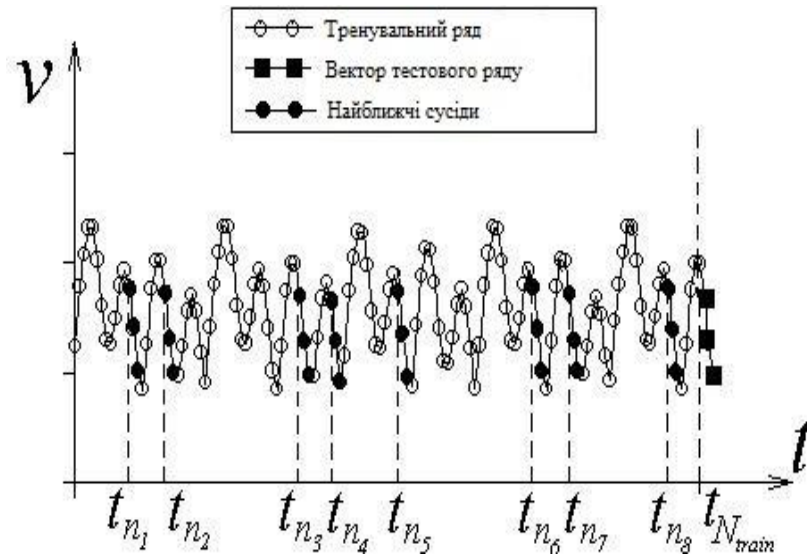


Рисунок 3.1 – Алгоритм помилкових найближчих сусідніх точок

Відповідний вектор стану у розмірності  $d$  є

$$\mathbf{y}(k) = [F(k), F(k + \tau), F(k + 2\tau), \dots, F(k + (d-1)\tau)] \quad (3.12)$$

має найближчий сусідній вектор  $\mathbf{y}^{NN}(k)$ . За визначенням, Евклідова відстань в розмірності  $d$  між векторами  $\mathbf{y}(k)$  і  $\mathbf{y}^{NN}(k)$  називається  $R_d(k)$  і має стандартний вигляд [239, 250, 253]:

$$R_d^2(k) = [F(k) - F^{NN}(k)]^2 + [F(k + \tau) - F^{NN}(k + \tau)]^2 + \dots + [F(k + \tau(d-1)) - F^{NN}(k + \tau(d-1))]^2. \quad (3.13)$$

Далі у розмірності  $d+1$  ця відстань змінюється внаслідок  $(d+1)$ -х координат  $F(k + d\tau)$  і  $F^{NN}(k + d\tau)$ , тоді відповідне визначення є

$$R_{d+1}^2(k) = R_d^2(k) + [F(k + d\tau) - F^{NN}(k + d\tau)]^2. \quad (3.14)$$

При реалізації такого алгоритму існує можливість визначити деяку граничну величину  $R_T$ , до якої сусідні точки є помилковими, зокрема, використо-

вуючи умову:

$$\frac{|F(k + d\tau) - F^{NN}(k + d\tau)|}{R_d(k)} > R_T. \quad (3.15)$$

За умовою (3.15) найближчі сусідні точки в момент часу  $k$  є помилковими. Важливий чисельний момент алгоритму – це те, що попереднє відновлення тестового ряду відбувається по тренувальному скалярному часовому ряду, що дозволяє використовувати алгоритм сусідніх точок і в прогнозованому блоці всього підходу. У цьому випадку очевидною умовою зупинки алгоритму є виконання умови методом найменших квадратів, тобто:

$$\sum_{i=1}^k [F(t_{n_i} + D) - G(F(t_{n_i}))]^2 = \min. \quad (3.16)$$

Очевидно, що кількість знайдених сусідів  $k$  має бути менше кількості відповідних коефіцієнтів в (3.16)  $D+1$ . Тобто розмір околу не повинен бути занадто малим, для того щоб знайшлося достатньо сусідів.

З іншого боку, шуканий розмір не повинен бути і надто великим, щоб була ефективною лінійна або квадратична апроксимація. Обидві ці вимоги на практиці можна задовольнити, тільки якщо кількість даних (довжина тренувального ряду  $N_{train}$  (рис. 3.1) досить велика. Деякі чисельні аспекти реалізації алгоритму представлені в [221-231, 239, 246-253].

### 3.4. Характеристики часового ряду: топологічні та динамічні інваріанти важких рідбергівських атомних систем

Одним із найбільш важливих результатів сучасної теорії хаосу є те, що, як правило, робота за часовими рядами хаотичних характеристик на основі стандартних лінійних методів аналізу (включаючи стандартний Фур'є аналіз) принципово не є можливою. З цієї причини навіть при відтвореному фазовому



просторі вказати траєкторію найімовірнішої еволюції динамічної системи на основі методів лінійного аналізу також не представляється можливим. Для нелінійної системи з хаотичним режимом (зокрема, релятивістської рідбергівської атомної системи в електромагнітному полі) використовувати спектральні характеристики проблематично, тому найкращими є інваріанти, які не змінюються в процесі еволюції динаміки системи і для яких додатково є справедливою умова їх незмінності при невеликих змінах початкових умов.

Стандартними інваріантами у цьому випадку є топологічні (різні фрактальні розмірності) і динамічні (локальні і глобальні розмірності Ляпунова).

Використання тільки топологічних або тільки динамічних інваріантів для того, щоб охарактеризувати аттрактор в просторі хаотичної системи, не дає “повноти” опису динаміки, отже є природно необхідним їх одночасне використання. До речі, цей важливий момент є недоліком багатьох сучасних досліджень хаотичних систем. У фізиці систем та приладів НВЧ електроніки цей аспект взагалі був суттєвою проблемою до появи робіт [239, 246-253]. Оскільки одна із фрактальних розмірностей (кореляційна) була описана вище, далі докладніше розглянемо розмірності Ляпунова. По суті, аналіз показників Ляпунова був розроблений для визначення стійкості лінійних і нелінійних систем задовго до розробки сучасної теорії хаосу.

Як відомо, показники Ляпунова за визначенням є логарифмами абсолютних величин власних значень лінеарізованої динаміки, осередненої по аттрактору, точніше:

$$\lambda = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ d(0) \rightarrow 0}} \left( \frac{1}{t} \right) \log_2 \left[ \frac{d(t)}{d(0)} \right]. \quad (3.17)$$

Тут норма  $d(t) = \left[ \sum_{i=1}^n \delta F_i^2(t) \right]^{1/2}$  визначає міру розбігання двох сусідніх траєкторій, тобто майстерної траєкторії та сусідньої з нею траєкторії з початковими умовами  $F(0) + \delta F(0)$ .

Важливо, що негативні розмірності вказують на локальну середню швидкість стиснення, а позитивні – на розширення системи. Найбільш значимим є максимальний показник Ляпунова, позитивність якого вказує на існування хаосу в системі.

З іншого боку, оскільки розмірності Ляпунова визначаються як асимптотичні середні швидкості, вони звичайно не залежать від початкових умов і вибору траєкторії, тому вони є дуже важливими інваріантними показниками атрактору. Знання спектру показників Ляпунова в подальшому дає можливість кількісно обчислити інші інваріанти динамічної системи, зокрема, ентропію Колмогорова, розмірність атрактору, міру передбачуваності еволюції системи. Дійсно, за визначенням ентропія Колмогорова є середньою швидкістю, при якій інформація про стан системи не зберігається в часі й розраховується як сума всіх позитивних розмірностей Ляпунова [153]. Оцінка розмірності атрактору забезпечується гіпотезою Каплана і Йорка [151] (див. також [239, 248, 253]):

$$d_L = j + \frac{\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha}}{|\lambda_{j+1}|}. \quad (3.18)$$

Тут число  $j$  вибирається таким чином, щоб сума  $\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha} > 0$  і сума  $\sum_{\alpha=1}^{j+1} \lambda_{\alpha} < 0$ ,

причому зазвичай показники Ляпунова  $\lambda_{\alpha}$  враховуються у низхідному порядку.

Слід відзначити, що існує декілька алгоритмів обчислення спектра показників Ляпунова, серед яких найбільш розповсюдженим вважається метод на основі якобіана відображення [150, 151]. Коротко алгоритм зводиться до наступного (див. докладніше роботи [239, 248, 253], яким ми будемо слідувати нижче). Часове змінення вектора (3.5) дається рівнянням типу:

$$\mathbf{F}(n+z) = \mathbf{G}(\mathbf{F}(n+z)). \quad (3.19)$$

Тут  $\mathbf{G}$  – деяка, зазвичай, нелінійна функція. Тоді еволюція достатньо малих зсувів вектору стану визначається лінеаризованим рівнянням

$$\delta\mathbf{F}(n+z) = D\mathbf{G}(\mathbf{F}(n)) \cdot \delta\mathbf{F}(n), \quad (3.20)$$

де  $D\mathbf{G}$  – якобіан  $\mathbf{G}$ . З початку руху у фазовому просторі по орбіті, що містить шукану точку, початкове збурення зросте (або зменшиться) через  $S$  кроків до

$$\delta\mathbf{F}(n+Sz) = D\mathbf{G}(\mathbf{F}(n+(S-1)z)) \dots D\mathbf{G}(\mathbf{F}(n)) \cdot \delta\mathbf{F}(n) = \mathbf{Y}(\mathbf{F}(n), S) \delta\mathbf{F}(n). \quad (3.21)$$

Згідно з мультиплікативною ергодичною теоремою [152], власні значення ортогональної матриці  $\mathbf{Y}(\mathbf{F}(n), S) \cdot \mathbf{Y}(\mathbf{F}(n), S)^T$  такі, що межа  $\lim_{S \rightarrow \infty} [\mathbf{Y}(\mathbf{F}(n), S) \cdot \mathbf{Y}(\mathbf{F}(n), S)^T]^{\frac{1}{2S}}$  існує і має власні значення  $e^{\lambda_1}, e^{\lambda_2}, \dots, e^{\lambda_d}$  ( $\lambda_i$  – показники Ляпунова) для  $d$ -мірної динамічної системи, яка не залежить від  $\mathbf{F}(n)$ , майже для всіх  $\mathbf{F}(n)$  всередині області притягіння атрактора. Далі, згідно з [239, 248, 253] і на основі реконструйованого фазового простору системи, чисельно обчислюються якобіани  $D\mathbf{G}(\mathbf{F}(n))$  в околиці кожної точки орбіти. Одночасно створюються локальні відображення всіх точок в околиці точки  $\mathbf{F}(n)$  на їх відображене зображення в околиці точки  $\mathbf{F}(n+1)$  згідно з алгоритмом Сано і Савадо [153]. При цьому враховується сімейство відображень від околу до околу, і далі визначається матриця Якобі такого відображення. Відповідно, поблизу точки  $\mathbf{F}(n)$  на аттракторі динаміка  $\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{G}(\mathbf{F})$  апроксимується за суперпозиційній апроксимації типу:

$$G_n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \mathbf{c}_n(k) \Psi_k(\mathbf{x}), \quad (3.22)$$

де  $\Psi_k(\mathbf{x})$  – множина деяких базисних функцій. Коефіцієнти  $\mathbf{c}_n(k)$  в (3.22) визначаються на основі алгоритму найменших квадратів, мінімізуючи різниці для взятого ряду сусідніх точок  $\mathbf{F}(n+1)$  до ряду сусідніх точок  $\mathbf{F}(n+1)$ . Докладніше шуканий алгоритм описано в [239, 248, 253].

### 3.5. Новий хаос-кібернетичний підхід до побудови моделі прогнозу хаотичних особливостей динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем з використанням поліноміальних та вейвлет-розкладань

Основні ідеї побудови нового хаос-кібернетичного підходу до прогнозування хаотичних особливостей динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем пов'язані з використанням двох позицій: концепції компактного геометричного атрактора в фазовому просторі системи, на якому еволюціонують дані обчислень (вимірювань), плюс концепція багатofункціональної алгебраїчної апроксимації часової еволюції фазової траєкторії системи.

Згідно з [239, 248, 253], у фазовому просторі системи деяка орбіта безперервно згортається на саму себе внаслідок дії нелінійної частини динаміки або додаткових механізмів, у т.ч. дії дисипативних сил тощо; внаслідок цього, в околі будь-якої точки орбіти  $\mathbf{F}(n)$  можуть знаходитись інші точки орбіти  $\mathbf{F}^r(n)$ ,  $r = 1, 2, \dots, N_B$ , які прибувають в околицю  $\mathbf{F}(n)$  в різні моменти часу. Головний крок полягає в побудові параметризованих нелінійних функцій  $\mathbf{G}(\mathbf{F}, \mathbf{c})$ , які перетворюють  $\mathbf{F}(n)$  в  $\mathbf{F}(n + 1) = \mathbf{G}(\mathbf{F}(n), \mathbf{c})$ , а далі з використанням різноманітних існуючих алгоритмів є можливим визначення параметрів  $\mathbf{c}$  (див. [5, 191-193, 239, 248, 253]). Зокрема, після визначення розмірності моделі  $D$  за допомогою методу часових лагів відновлюється векторний часовий ряд, який містить  $N_{train} - D + 1$  членів. Базовою моделлю для визначення  $\mathbf{G}$  є поліном порядку  $K$ :

$$\mathbf{G}(F_1, F_2, \dots, F_D) = \sum_{l_1=l_2=\dots=l_D=0}^K b_{l_1 l_2 \dots l_D} \prod_{i=1}^D t_i^{l_i} \sum_{j=1}^D l_j, \quad (3.23)$$

де відповідні коефіцієнти визначаються таким чином, щоб середньоквадратична похибка апроксимації  $\epsilon$  (3.23) була мінімальною (стандартна схема – метод найменших квадратів):

$$\varepsilon^2 = \frac{1}{N_{tr} - D} \sum_{i=1}^{N_{tr}-D} [F_{i+D} - G(F_i, F_{i+1}, \dots, F_{i+D-1})]^2 = \min. \quad (3.24)$$

Оскільки невідомі коефіцієнти  $b_{l_1 l_2 \dots l_D}$  входять лінійно, задача їх визначення стандартно зводиться до розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь, які мають звичайний матричний вигляд:

$$\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{E}. \quad (3.25)$$

Тут  $\mathbf{A}$  - матриця (верхній індекс  $T$  означає транспонування) значень базисних функцій (розмірності  $(N_{tr}-D) \times M$ ),  $\mathbf{E}$  - вектор значень апроксимуючої величини (розмірності  $N_{tr}-D$ ),  $\mathbf{B}$  - вектор коефіцієнтів моделі (розмірності  $M$ ).

Для оцінки міри якості підгонки кривої до даних зазвичай вводиться локальна функція вартості (фактично, функція вартості для помилки), яка у нашому випадку має вигляд:

$$W(\varepsilon, k) = \frac{\sum_{r=1}^{N_B} |\varepsilon_D^{(r)}(k)|^2}{\sum_{r=1}^{N_B} [F(k) - \langle F(r, k) \rangle]^2}, \quad (3.26)$$

а параметри, визначені за допомогою мінімізації  $W(\varepsilon, k)$ , залежатимуть від  $\mathbf{b}$ .

Крім поліноміальної моделі типу (3.23) в нашому підході також вперше в аналізі динаміки систем та приладів НВЧ електроніки, так і в прогнозних блоках еволюції атрактору в фазовому просторі, запропонований та реалізований блок вейвлет-розкладання.

Добре відомо, що теоретичні основи вейвлет-аналізу були розроблені в середині 80-х років 20-го сторіччя Гроссманном і Морлі, як альтернатива відо-

тому перетворенню Фур'є для дослідження часових (просторових) рядів з вираженою неоднорідністю (див., напр., [165, 199, 200]). На відміну від перетворення Фур'є, яке локалізує частоти, але не дає тимчасового дозволу процесу, а також відомого апарату d-функцій, який локалізує моменти часу, але не має частотного дозволу, вейвлет-перетворення з притаманним йому самоналагоджувальним рухомим частотно-часовим вікном однаково добре виявляє як низькочастотні, так й високочастотні характеристики сигналу на різних часових масштабах (іншою мовою, це своєрідний “математичний мікроскоп”, що розкриває внутрішню структуру істотно неоднорідних об'єктів). Відомо, що вейвлет називається ортогональним, якщо сімейство  $\{F_{jk}\}$  представляє ортонормований базис функціонального простору  $L^2(R)$ , тобто:

$$\langle F_{jk}, F_{lm} \rangle = d_{jl} d_{km}.$$

У цьому випадку будь-яка функція  $f$  може бути представлена в вигляді ряду:

$$f(t) = \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} c_{jk} \psi_{jk}(t), \quad (3.27a)$$

$$c_{jk} = 2^{j/2} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \psi(2^j t - k) dt. \quad (3.27b)$$

В нашому блоці в якості вейвлету використано так званий Mexican hat вейвлет, який має вигляд:

$$\psi(t) = (1 - t^2) \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right). \quad (3.28)$$

Як показали багаточисельні тести прогнозної моделі, використання вейвлет-розкладань (див., напр., [200, 239]) є більш ефективним у порівнянні зі стандартними поліноміальними моделями.

### 3.6. Блок-схема загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем

#### 3.6.1. Спектральні методи дослідження та характеристики хаосу в рідбергівських атомних системах

Перед тим, як представити блок-схему нового загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу, діагнозу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем, важливо окремо розглянути спектральні методи дослідження хаосу в системах. Справа у тому, що, крім дослідження спектроскопії важких рідбергівських систем, ми запланували також провести дослідження динаміки релятивістських атомних систем в електромагнітному полі для опису відносно нового феномену в теорії хаосу, а саме релятивістського квантового хаосу. Зокрема, мова йде про дослідження статистики енергетичного спектру систем, а також визначення таких параметрів, як спектр міцності, функція розподілу відносної величини міжрівневих відстаней  $S_n$ , спектральна жорсткість  $\Delta_3(L)$  тощо. Докладний опис питань розвитку відповідних методів та їх характеристики можна знайти в ряді відомих монографій та оглядів, зокрема [6, 43-55, 239, 250, 253].

Ключовою ідеєю при дослідженні спектрів хаотичних систем і, зокрема, квантових систем, є та обставина, що за визначенням квантовий хаос трактується, насамперед, як властивість групи станів спектрів системи. Саме трактування одного з механізмів виникнення квантового хаосу через індукування резонансів в спектрі системи, їх сильну взаємодію з подальшим злиттям, виникненням стохастичних шарів й далі – до глобальної стохастичності в системі, призвело до того, що найбільш розповсюдженим критерієм наявності хаосу в спектральних дослідженнях (особливо з точки зору механізму перекриття та злиття резонансів) є критерій хаосу Чірікова. В цій схемі перекриття нелінійних

резонансів визначається як відношення суми напівширин резонансів до відстаней між ними

$$K = [(\Gamma_1/2) + (\Gamma_2/2)] / |E_2 - E_1|, \quad (3.29)$$

де  $\Gamma_i$  та  $E_i$  – відповідно ширина та енергія “i”-го резонансу. Зазвичай вважається, що при достатньо великих значеннях ( $K \geq 4$ ) в системі реалізується феномен хаосу.

До числа спектральних характеристик, які, як правило, обчислюються, при дослідженні елементів хаосу в спектрах систем, відносяться:

1) Відносна величина міжрівневих відстаней  $S_n$ , яка стандартно визначається як:

$$S_n = (E_n - E_{n-1})\rho(E_n), \quad (3.30)$$

де  $\rho(E)$  – щільність рівнів.

2) Функція  $P(S)$  розподілу відносної величини міжрівневих відстаней  $S_n$ ; якщо положення рівнів в спектрі не є хаотичним, то  $P(S)$ , як правило, має вигляд розподілу Пуассона  $P_p(S) = \exp(-S)$ ; якщо в системі має місце хаос, тоді реалізується розподіл Вігнера-Дайсона (у загальному виді – розподіл Броді; див. рис. 3.2).

3) Характеристика ступеня впорядкованості рівнів в спектрі на великих в порівнянні з міжрівневою відстанню – спектральна жорсткість  $\Delta_3(L)$ , яка визначається як:

$$\Delta_3(x, L) = \frac{1}{L} \min_{A, B} \int_x^{x+L} (n(\varepsilon) - A\varepsilon - B)^2 d\varepsilon. \quad (3.31)$$



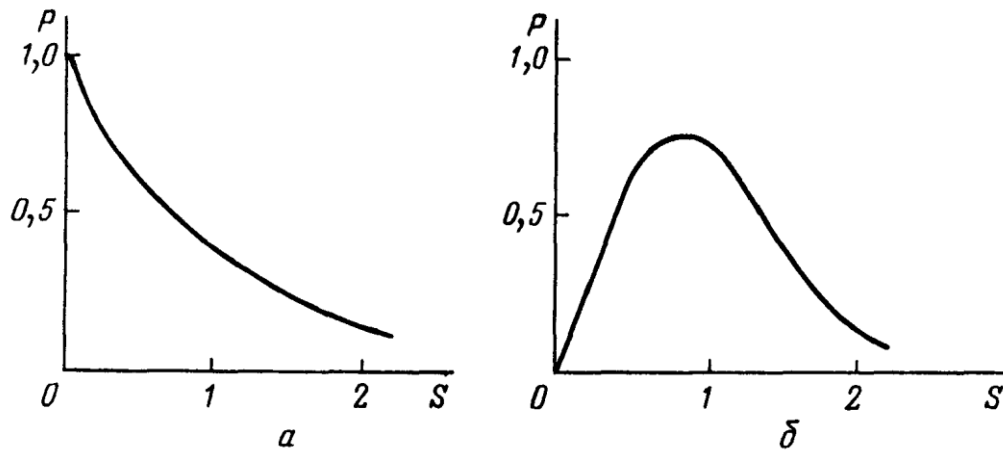


Рисунок 3.2 – Граничні форми розподілу міжрівневих відстаней  $P(S)$ :  
а) розподіл Пуассона; б) розподіл Вігнера-Дайсона

При розгляді визначення треба мати на увазі, що для послідовності рівнів  $\varepsilon_n$ , нормованих на одиничну щільність ( $\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + S_n$ ), використано ступінчасту функцію  $n(\varepsilon)$ , рівну числу рівнів з  $\varepsilon_n \leq \varepsilon$ . За побудовою  $n(\varepsilon)$  має вигляд сходів з одиничним в середньому нахилом. Значення  $\langle \Delta_3(x, L) \rangle$ , усереднене за значеннями  $x$  з області, в якій характер флуктуації спектра можна вважати незмінним, залежить тільки від  $L$  і позначається  $\Delta_3(L)$ . Функція  $\Delta_3(L)$  описує впорядкованість спектра на великих ділянках: чим повільніше росте  $\Delta_3(L)$  з ростом  $L$ , тим менш вірогідні в спектрі тісні кластери рівнів і лакуни зі зниженою щільністю рівнів.

4) Коефіцієнти кореляції  $C(n)$  величин енергетичних інтервалів, розділених фіксованим числом рівнів, що визначаються звичайним чином:

$$C(n) = \frac{\sum_i (s_{i-n} - 1)(s_i - 1)}{[\sum_i (s_{i+n} - 1)^2 \sum_i (s_i - 1)^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.32)$$

Нарешті, ще однією з найбільш розповсюджених характеристик є так званий спектр міцності, який визначається стандартним чином. Докладніше характеристика спектральних методів наведена, напр., в [6, 43-55, 239, 250, 253].

### 3.6.2. Блок-схема загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем

У цьому підрозділі ми зведемо описані вище головні етапи загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу, діагнозу та прогнозування нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі в єдину блок-схему, особливо виділяючи принципово нові елементи підходу у порівнянні з попередніми (див., напр., [ 230,234, 240,253] ) ).

Фактично весь підхід може бути коротко представлений, як комплекс таких алгоритмів (див. рис. 3.3):

I. Аналітичне та чисельне розв'язання фундаментальних динамічних рівнянь (систем рівнянь), що описують відповідні хаотичні системи, зокрема, в нашому випадку релятивістські рідбергівські атомні системи у електромагнітному полі з одержанням відповідних просторово-часових та інших рядів основних динамічних характеристик систем;

II. Хаос-кібернетичне дослідження рядів основних динамічних характеристик систем:

а) застосування попередніх загальних критеріїв існування елементів хаосу в динаміці системи (у т.ч. використання тесту Готтвода і Мелбена, використання розкладень Фур'є, використання спектральних методів, у т.ч. аналіз статистики енергетичного спектру, спектру міцності, наявності розподілу Вігнера-Дайсона тощо);

б) реконструкція та визначення фазового простору системи (вибір часового лагу з використанням методу автокореляційної функції та алгоритму середньої взаємної інформації, визначення різних типів розмірностей, зокрема, з використанням методу кореляційного інтегралу та алгоритму помилкових найближчих сусідніх точок, нарешті, методів мультифрактальної геометрії);

III. Хаос-кібернетичне дослідження характеристик хаосу в динаміці систем, у т.ч. подальша можлива побудова моделей прогнозу динаміки системи у

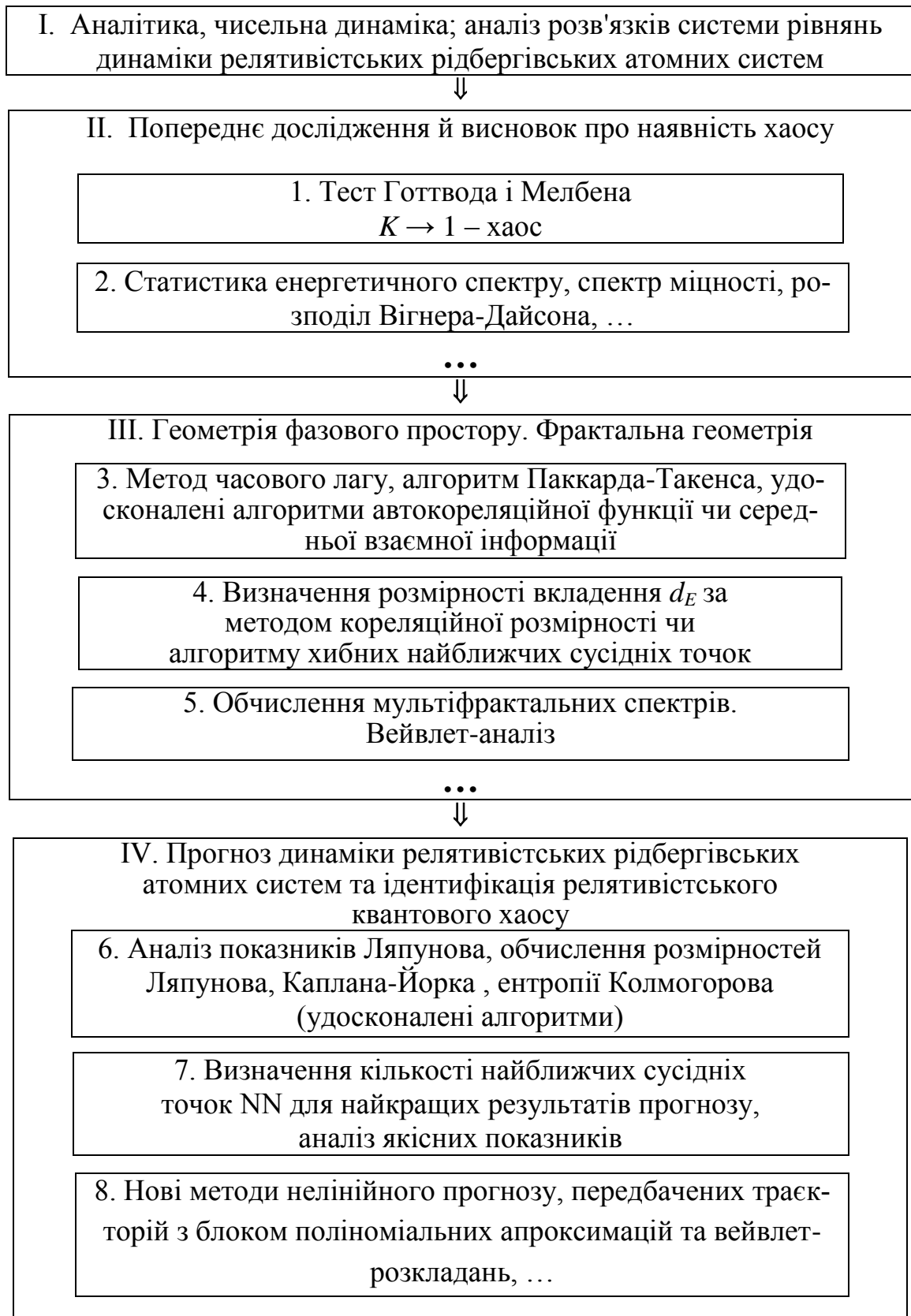


Рисунок 3.3 – Блок-схема загального хаос-кібернетичного підходу до аналізу та моделювання нелінійної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем в електромагнітному полі (з робіт [239, 240, 247-253])

майбутньому, тобто прогнозу розвитку релятивістського хаосу:

а) визначення характеристик хаосу у системі, зокрема, топологічних та динамічних інваріантів хаотичної системи (у т.ч. аналіз показників Ляпунова, обчислення ентропії Колмогорова тощо);

б) прогноз еволюції хаотичних систем з використанням моделей поліноміальних та вейвлет-розкладань тощо.

### 3.7. Висновок до розділу 3

Сучасна теорія моделювання та прогнозування характеристик феномену хаосу (у т.ч. нового згідно із нашим означенням феномену релятивістського квантового хаосу) в нелінійній динаміці та характеристиках важких рідбергівських атомних систем у вільному стані, а також релятивістських атомних систем в однорідних електричному та, взагалі, електромагнітному полях, поставила гостру необхідність суттєвого розвитку і реалізації принципово нових, кількісно послідовних та високонадійних хаос-кібернетичних і динамічних підходів обчислення спектральних, енергетичних, радіаційних властивостей атомних систем, удосконалення стохастично-статистичних та інших методів, взагалі, апарату нелінійного аналізу характеристик хаотичної динаміки з його подальшим комплексним застосуванням до вивчення характеристик хаосу у низці релятивістських рідбергівських атомів, зокрема, лужних елементів та ін. В даному розділі вперше, з метою адекватного повного кількісного моделювання та аналізу хаотичних особливостей спектральної динаміки у широкому класі важких рідбергівських атомних систем, а також релятивістських атомних систем в мікрохвильових полях, ми розвинули та адаптували новий універсальний, єдинообразний комплексний апарат з хаос-кібернетичним і поліноміально-вейвлетним блоком прогнозування (вперше у світовій літературі), який універсально включає низку нових релятивістських моделей спектроскопії важких рідбергівських атомів (розділ 2) і низку нових або удосконалених чи значно покращених методів нелінійного аналізу, зокрема, кореляційно-інтегральний аналіз, фрактальний

та вейвлет-аналіз, методи середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, апарат аналізу показників Ляпунова, спектральні методи, нові методи нелінійного прогнозу, передбачених траєкторій з вперше побудованим поліноміально-вейвлетним блоком тощо. У подальшому розвинутий підхід може бути застосований до повного кількісного моделювання, аналізу, а також вперше – до прогнозування особливостей феномену релятивістського квантового хаосу у ряді важких рідбергівських атомів як у вільному стані, так й зовнішньому електромагнітному, зокрема, мікрохвильовому полі.

**РОЗДІЛ 4**  
**РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ТА**  
**СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВАЖКИХ**  
**РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ У ВІЛЬНОМУ СТАНІ ТА В**  
**ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ МІКРОХВИЛЬОВОМУ ПОЛІ З**  
**ЕЛЕМЕНТАМИ РЕЛЯТИВІСТСЬКОГО ХАОСУ:**  
**НОВІ ЕФЕКТИ І НОВІ ДАНІ**

4.1. Вступні зауваження

У цьому підрозділі ми приведемо нові результати розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик (енергетичні спектри, імовірності та сили осциляторів радіаційних переходів, часи життя, імовірності іонізації тощо) важких рідбергівських атомів у вільному стані та зовнішньому електромагнітному (електричному) мікрохвильовому полі на основі нової версії енергетичного підходу з використанням релятивістського методу неемпіричного модельного потенціалу, нової вперше розробленої релятивістської версії операторної ТЗ та удосконаленого апарату хаос-кібернетичного моделювання, аналізу та (вперше) прогнозування динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем, і зрештою, надаємо повний кількісний опис хаотичної динаміки релятивістського квантового хаосу, зокрема, вперше представимо результати кількісного дослідження релятивістських атомних систем у мікрохвильовому електромагнітному полі. Як вказувалося, за теперішнього часу найбільш інтенсивні та досить повні дослідження атомних систем у електричному та магнітному полях, здатних демонструвати хаотичну поведінку, виконані саме для нерелятивістських систем, в той час як стосовно повного адекватного опису релятивістського хаосу ситуація є значно гіршою (зовсім відсутні будь-які релятивістські теоретичні моделі або в літературі представлені малочисельні експериментальні дані), оскільки аналіз дуже складної багато параметричної динаміки релятивістських атомних систем, які описуються нелінійними рівняннями в приватних похід-

них, є дуже складним і є можливим лише на основі використання повного, єдиногообразного апарату.

На відміну від раніше проведених досліджень, де при вивченні властивостей хаосу в спектральній динаміці тієї чи іншої системи вживають лише один, або в кращому випадку два алгоритми (типа методу якісної теорії диференціальних рівнянь і алгоритму показників Ляпунова), повне адекватне дослідження феномену хаосу в складній важкій атомній системі має базуватися на єдиному універсальному підході, що повинен включати максимально широке коло методів та алгоритмів.

Застосування багатоалгоритмового хаос-кібернетичного апарату робить можливим вперше кількісно адекватно відбудувати характерні риси хаотичної динаміки релятивістських рідбергівських атомних систем й, більш того, вперше у світі демонструє реальні можливості достатньо ефективного прогнозу еволюційної динаміки.

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

##### Експериментальні та тестові теоретичні дані

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

В таблиці 4.1 представлені теоретичні та експериментальні значення енергій рівнів –  $E_n$  (в  $\text{cm}^{-1}$ ) для Li- подібного іону  $\text{Ca}^{17+}$ : теорія – ДФ-НКД [36], QDA и DKS [37, 38], наші дані – EF-RMP та експеримент – [15]. Порівняння наведених даних указує на те, що значення енергій рівнів, отриманих на основі різних методів, узгоджуються один з одним, однак у порівнянні з експериментом більш точні результати забезпечує метод EF-RMP, потім QDA і DKS й, нарешті, метод ДФ з використанням НКД.

Таблиця 4.1 – Теоретичні та експериментальні значення рівнів енергії –  $E_n$ , (ат.од.) іону  $\text{Ca}^{17+}$ : теорія – ДФ-НКД [36], QDA, DKS [37, 38], експ. – [15], EF-RMP – наші дані

Рівень	ДФ-НКД [36]	QDA [38]	DKS [38]	EF-RMP, наші дані	Еxp. [15]
$2s_{1/2}$	42.56	42.540	42.524	42.523	42.523
$3s_{1/2}$	18.59	18.521	18.482	18.480	18.479
$2p_{1/2}$	41.23	41.216	41.201	41.201	41.200
$2p_{3/2}$	41.03	41.022	41.012	41.011	41.011
$3p_{1/2}$	18.23	18.216	18.201	18.200	18.201
$3p_{3/2}$	18.17	18.156	18.141	18.141	18.141
$6p_{1/2}$	4.530	4.525	4.518	4.514	4.513
$7p_{1/2}$	3.325	3.323	3.318	3.316	3.316
$7p_{3/2}$	3.321	3.318	3.315	3.258	3.256

В таблицях 4.2, 4.3 представлені отримані нами теоретичні значення сил осциляторів для переходів  $2s_{1/2} - np_j$  ( $n=3-12$ ,  $j=1/2$ ) в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів, у тому числі окремо  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ , а також аналогічні дані, отримані на основі емпіричної версії НКД і ДФ дані Zilitis [36], дані обчислень методом RMP [22] (для  $\text{Zr}^{37+}$  дані відсутні), експериментальні дані [14,17,18] Martin-Weiss. По-перше, відзначимо результати для іону  $\text{Zr}^{37+}$ , для якого експериментальні дані відсутні. По-друге, аналіз показує, що у випадку досліджених Li-подібних іонів (важливо, що їх остов є малоелектронним) наші результати, а також дані, отримані на основі наближень типу НКД та DKS досить добре узгоджуються з експериментальними, при чому із збільшенням головного квантового числа точність результатів методу ДФ знижується. В таблицях 4.4 та 4.5 наведені розраховані нами тестові сили осциляторів переходів  $2s_{1/2} - 2p_{1/2,3/2}$  в спектрах низки Li-подібних іонів, зокрема,  $\text{Ca}^{17+}$ ,  $\text{Kr}^{33+}$ ,  $\text{Rb}^{34+}$ ,  $\text{Zr}^{37+}$ ,  $\text{Mo}^{39+}$ ,  $\text{Cs}^{52+}$ ,  $\text{Tm}^{66+}$ ,  $\text{Yb}^{67+}$ ,  $\text{Fr}^{84+}$ .



Таблиця 4.2 – Значення сил осциляторів  
для переходів  $2s_{1/2} - np_{1/2}$  в спектрі  $\text{Ca}^{17+}$

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

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

Таблиця 4.3 – Значення сил осциляторів ( $10^2$  gf)  
для переходів  $2s_{1/2} - np_{1/2}$  в  $\text{Zr}^{37+}$

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

Для порівняння наведені альтернативні ДФ дані Zilitis [36], дані ab initio R-матричних обчислень [21], дані QDA, DKS Tkach [38], а також експериментальні дані Martin-Weiss [14,17,18]. Важливий момент – це порівняння результатів обчислення gf на основі нашої теорії при використанні калібровок Кулону та Бабушкіна (тобто різниця між значеннями сили осциляторів, обчисленими при виборі для оператора переходу форми “довжини” і “швидкості” в межах

Таблиця 4.4 – Сили осциляторів переходу  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  в спектрах ряду Li-подібних іонів: експеримент – Exp. [14,17,18]; теорія – ДФ [36], R-матричний метод [21]; QDA, MP [38], EF-RMP – наші дані

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

Таблиця 4.5 – Сили осциляторів переходу  $2s_{1/2} - 2p_{3/2}$  в спектрах ряду Li-подібних іонів: експеримент – Exp. [14,17,18]; теорія – ДФ [36], R-матричний метод [21]; QDA, MP [38], EA-RMP – наші дані

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

стандартного амплітудного формалізму); напр., для переходу  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  в  $\text{Ca}^{17+}$  відповідні значення: 0.0578 та 0.0577, тобто калібрувально-неінваріантний внесок складає  $\sim 0,17\%$ , в той час у для ДФ теорії відповідна величина складає до 20-30%. Очевидна причина – використання в нашій теорії фактично потимізованих базисів релятивістських орбіталей та коректне урахування обмінно-кореляційних ефектів. Також відзначимо, що для іону  $\text{Kr}^{33+}$  у відомих довідкових виданнях [14,17,18] наведені, на наш погляд, помилкові дані по  $gf$ . Важливо звернути увагу на відмінне узгодження результатів нашої неемпіричної теорії з експериментом, але, звичайно, це априорі не може гарантувати аналогічне узгодження для важких рідбергівських атомів із складним багатоелектронним остовом. Як підкреслювалося вище, такі особливо у випадку малоелектронних атомів ефективні методи як НКД та МР можуть давати у випадку важких багатоелектронних атомів результати невисокої точності, особливо по  $gf$ .

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

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

В таблиці 4.6 ми наводимо результати обчислення (тест теорії) в межах нашої теорії (EF-RMP) теоретичних значень (в  $\text{cm}^{-1}$ ) одно-електронних  $ns_{1/2}$ ,  $np_{1/2}$  енергій (іонізації) Rb, Cs. Для порівняння у цій ж таблиці надані експериментальні (exp., [14, 15, 26, 27]) і альтернативні теоретичні дані: теорія – coupled cluster метод (CC); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації), QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок і метод DKS [16,26-29,38].

Таблиця 4.6 – Теоретичні та експериментальні значення (в  $\text{cm}^{-1}$ ) одно-електронних  $ns_{1/2}$ ,  $np_{1/2}$  енергій (іонізації) Rb, Cs: exp. - [14, 15, 26, 27]), теорія – coupled cluster метод (CC); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ нульовим наближенням; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації), QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок і метод DKS [16,26-29,38]; EF-RMP – наші дані

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

Аналіз наведених у таблиці 4.6 даних дозволяє заключити, що у середньому найбільш точні дані одержані у на основі методів CC, DKS та EF-RMP (наш підхід), причому мова йде про спектроскопічну точність результатів. Для ряду станів досить точні дані дає й дуже популярний за теперішнього часу (див. [29]), метод Safronova et al ТЗДФ<sup>SD</sup>.

Досить добре узгодження результатів нашої теорії та експериментальних даних ми пов'язуємо з коректним досить повним урахуванням ОК поправок (фактично збудовано оптимізоване нульове *ab initio* МР наближення). Точність інших методів є більш нижчою саме через використання неоптимізованих базисів орбіталей (фактично не виконаний принцип калібрувальної інваріантності) та не повне урахування складних ОК ефектів. З іншого боку, як відомо, в атомній спектроскопії більшість існуючих підходів дозволяє описувати стандартні енергетичні характеристики (енергії рівнів, іонізації; тут ключовим є питання використання максимально реалістичних гамільтоніанів системи, відповідних потенціалів) значно краще, ніж характеристики, точність яких залежить від коректності базисів релятивістських орбіталей. Очевидно, мова йде про такі характеристики як ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні ширини, ширини резонансів тощо. Питання правильного та повного урахування складних багаточастинкових ОК ефектів потребує явного використання відповідних багаточастинкових ОК функціоналів густини, або формалізму ТЗ.

В таблиці 4.7 наведені теоретичні (тестові розрахунки) та експериментальні значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів головних серій в спектрі атомів Rb, Cs, Fr: експеримент – Exp; теорія – QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-корреляційних (ОК) поправок by Tkach; метод DKS (version by Tkach); ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням by Dzuba-Flambaum; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ “0” наближенням (враховані SD конфігурації) by Safronova et al; EF-RMP – наші дані; [9,14-17, 26-29, 38].

Таблиця 4.7 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів головних серій в спектрах важких лужних атомів Rb, Cs, Fr: експеримент – Ехр; теорія – QDA – узагальнене НКД з урахуванням обмінно-кореляційних (ОК) поправок; метод DKS; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням ; ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ “0” наближенням (враховані SD конфігурації), EF-RMP – наші дані [14-17, 26-29, 38]

Атом Перех.  Метод	Rb 5p <sub>1/2</sub> -5s <sub>1/2</sub>	Rb 5p <sub>3/2</sub> -5s <sub>1/2</sub>	Cs 6p <sub>1/2</sub> -6s <sub>1/2</sub>	Cs 6p <sub>3/2</sub> -6s <sub>1/2</sub>	Fr 7p <sub>1/2</sub> -7s <sub>1/2</sub>	Fr 7p <sub>3/2</sub> -7s <sub>1/2</sub>
ТЗРХФ	4.209	5.810	4.296	6.257	-	-
ТЗДФ <sup>SD</sup>	4.221	5.956	4.478	6.298	4.256	5.851
QDA	4.032	5.720	4.282	5.936	-	-
DKS	4.2294	5.972	4.4852	6.317	-	-
EF-RMP	4.230 4.231	5.974 5.975	4.488 4.489	6.322 6.323	4.272 4.273	5.891 5.892
Ехр.	4.231(3)	5.977(4)	4.4890(6)	6.3238(7)	4.277(8)	5.898(15)

Прим. Rb (5p<sub>1/2</sub>-5s<sub>1/2</sub>: 4.226; 5p<sub>3/2</sub>-5s<sub>1/2</sub>: 5.971 (КЕД-ТЗ) [9]);  
Cs (6p<sub>1/2</sub>-6s<sub>1/2</sub>: 4.485; 6p<sub>3/2</sub>-6s<sub>1/2</sub>: 6.318 (КЕД-ТЗ) [9]).

В таблиці 4.8 ми наводимо експериментальні та теоретичні (тестовий розрахунок ) значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі атому Cs: експериментальні дані – Ехр; теоретичні дані: QDA – узагальнене НКД, DKS – версія методу ДКШ Tkach; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані цього методу з компіляційною поправкою (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), EF-RMP – наші дані [9,14-17, 26-29, 38].

Таблиця 4.8 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі Cs: експеримент – Ехр; теорія – QDA – узагальнене НКД, DKS – версія методу ДКШ Tkach [38]; ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані цього методу з компіляційною поправкою (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), КЕД ТЗ Glushkov et al (див. прим.); EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-29, 38]

Перех.	ТЗ- ДФ <sup>SD</sup>	ТЗс- ДФ <sup>SD</sup>	ТЗ- ДФ	ТЗ- РХФ	QDA	DKS	EF-RMP	Ехр.
6p <sub>1/2</sub> -6s	4.482	4.535	4.510	-	4.282	4.486	4.489	4.4890(7)
6p <sub>3/2</sub> -6s	6.304	6.382	6.347	-	5.936	6.320	6.323	6.3238(7)
7p <sub>1/2</sub> -6s	0.297	0.279	0.280	0.2825	0.272	0.283	0.283	0.284(2)
7p <sub>3/2</sub> -6s	0.601	0.576	0.576	0.582	0.557	0.582	0.583	0.583(9)
8p <sub>1/2</sub> -6s	0.091	0.081	0.078	-	0.077	0.087	0.088	-
8p <sub>3/2</sub> -6s	0.232	0.218	0.214	-	0.212	0.225	0.228	-
6p <sub>1/2</sub> -7s	4.196	4.243	4.236	4.237	4.062	4.231	4.234	4.233(22)
6p <sub>3/2</sub> -7s	6.425	6.479	6.470	6.472	6.219	6.478	6.480	6.479(31)
7p <sub>1/2</sub> -7s	10.254	10.310	10.289	10.285	9.906	10.308	10.309	10.309(15)
7p <sub>3/2</sub> -7s	14.238	14.323	14.293	14.286	13.675	14.322	14.323	14.325(20)

В таблиці 4.9 ми наводимо експериментальні та теоретичні значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для радіаційних переходів в спектрі атому Fr: експериментальні дані – Ехр; теоретичні дані: ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), empirical (E)RMP by Marinescu et al; EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-30]

Таблиця 4.9 – Значення (ат.од.) редукованих дипольних матричних елементів для ряду переходів в спектрі Fr: експеримент – Ехр; теорія –ТЗРХФ – багаточастинкова ТЗ з РХФ “0” наближенням (Dzuba-Flambaum); ТЗДФ<sup>SD</sup> – багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском (Safronova-Johnson-Derevianko), ТЗ з стандартним ДФ “0” наближенням (Blundell-Saperstein-Johnson), empirical (E)RMP by Marinescu et al; EF-RMP – наші дані [9, 14-17, 26-30]

Пер./Мет	ТЗ-ДФ <sup>SD</sup>	ТЗс-ДФ <sup>SD</sup>	(E)RMP	ТЗ-РХФ (розш.)	ТЗ-РХФ	ТЗ-ДФ	EF-RMP	Ехр.
7p <sub>1/2</sub> -7s	4.256	-	-	4.279	4.304	4.179	4.272 4.274	4.277
8p <sub>1/2</sub> -7s	0.327	0.306	0.304	0.291	0.301	-	0.339	
9p <sub>1/2</sub> -7s	0.110	0.098	0.096	-	-	-	0.092	
10p <sub>1/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.063	
7p <sub>3/2</sub> -7s	5.851	-	-	5.894	5.927	5.791	5.891	5.898
8p <sub>3/2</sub> -7s	0.934	0.909	0.908	0.924	-	-	0.918	-
9p <sub>3/2</sub> -7s	0.436	0.422	0.420	-	-	-	0.426	-
10p <sub>3/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.284	-
7p <sub>1/2</sub> -8s	4.184	4.237	4.230	4.165	4.219	4.196	4.228	-
8p <sub>1/2</sub> -8s	10.02	10.10	10.06	10.16	10.00		10.12	-
9p <sub>1/2</sub> -8s	0.985	-	0.977	-	-	-	0.972	-
10p <sub>1/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	0.395	-
7p <sub>3/2</sub> -8s	7.418	7.461	7.449	7.384	7.470	7.472	7.453	-
8p <sub>3/2</sub> -8s	13.23	13.37	13.32	13.45	13.26		13.35	-
9p <sub>3/2</sub> -8s	2.245	-	2.236	-	-	-	2.232	-
10p <sub>3/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	1.058	-
7p <sub>1/2</sub> -9s	1.016	-	1.010	-	-	-	1.062	-
8p <sub>1/2</sub> -9s	9.280	-	9.342	-	-	-	9.318	-
9p <sub>1/2</sub> -9s	17.39	-	17.40	-	-	-	17.42	-
10p <sub>1/2</sub> -9s	-	-		-	-	-	1.836	-
7p <sub>3/2</sub> -9s	1.393	-	1.380	-	-	-	1.41	-
8p <sub>3/2</sub> -9s	15.88	-	15.92	-	-	-	15.96	-
9p <sub>3/2</sub> -9s	22.59	-	22.73	-	-	-	22.68	-
10p <sub>3/2</sub> -9s	-	-	-	-	-	-	3.884	-



Слід зазначити, що в таблицях 4.7-4.9 наведені найбільш точні на сьогодні експериментальні дані по радіаційним матричним елементам. Точність методу ТЗДФ<sup>SD</sup> багаточастинкової ТЗ з ДФ “0” наближенням [29] складає в середньому до 1%. Використання наближення НКД для розглянутих переходів між низько розташованими станами вагомо уступає по точності іншим методам. Очевидно, для рідбергівських станів НКД може давати значно вищі за точністю результати, зокрема, для енергій рівнів. Наш формалізм забезпечує більш високу точність обчислення. Дуже важливо звернути увагу на те, що наші дані представлені у кожному випадку двома числами, що відповідає використанню двох калібровок фотонного пропагатора, а саме калібровкам Кулону та Бабушкіна; різниця між ними дає так званий калібрувальний-неінваріантний внесок в радіаційні матричні елементи. Його величина в нашому підході складає соті долі проценту, що свідчить про високий рівень оптимізації базисів релятивістських орбіталей у формалізмі EF-RMP і ефективного врахування основних ОК ефектів. Тобто, проведені тестові розрахунки очевидно підтверджують й теоретичну послідовність і коректність розвинутого підходу, так й його достатньо високу прецизійність.

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

Далі ми провели масові обчислення енергій рівнів, сил осциляторів (відповідно редукованих матричних елементів) радіаційних переходів  $5S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n=10-70$ ),  $5P_{1/2,3,2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n=10-70$ ) в спектрі атому Rb. Такі стани особливо цікаві для експериментальних досліджень методами лазерної спектроскопії, установок для холодних та ультрахолодних рідбергівських атомів тощо. На рисунку 4.1 ми наводимо обчислену нами залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) від головного квантового числа для рідбергівського атому Rb:  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ). Наявні експериментальні дані для частини станів на рисунку означені як кола (із [26]). Також для порів-

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

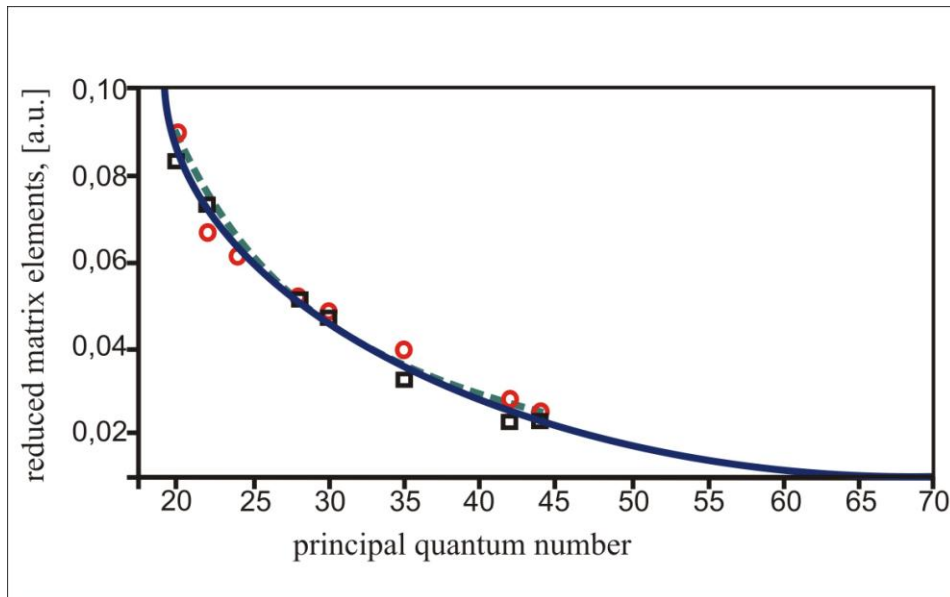


Рисунок 4.1 – Залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) переходів  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ) від головного квантового числа для рідбергівського атому Rb: Експеримент - o, □ [26]; Теорія - безперервна лінія (наші дані), переривиста лінія - квазікласичні обчислення Piotrowicz et al [28]

Для переходів  $5S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n=10-70$ ) отримані дані аналогічні наведеним на рис.4.1. Аналіз отриманих даних по редукованим матричним елементам радіаційних переходів для рідбергівського рубідію та порівняння відповідних даних з експериментом показує, що наша теорія, що базується на релятивістському енергетичному формалізмі комбінованому з неемпіричною калібрувально-інваріантною версією методу релятивістського МР з коректним та послідовним урахуванням ОК ефектів, забезпечує дуже добрий опис експериментальних даних для рідбергівських переходів, до речі, як й обчислення Piotrowicz et al.

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

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

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

В таблиці 4.10 ми наводимо теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи декотрих збуджених станів атому рубідію, обчислені на основі різних методів (кулонівське наближення (КН) та МР [20], і ТЗДФ<sup>SD</sup> (багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням) плюс дані ТЗс-ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском [31]; EF-RMP – наші дані), а також експериментальні дані. Привертає увагу, по-перше, дуже значна різниця в чисельних даних різних методів. Порівняння наших даних з даними досить надійних експериментів показує, що для отримання прийнятної точності розрахунку є дуже важливими оптимізація базисів релятивістських орбіталей у формалізмі EF-RMP і ефективне врахування основних ОК ефектів. В будь-якому випадку розвинена нами схема обчислення дає достатньо прецизійні результати, особливо у порівнянні як зі спрощеними КН або ННД моделями, так й значно більш складними та теоретично послідовними даними методів типу ТЗДФ.

На рисунку 4.2 ми наводимо обчислену нами залежність (безперервна лінія) від головного квантового числа значень редукованих матричних елементів радіаційних переходів  $6P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n=10-70$  (аналогічні дані отримані й для переходів  $6S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$ ,  $n=10-70$ ) для рідбергівського атому Cs. Наявні експериментальні дані для частини станів (означені як кола) [26].

Таблиця 4.10 – Теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи станів атому рубідію: Експеримент (Ехр.), теорія: кулонівське наближення (КН) та МР [20], і ТЗДФ<sup>SD</sup> (багаточастинкова ТЗ з ДФ<sup>SD</sup> “0” наближенням) плюс дані ТЗс- ДФ<sup>SD</sup> цього методу з компіляційним внеском [31]; EF-RMP – наші дані

Рівень	ТЗс- ДФ <sup>SD</sup>	КН та МР	ТЗДФ <sup>SD</sup>	EF-RMP	Ехр.
6s <sub>1/2</sub>	45.4	-	45.4	45.5	45.57(17)
7s <sub>1/2</sub>	88.3	-	88.3	88.1	88.07(40)
8s <sub>1/2</sub>	161.9	-	161.8	161.4	161(3)
9s <sub>1/2</sub>	271.7	266.36	-	262.1	253(14)
10s <sub>1/2</sub>	426	417.84	-	421.3	430(20)
6p <sub>1/2</sub>	122.5	-	123	124.1	125(4)
6p <sub>3/2</sub>	112.4	-	113	112.1	112(3)
7p <sub>1/2</sub>	277.8	-	280	274.3	272(15)
7p <sub>3/2</sub>	255.2	-	258	249.0	246(10)
8p <sub>1/2</sub>	501.0	-	508	497,4	
8p <sub>3/2</sub>	464.2	-	471	456.2	400(80)
9p <sub>1/2</sub>	-	-	-	796.4	
9p <sub>3/2</sub>	-	-	-	743.6	665(40)
10p <sub>1/2</sub>	-	-	-	964.2	
10p <sub>3/2</sub>	-	-	-	921,0	
7d <sub>3/2</sub>	339.5	331.08	-	336.2	345(9)
7d <sub>5/2</sub>	327.0	319.57	-	324.8	325(22)
8d <sub>3/2</sub>			-	488.3	515(30)
8d <sub>5/2</sub>			-	431.1	421(25)

На рисунку 4.2 також для ілюстрації наведені дані оціночних обчислень Piotrowicz et al [28] в межах квазікласичної моделі Dyachkov-Pankratov (DP model). Аналіз отриманих для рідбергівського цезію даних по радіаційним

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

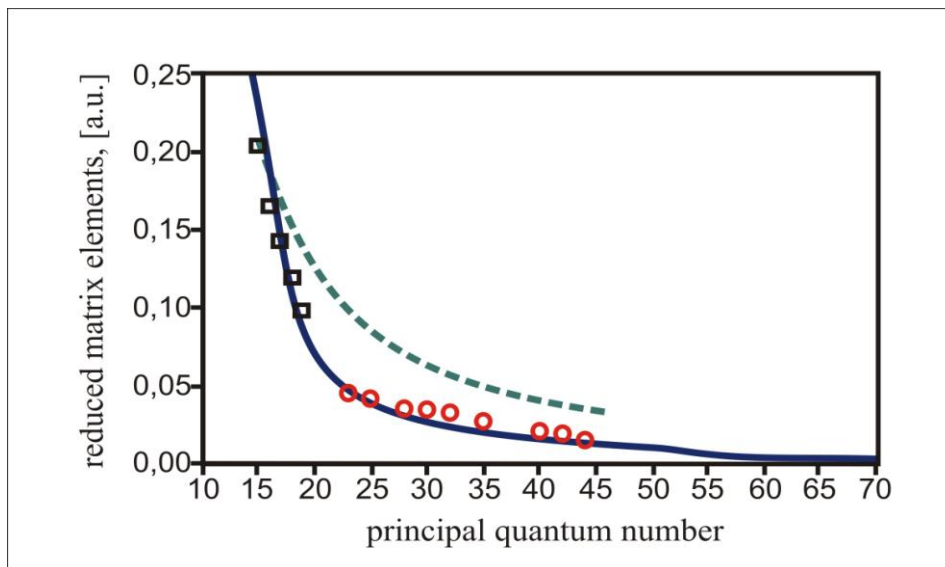


Рисунок 4.2 – Залежність значень редукованих матричних елементів (безперервна лінія – наші дані) переходів  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n=10-70$ ) від головного квантового числа для рідбергівського атому Cs: експеримент –  $\circ$ ,  $\square$  [26]; теорія – безперервна лінія (наші дані), переривчаста лінія – квазікласичні обчислення Piotrowicz et al [28]

На рисунку 4.3 наведені дані по значення часу життя рідбергівських станів  $nS_{1/2}$  ( $n=30-60$ ) в спектрі атому Cs: теоретичні дані Zhi-Gang Feng et al ( $n < 40$ ) – емпіричне кулонівське наближення; ab initio EF-RMP- наші дані).

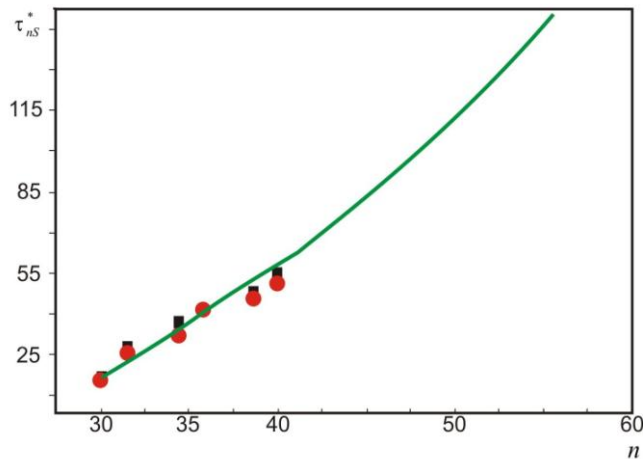


Рисунок 4.3 – Експериментальні (квадрати) [32] та теоретичні (Емпіричне кулонівське наближення Feng et al - кола;  $n < 40$ ; Наша теорія - EF- ab initio RMP - безперервна лінія) значення часу життя рідбергівських станів  $nS_{1/2}$  в спектрі Cs

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

Далі ми провели дослідження спектроскопічних характеристик (енергій рівнів, амплітуд переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n = 10-80$ ),  $7P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  ( $n = 10-80$ ) в спектрі рідбергівського Fr. На рисунку 4.4 наведена обчислена нами залежність величин редукованих матричних елементів переходів  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n = 10-80$  (безперервна лінія – наші дані) від головного квантового числа для рідбергівського Fs. Для амплітуд переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2,3/2}$  ( $n = 10-80$ ) отримані аналогічні дані. В

таблицях 4.11, 4.12 надані результати наших обчислень енергій рівнів часів життя низки високо збуджених рівнів  $ns^2 S_{1/2}, nd^2 D_{3/2}, nd^2 D_{5/2}$  атому Fr.

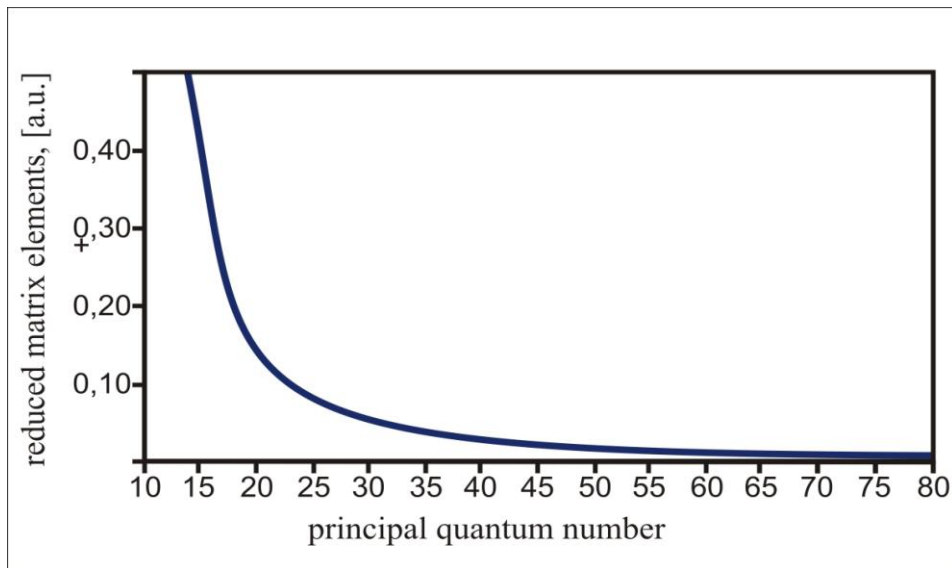


Рисунок 4.4 – Залежність значень редукованих матричних елементів від головного квантового числа для рідбергівського Fr  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  (наші дані)

Таблиця 4.11 – Теоретичні та експериментальні значення енергій (в  $\text{cm}^{-1}$ ) декотрих рідбергівських станів  $ns^2 S_{1/2}, nd^2 D_{3/2}, nd^2 D_{5/2}$  атому Fr: Експеримент (Exp.), теорія: емпіричне кулонівське наближення (KH)[32], і EF-RMP – наші дані

n	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{5/2}$	$nd^2 D_{5/2}$
E	$E_{\text{cal}}$ [32]	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$	$E_{\text{cal}}$ наші дані	$E_{\text{exp}}$
20	32356.42	32356.42	32356.44	32449.484	32449.483	19739.98	19739.98
22	32465.929	32465.933	32465.937	32465.94	32465.937	32450.489	32450.488
24	32542.59	32542.59	32542.59	32589.68	32589.68	32590.20	32590.20
28	32640.14	32640.11	32640.14	32667.16	32667.18	32667.47	32667.49
30	32672.29	32672.27	32672.29	32693.48	32693.50	32693.73	32693.75
35	32726.36	32726.34	-	32738.79	-	32738.94	-
40	32758.93	32758.91	-	32766.82	-	32766.91	-
45	32780.04	32780.01	-	32785.37	-	32785.42	-
46	32783.36	32783.33	-	32788.33	-	32788.39	-
48	32789.33	32789.31	-	32793.61	-	32793.68	-
50	32794.51	32794.49	-	32798.26	-	32798.32	-

Таблиця 4.12 – Теоретичні та експериментальні значення часів життя (в нс) групи станів атому Fr: Експеримент (Exp.), теорія: кулонівське наближення (КН) та МР

Рівень	$ns^2 S_{1/2}$	$ns^2 S_{1/2}$	$np^2 P_{1/2}$	$np^2 P_{3/2}$	$nd^2 D_{3/2}$	$nd^2 D_{5/2}$
n/τ	τ <sub>cal</sub> [33]	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані	τ <sub>cal</sub> наші дані
10	2.304D2	2.337D2	4.275D2	2.338D2	2.093D2	2.064D2
12	6.244D2	6.270D2	1.035D3	5.657D2	3.970D2	3.962D2
15	1.847D3	1.889D3	2.698D3	1.438D3	8.645D2	8.668D2
16	2.472D3	2.480D3	3.437D3	1.846D3	1.085D3	1.089D3
20	-	6.328D3	8.156D3	4.294D3	2.380D3	2.385D3

Аналіз наведених у таблицях 4.11, 4.12 даних показує, що, по перше, використання нашого неемпіричного методу, також як й емпіричного кулонівського наближення (фактично з компіляцією) у обчисленні енергій рівнів дає дуже добру згоду з експериментальними даними (до n=30; для більш високо розташованих станів надійних емпіричних даних поки немає), що є достатньо природно враховуючи, що точність обчислення енергій залежить в основному від коректності гамільтоніану відповідної атомної моделі, та ступеню урахування ОК ефектів за рахунок або коректних теоретичних моделей або використання емпіричних даних в якості фітінгових параметрів. На відміну від енергій, обчислення властивостей типу сил осциляторів, часів життя тощо є значно більш складною задачею і визначається якістю базисів релятивістських орбіталей. Крім того, слід розуміти, що залежність сил осциляторів від n, напр., для розглянутих вище переходів  $nS \rightarrow nP$ ,  $nP \rightarrow nD$ , здається має монотонно убуваючий характер, але насправді, це не так, оскільки навіть для наведених переходів у випадку n~8-14 мають місце незвичайні нерегулярності. Крім того, для інших переходів, за участю, напр., F станів можливі зміни убування на ріст і таке інше. Тому, будь-який новий метод обчислення спектроскопічних параметрів



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

#### 4.4. Спектроскопія і релятивістська хаотична динаміка важких рідбергівських атомів в електромагнітному полі: Дані квантово-динамічного, спектроскопічного та хаос-кібернетичного обчислень

##### 4.4.1. Результати розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів рідбергівських важких багатоелектронних атомів: Rb, Cs, Fr

У таблиці 4.13 ми наводимо результати розрахунку на основі нашого, викладеного у розділі 2, методу енергій ( $\text{см}^{-1}$ ) штарківських резонансів для атома рубідію в рідбергівському стані  $(n, n_1, n_2, m)$  у полі напруженістю  $\varepsilon=2.189$  кВ/см. Для порівняння тут же наведені результати розрахунку в рамках  $1/n$ -наближення (з урахуванням проникності бар'єру), методу підсумовування рядів ТЗ [60] і нерелятивістського методу НКД.

Таблиця 4.13 – Енергії ( $\text{см}^{-1}$ ) штарківських резонансів для атома рубідію в рідбергівському стані  $(n, n_1, n_2, m)$  у полі напруженістю  $\varepsilon=2,189$  кВ/см

$n_1 n_2 m$	[14]	[60]	[121]	Наші дані	Експ. [62]
23,0,0	132,8	132,9	133,0	133,1	133,1
22,0,0	157,1	157,2	157,1	157,0	157,0
21,1,0	159,5	160,6	160,9	161,0	161,1
20,2,0	163,2	163,7	163,9	163,9	163,9
21,0,0	184,2	184,8	185,1	185,2	185,2
20,1,0	185,4	185,8	186,2	186,2	186,3
20,0,0	214,6	214,9	216,9	217,1	217,2
18,1,0	247,2	247,3	248,2	248,3	248,4
16,2,0	284,0	284,1	285,5	284,5	284,7
18,0,0	288,6	289,0	289,3	289,5	289,5

Експериментальні результати отримані Клепнером і співр. [62]. В даному випадку наша релятивістська теорія дуже добре узгоджується з експериментом: краще альтернативних методів  $1/n$ -наближення (з урахуванням проникності бар'єру), методу підсумовування рядів ТЗ [60] і нерелятивістського методу НКД. В цілому розрахунок проведено для 50 станів  $|n_1 n_2 m\rangle$  з  $m=0$  та  $1$ . У всіх випадках положення резонансів узгоджуються з хорошою точністю. Щодо ширин резонансів  $\Gamma^{(n_1 n_2 m)}$  ситуація виявляється істотно складнішою. Для ширин узгодженість між теорією і експериментом виявляється гіршою, ніж для енергій резонансів. Слід зазначити, однак, що ширини резонансів в даний час експериментально визначаються менш точно, ніж їх енергії.

В таблиці 4.14 представлені наші результати для енергій штарківських резонансів для атома Cs в рідбергівському стані  $(n, n_1, n_2, m)$  в полі з напруженістю  $\varepsilon=2.25$  кВ/см.

Таблиця 4.14 – Енергії ( $\text{см}^{-1}$ ) штарківських резонансів для атома цезію в рідбергівському стані ( $n, n_1, n_2, m$ ) у полі напруженістю  $\varepsilon=2,25$  кВ/см

$n_1 n_2 m$	НКД [121]	Дана робота
25,0,0	-	107,9
23,0,0	-	126,5
22,0,0	-	148,4
21,0,0	-	176,5
20,1,0	181,0	181,3
19,2,0	184,2	184,4
20,0,0	208,9	209,1
18,1,0	253,2	253,4
16,2,0	289,4	289,7
18,0,0	297,5	297,8

Експериментальні дані і результати інших розрахунків характеристик (енергій і ширин) штарківських резонансів, крім методу нерелятивістського НКД, для розглянутих шуканих станів атомів відсутні. Спираючись на результати детального порівняння розрахованих нами характеристик штарківських резонансів у спектрі рубідію Rb з даними експерименту, очевидно, можна вважати, що запропонована нами теорія, в принципі, забезпечує досить високу точність їх визначення. Зазначимо лише, що у випадку атома цезію Cs (важкий атом) суттєву роль відіграють релятивістські ефекти і використання нашої релятивістської методики, очевидно, є більш адекватним. Аналіз отриманих нами даних, як і відповідний аналіз виконаний у роботах [60, 62, 121, 122] показує, що як енергії резонансів  $E$ , так і ширини  $\Gamma^{(n_1 n_2 m)}$  змінюються вкрай нерегулярно, фактично хаотично. Шукана нерегулярність зазвичай проясняється при відомому аналізі, пов'язаному з порівнянням наведеної напруженості електричного поля з класичним порогом іонізації  $F_{ion}$ . Добре відома на прикладі легких лужних атомів чітка кореляція між величинами  $\Gamma/2$  і  $f=(F-F_{ion})/F_{ion}$  [60,121], при-

чому остання величина характеризує близькість енергії резонансу до вершини потенційного бар'єру. Узагальнюючи результати [60, 121], для станів з  $n_1 \sim n \gg l, n_2$  і  $m-1$  можна записати співвідношення відповідно в насколопороговій області при  $E > 0$  як:

$$E_r^{(n_1 n_2 m)} = \varepsilon_{cl} (\tilde{n}^4 \varepsilon) / 2 \tilde{n}^2, \quad (4.1)$$

$$\Gamma^{(n_1 n_2 m)} = \gamma_{cl} (\tilde{n}^4 \varepsilon) p / \tilde{n}^3, \quad (4.2)$$

і в підпороговій області  $E < 0$ :

$$E_r^{(n_1 n_2 m)} = (1 / 2 \tilde{n}^2) [\varepsilon_{cl} (\tilde{n}^4 \varepsilon) + \eta \{ (\tilde{n} n^*)^2 \varepsilon - (\tilde{n} / n^*)^2 \eta (n^{*4} \varepsilon) \}], \quad (4.3)$$

$$\eta(F) = [-\varepsilon_{cl}(F)]^{3/2}, \quad (4.4)$$

де  $n^*$  – ефективне головне квантове число;  $\delta = \delta(n_1 n_2 m)$  – квантовий дефект,  $\tilde{n} = n_1 + (m+1)/2$ ,  $p = 2n_2 + m + 1$ .

Як зазначалося в [62, 121] шукані співвідношення визначають ефект скейлінгу для штарківських резонансів. Фактично  $\varepsilon_{cl}$  залежить від  $\tilde{F} = \tilde{n}^4 \varepsilon$  за таким уточненим нами законом виду:

$$\varepsilon_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon) = 2.1397 \cdot (\tilde{n}^4 \varepsilon) - 0.90669 \text{ (a.u.)} \quad (4.5)$$

В роботах [62, 121, 122] проводилася перевірка здійсненності ефекту скейлінгу в нерелятивістському наближенні для енергій штарківських резонансів для різних лужних атомів (фактично, крім цезію та францію) і атома водню, різних станів і величин напруженості електричного поля, зокрема, атому Н (використані дані по енергіям резонансів  $|n_1 n_2 m\rangle$  з ( $10 < n_1 < 17$ ,  $0 < n_2 < 4$ ) при  $\varepsilon = 16,8$  кВ/см і з ( $n_1 = 15-21$ ,  $n_2 = 0, 1$ ) при  $\varepsilon = 8.0$  кВ/см), Na (стани  $|n_1 0 0\rangle$  при  $\varepsilon = 3.59$  кВ/см і  $n_1 = 22-26$ ), K (резонанси  $|n_1 0 0\rangle$  при  $\varepsilon = 3.59$  кВ/см і  $n_1 = 21-25$ ), Rb (резонанси при  $\varepsilon = 2.189, 6.416$  кВ/см і  $n_1 = 18-23$ ), Cs (резонанси при  $\varepsilon = 2.25, 8.25$  кВ/см і  $n_1 = 18-22$ ), Fr (резонанси при  $\varepsilon = 2.4$ , кВ/см і  $n_1 = 17-20$ ). Згідно з даними роботи [62, 121] скейлінг спостерігається для Н, Na, K, згідно з [121] – ефект скейлінгу справед-

ливий і для атомів К і Rb; в той час як для Cs нерелятивістська теорія показує, що в повній мірі ефект скейлінгу не має місця. Наші дані показують, що цей факт пояснюється недостатньою коректністю нерелятивістської теорії при описі характеристик штарківських резонансів у таких важких атомах як цезій і франції. Слід особливо підкреслити, що для рідбергівських станів атома цезію скейлінг насправді дійсно має місце виявлений нами вперше. Що ж стосується атома франція, то скейлінг тут проявляється трохи менш чітко (~5%). Ілюстрацією шуканого ефекту є рисунок 4.5, де по осі абсцис відкладена наведена напруженість поля  $\tilde{F} = \tilde{n}^4 \varepsilon$ , а по осі ординат – величини:  $\tilde{\gamma}_{cl}$ .

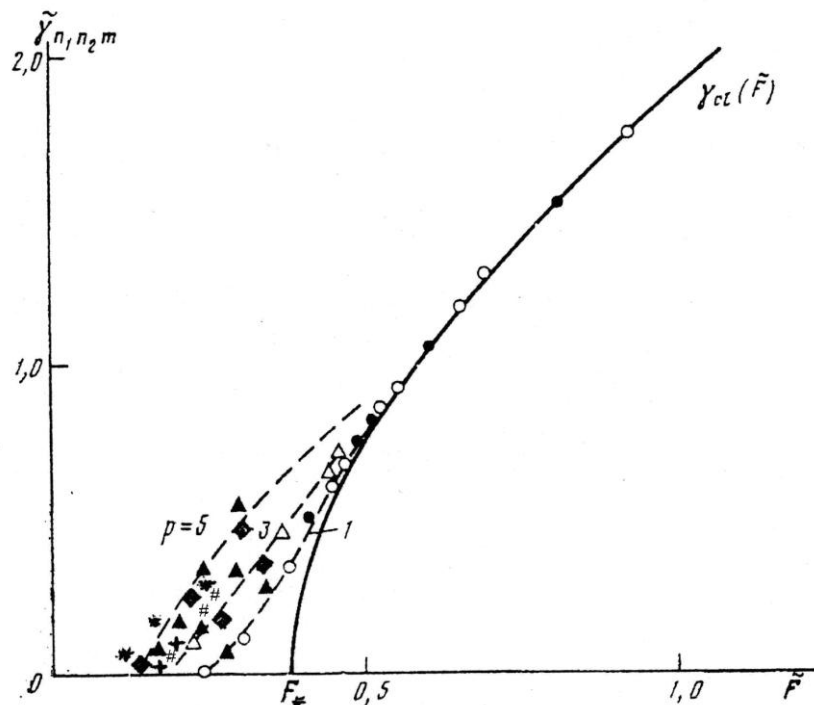


Рисунок 4.5 – Скейлінг для ширин штарківських резонансів:

- стани  $\circ, \bullet, \Delta$  – стани  $|n_1 00\rangle, |n_1 01\rangle, |n_1 10\rangle$  в H,  $\varepsilon=6.5, 8.0$  кВ/см;  
 $\blacktriangle$  – стани  $|n_1 n_2 0\rangle$  з  $n_2=0, 1, 1$  в Na,  $\varepsilon=3.59, 6.5$  кВ/см;  $*$  – стани  $|n_1 n_2 0\rangle$  з  $n_2=0, 1, 1$  в K,  $\varepsilon=3.59$  кВ/см;  $+$  стани  $|n_1 n_2 0\rangle$  з  $n_2=0, 1, 1$  в Cs,  $\varepsilon=2.25$  кВ/см;  
 $\blacklozenge$  – стани  $|n_1 n_2 0\rangle$  з  $n_2=0, 1, 1$  в Rb,  $\varepsilon=2.189, 6.416$ кВ/см;  $\#$  – францію (резонанси при  $\varepsilon=2.4$ , кВ/см і  $n_1=17-20$ ).

Вище мова йшла про досить сильні поля, але у випадку рідбергівських станів з великими  $n$  ефект Штарку є цікавим й для не досить значних напруже-

ностей полів в силу фізичних особливостей рідбергівських атомів. Як вказувалося у вступі, на сьогодні, в теорії розвинута значна кількість нерелятивістських методів, в той час як суттєво релятивістські методи налічують тільки одиниці. Оскільки в розділі 2 викладено вперше розвинутий нами релятивістський метод обчислення штарківських резонансів на основі формалізму ККЕС-RMP для будь-яких напруженостей електричного поля ми провели також обчислення енергій штарківських рівнів для рідбергівських Cs, Fr для досить слабких полів. На рисунках 4.6a,b наведені дані нашого обчислення залежності енергії ( $\text{cm}^{-1}$ ; енергія рівня у відсутності поля прийнята за 0) штарківських компонент ( $j, |m_j|$ ) стану 39DCs від напруженості поля (a) і зсуву стану 46D Cs- від її квадрата (b): експеримент (квадрати, кола, трикутники, ромби); на рис.4.6.a, крива 1 – напівемпірична ТЗ по полю Zhao et al [33]; крива 2 – наш метод ККЕС-RMP.

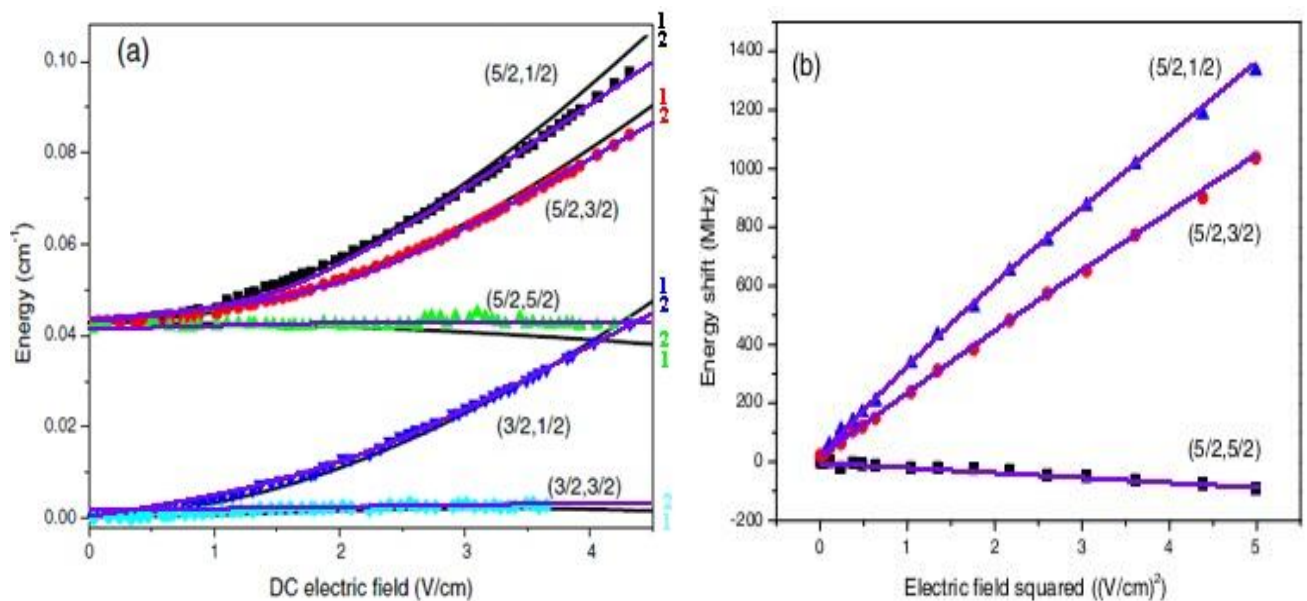


Рисунок 4.6a – Залежність енергії ( $\text{cm}^{-1}$ ; енергія рівня у відсутності поля прийнята за нуль) штарківських компонент ( $j, |m_j|$ ) стану 39D атому Cs від напруженості поля: Експеримент – квадрати, кола, трикутники, ромби [33]; Теорія: 1 – напівемпірична ТЗ по полю Zhao et al [33]; 2 – наш метод ККЕС;

Рисунок 4.6b – Штарківський зсув (в МГц) для стану 46D атому Cs в залежності від квадрата напруженості поля: Експеримент – квадрати, кола, трикутники [33]; Теорія – безперервні ліній (наші дані)

На рисунку 4.7 ми наводимо вперше в світовій літературі для рідбергівського францію результати нашого обчислення залежності величини штарківського зсуву (в МГц) компонент  $(j, |m_j|)$ , зокрема, стану 44D атому Fr від квадрату напруженості електричного поля.

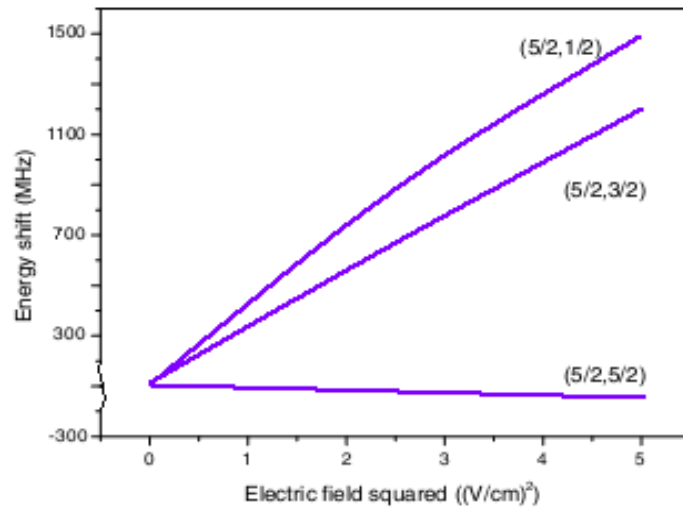


Рисунок 4.7 – Залежності штарківського зсуву (МГц) компонент  $(j, |m_j|)$  стану 44D атому Fr від квадрату напруженості електричного поля (наші дані)

Враховуючи, що розглянуті поля не є сильними, обидва методи (як видно з рис. 4.6) дали досить адекватний опис залежності енергії штарківських рівнів від амплітуди поля, особливо у порівнянні з експериментальними результатами для Cs. З іншого боку, звичайний метод ТЗ по напруженості поля “працює” виключно у випадку слабких полів (напівемпірична версія звичайно додатково вимагає наявності надійних емпіричних даних, які для важких атомів, як правило, відсутні), в той час як для сильних полів цей стандартний підхід фактично неспроможний дати кількісний опис DC Штарк ефекту. Наш метод на відміну від стандартних (ТЗ, квазікласичні моделі) працює як для слабких, так й сильних полів й в цьому сенсі є універсальним. Також слід підкреслити, що надані вище дані по Штарк ефекту для Fr отримані нами вперше і фактично відкривають нову сторінку у спектроскопії суперважких рідбергівських атомів у зовнішньому DC електричному полі та стимулюють подальше дослідження таких складних атомів як лантаніди, актиніди у рідбергівських станах тощо.

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

В даному підрозділі ми наведемо результати застосування викладених вище нових методів моделювання та аналізу динаміки релятивістських атомних систем в електромагнітному, зокрема, мікрохвильовому полі, а також докладні дані порівняння з деякими наявними результатами експериментів, проведених групами Stony Brook-Pittsburg, Virginia (USA) і Munchen (Germany) [112-118]. Далі, після аналізу одержаних результатів, вперше кількісно опишемо феномен релятивістського квантового хаосу в рідбергівських лужних атомах в мікрохвильовому полі (в т.ч. ефект хаотичної іонізації) з використанням універсального єдинообразного хаос-кібернетичного апарату, викладеному у розділі 3.

Почнемо розгляд з представлення наших результатів по дослідженню динаміки іонізації релятивістських атомних систем, зокрема, рубідію (Rb), францію (Fr), в рідбергівських станах з головним квантовим числом  $n=60-80$  в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля змінюється в межах  $F=(1,2\div 3,2)\cdot 10^{-9}$  ат.од,  $\omega/2\pi=8,87$  ГГц (як в експерименті для Rb, Munich group [118]) і  $\omega/2\pi=36$  ГГц; час взаємодії атом-поле  $T=(327\div 560)\cdot 2\pi/\omega$ . Серед теоретичних робіт по рубідію варто відзначити роботи Krug-Buchlienter [109-111], Glushkov-Prepelitsa et al, Ignatenko [120-1232], в яких були проведені прямі чисельні розрахунки ймовірностей іонізації, зокрема, Li, Rb, з  $n>60$  на основі численого рішення нерелятивістського рівняння Шредінгера в Н-подібному наближенні та наближенні квантового дефекту й спрощеного модельного потенціалу. Принципово новим елементом нашої роботи є те, що на відміну від зазначених альтернативних нерелятивістських методів ми вперше розвинули істотно послідовний релятивістський підхід, що базується на рівнянні Дірака з використанням (також вперше) базису розкладання релятивістської операторної ТЗ, таким чином заклавши основу для подальшого кількісного опису феномену релятивістського квантового хаосу. В таблиці 4.15 ми приводимо обчислені на-



ми (Th3 – наша релятивістська теорія) теоретичні ймовірності іонізації атома Rb ( $l_0=0$ ,  $m_0=0$ ,  $n_0=60-66$ ) для параметрів мікрохвильового поля  $F=3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од., частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц, 8.87ГГц (параметр  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ ), а також для порівняння – аналогічні теоретичні дані, зокрема, Th1 – нерелятивістська теорія Krug-Buchleitner [15] на основі рівняння Шредінгера; Th2 – нерелятивістська теорія Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [120,121]. Нижче ми наведемо результати порівняння нашої теорії з експериментальними даними Munich group [118].

Таблиця 4.15 – Теоретичні ймовірності іонізації атома Rb ( $l_0=0$ ,  $m_0=0$ ,  $n_0=60-66$ ) для параметрів поля:  $F=3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од.,  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц і 8,87ГГц (Th1 – нерелятивістська теорія Krug-Buchleitner [111] на основі рівняння Шредінгера; Th2 – нерелятивістська теорія Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [120,121]; Th3 – наша релятивістська теорія)

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

Далі у таблицях 4.16, 4.17 наведені обчислені нами у релятивістському наближенні значення (Th.1) ймовірності іонізації атома рубідію, підготовлених спочатку в станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=58-66$ , в залежності від амплітуди поля для різних величин часу взаємодії атома з полем:  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ ,  $t = 650 \cdot 2\pi/\omega$ .

Таблиця 4.16 – Ймовірність іонізації атомів Rb в станах з  $l_0=0$ ,  $m_0=0$ ,  $n_0=58-66$  як функція амплітуди поля  $F$  (в  $10^{-9}$  ат.од.;  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц)

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

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

Фізика процесу свідчить про те, що при малих значеннях напруженості поля  $F$  має місце домінування кулонівського поля атомного остова над зовнішнім, однак при значенні напруженості  $F \sim 2,5 \cdot 10^{-9}$  ат.од. ситуація змінюється, і, навпаки, зовнішнє поле починає домінувати над полем кулонівського тяжіння. До речі, дана обставина також зазначена у роботах Krug-Buchlienter, Ignatenko et al [111, 121], але амплітуда поля була завищеною (див. нижче). Звичайно, фізику нерегулярності можна пояснити, зокрема, антиперетином двох сусідніх флоківських станів в спектрі квазіенергій при зміні амплітуди поля  $F$ . При поміщенні рідбергівського атому у мікрохвильове поле має місце індукування великого числа квазістаціонарних станів, їх сильний зв'язок із станами континууму, що істотно впливає на кількісну поведінку ймовірності іонізації. Мова йде про суттєве резонансне ускладнення структури спектра Флоке і, особливо, по-

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

Таблиця 4.17 – Ймовірності іонізації атомів Rb в станах з  $l_0=0, m_0=0, n_0=58-66$  для амплітуд поля:  $F=(2,0-3,1) \cdot 10^{-9}$  ат.од. ( $t = 650 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц)

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

Далі наведемо результати порівняння теоретичних даних з даними експерименту. Тут варто згадати, що експериментаторами здебільшого приводяться дані щодо порогових значень амплітуди поля  $F_{10\%}$  (при яких має місце 10% іонізація атомів). Теоретично ця характеристика легко розраховується на основі даних по залежності ймовірності іонізації від амплітуди поля при різних часах взаємодії “атом – поле”. На рис. 4.8 представлено дані по залежно-

сті величини  $F_{10\%}$  від  $n_0$  для Rb:  $\triangle$  – експериментальні дані [84-86] ( $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ); Теорія: 1) Нерелятивістські моделі Krug-Buchleitner, Glushkov-Prepelitsa-Ignatenko et al [109, 111, 120-122] (чисельне розв'язання рівняння Шредінгера), дані обох теорій в масштабі рисунку практично співпадають:  $\blacklozenge$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\bullet$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ ; 2) Наша релятивістська теорія:  $\star$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\star$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ .

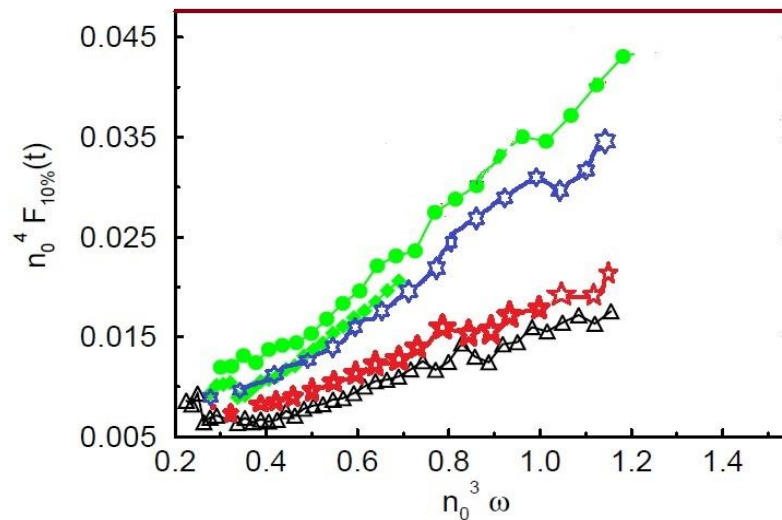


Рисунок 4.8 – Залежність  $F_{10\%}$  від  $n_0$  для Rb:  $\triangle$  – експеримент [84-86] ( $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ); Теорія: 1) Нерелятивістські моделі [111,121] (чисельне розв'язання рівняння Шредінгера):  $\blacklozenge$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ ГГц}$ ;  $\bullet$  – дані для  $\omega/2\pi=36\text{ ГГц}$ ; 2) Наша релятивістська теорія:  $\star$  – дані для  $\omega/2\pi=8,87\text{ГГц}$ ;  $\star$  –  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$

Порівняння теоретичних та експериментальних даних, зокрема по рубідю, показує, що релятивістська теорія дає значно більш точні результати, які істотно краще узгоджуються з експериментом у порівнянні з нерелятивістськими моделями навіть з використанням фізично коректних в даній задачі наближень квантового дефекту і модельного кулонівського потенціалу [109-111,120-123]. Головною причиною такої ситуації є, очевидно, урахування релятивістських ефектів завдяки використанню в нашій теорії в якості базового рівняння

Діраку. Важливо відзначити, що перелічені моделі [111, 120, 121] у випадку мікрохвильової іонізації легкого атому літію забезпечують практично спектроскопічну точність. З іншого боку, із ретельного порівняння наших теоретичних результатів для ймовірностей іонізації з експериментальними даними Munich group [118] видно, що також має місце невелика розбіжність даних, яку можна пояснити лише певною обчислювальною похибкою теоретичного розрахунку. Варто додати, що у випадку аналогічних більш легких атомних систем, зокрема, атомів водню, літію або натрію, як правило, нерелятивістська та релятивістська теорії дають практично однакові результати. У випадку динаміки релятивістських атомних систем, зокрема, таких як рубідій, та далі, безумовно, францій, значення релятивістських ефектів, у тому числі роль багатоелектронного релятивістського остову, для атомів навіть в рідбергівських станах стає дуже значною. Більш того, на відміну від атома водню, тут істотним є внесок поправок порядку  $1/n^3$  як в енергетичні так й радіаційно-динамічні характеристики системи.

В таблиці 4.18 представлені вперше обчислені нами значення ймовірності іонізації атому францію Fr, підготовлених спочатку у станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=74-86$ , в залежності від амплітуди мікрохвильового поля (параметри:  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ ).

Таблиця 4.18 – Ймовірність іонізації атома Fr ( $l_0=0, m_0=0, n_0=74-86$ ) як функція амплітуди поля  $F$  (в  $10^{-9}$  ат.од.;  $t=327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36\text{ГГц}$ )

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

Варто особливо зазначити, що досі в літературі немає жодних теоретичних або експериментальних даних щодо динаміки цього, до речі радіоактивного, атому у мікрохвильовому полі. Тобто отримані результати є першими даними щодо іонізаційної динаміки францію в мікрохвильовому полі. Далі в таблиці 4.19 представлено обчислені значення (Th.1) ймовірності іонізації атому францію Fr, підготовленого спочатку у станах з орбітальним кутовим моментом  $l_0=0$ , проекцією моменту  $m_0=0$  і значеннями головного квантового числа  $n_0=77-86$ , в залежності від амплітуди мікрохвильового поля (параметри:  $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  і  $8,87$  ГГц).

Таблиця 4.19 – Ймовірності іонізації атома Fr ( $l_0=0, m_0=0, n_0=77-86$ ) в залежності від напруженості  $F=2,8$  і  $3,1 \cdot 10^{-9}$  ат.од. ( $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$ , частота  $\omega/2\pi=36$  ГГц і  $8,87$  ГГц)

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

Аналіз отриманих нами даних для францію показує, що у випадку цього, досить важкого суттєво релятивістського атому, залежність ймовірності іонізації від амплітуди поля і квантових чисел стає значно складнішою, ніж у випадку більш легких лужних атомів. З даних таблиці 4.19 видно наявність двох порушень регулярної залежності ймовірності іонізації від амплітуди поля для різних станів. Як і вище, у разі рідбергівського атому францію у мікрохвильовому полі, суттєве значення мають одночасно і резонансне ускладнення структури спектра Флоке, сильний зв'язок квазістаціонарних станів з континуумом, суттєвий

внесок багатифотонних резонансів і, нарешті, більш вагома роль релятивістського багатоелектронного остову атомної системи. Картина стає більш складною за наявності поблизу однофотонних резонансних переходів з квазі-випадковою відбудовою від резонансу і квантовим фазовим зсувом внаслідок розсіювання рідберговського електрона на важкому релятивістському атомному остові. Перелічені фізичні аспекти пояснюють цілком нерегулярну динаміку квазістаціонарних станів важких релятивістських рідбергівських атомних систем при накладенні на атом мікрохвильового поля. Фактично мова йде про наявність в динаміці релятивістських рідбергівських атомів у мікрохвильовому полі елементів динамічного хаосу, який ми називаємо релятивістським квантовим хаосом. Для кількісного підтвердження цього висновку вкрай важливим є подальший повний хаос-кібернетичний аналіз іонізаційної динаміки розглянутих релятивістських атомів у мікрохвильовому полі, результати якого наводяться у наступному підрозділі.

#### 4.4.3. Хаос-кібернетичного моделювання динаміки важких рідбергівських атомів у мікрохвильовому полі: Релятивістський квантовий хаос

В цьому підрозділі ми застосуємо викладений вище наш удосконалений комплексний універсальний підхід до вивчення хаотичної динаміки рідбергівських атомів рубідію, цезію та францію в мікрохвильовому полі (параметри ті ж, що і вище). Нами було виконано чисельні дослідження хаотичної динаміки атомів рубідію, францію, виходячи з кількісних даних по залежності ймовірності іонізації від часу, частоти і амплітуди мікрохвильового поля. Далі для більшої визначеності розглянемо детальніше атом рубідію, хоча аналогічні, звісно кількісно відмінні, дані отримані й для францію. При цьому вибрані параметри повністю відповідають заданим в експерименті Munich groups [118] значенням, у яких експериментально спостерігалася іонізація атомів Rb в режимі хаосу. На рисунку 4.9 показано результати обчислення залежності ймовірності  $P$

іонізації атома рубідію як функції масштабованої частоти  $\omega_0 = n_0^3 \omega$  (тут взято:  $F_0 = n_0^4 F$ ,  $F_0=0,04698$ ;  $n_0=64$ ;  $F= 2.8 \cdot 10^{-9}$  ат.од.). Важлива особливість даних – це наявність унікального феномену квантових флуктуацій, що спостерігаються аж до  $\Delta\omega_0 \sim 10^{-6}$ . В межах якісного розгляду можна показати, що при масштабованих параметрах частоти  $\omega_0 = \omega n_0^3 > 1$  ( $n_0$  – початковий збуджений стан) і напруженості поля  $\varepsilon_0 = F_0 n_0^4 > \varepsilon_c \approx (50\omega_0^{1/3})^{-1}$  рух електрона в релятивістській атомній системі в мікрохвильовому полі повинен переходити в релятивістський хаотичний режим, причому його реалізація має проходити за сценарієм хаотичної дифузії.

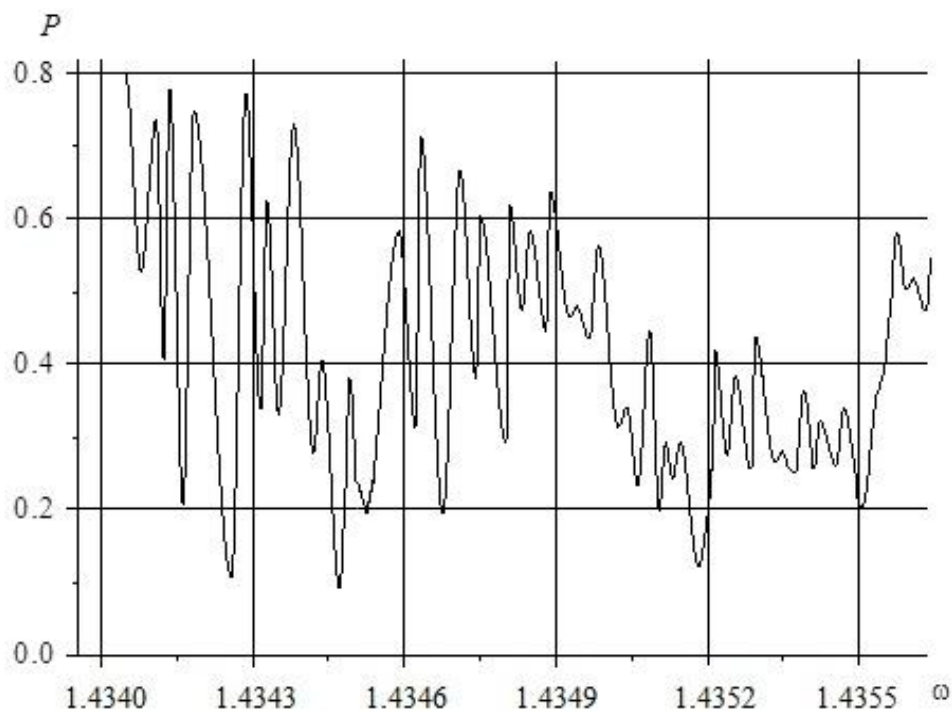


Рисунок 4.9 – Залежність ймовірності  $P$  іонізації атома рубідію як функції масштабованої частоти  $\omega_0 = n_0^3 \omega$  (тут взято:  $F_0 = n_0^4 F$ ,  $F_0=0,04698$ ;  $n_0=64$ )

Схема обчислення включала побудову дискретного ряду  $p(n)$ ,  $n=1-5120$  (крок:  $4 \cdot 10^{-6}$ ) з подальшим визначенням середньоквадратного зсуву  $M(n)$  та коефіцієнту Готтвода і Мелбена (для рубідію й, відповідно, францію отримано:  $K=0,83$  і  $0,89$ ). Згідно із загальною схемою далі були реалізовані алгоритми



аналізу автокореляційної функції, взаємної інформації, метод кореляційного інтегралу, алгоритм помилкових найближчих сусідів, й, нарешті, аналіз показників Ляпунова. Часова залежність міцності розглядалась як часовий ряд  $P(n) = P(t_0 + n\Delta t)$ , де  $t_0$  – час початку,  $\Delta t = 0.1$ нс – часовий крок, після чого результати реконструкції в певному наборі  $d$ -мірних векторів  $y(n)$  замінюють скалярні виміри:  $y(n) = [P(n), P(n + \tau), P(n + 2\tau), \dots, P(n + (d-1)\tau)]$ , де  $d = d_E$  – розмірність вкладення,  $\tau$  – часовий лаг. Далі були обчислені функція автокореляції (рис.4.10 (a)) і середня взаємна інформація (рис.4.10 (b)).

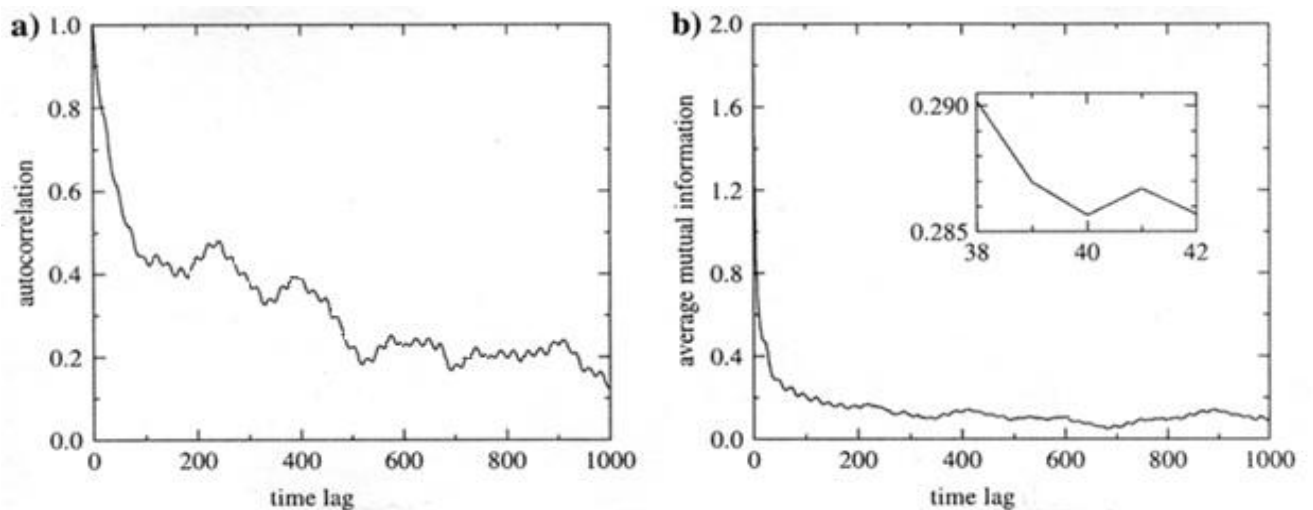


Рисунок 4.10 (a) – функція автокореляції і (b) – середня взаємна інформація

Як звичайно, критичним є вибір чисельного значення величини часового лагу. Згідно із [246, 253], при виборі значення  $\tau$  занадто малим координати  $P(n + \kappa\tau)$  та  $P(n + (\kappa+1)\tau)$  розташовані дуже близько один до одного, й в результаті практично не відокремлюються один від одного, а у випадку надто великого значення часового лагу шукані координати повністю статистично незалежні один від одного. Оптимальним є проміжне положення між обома випадками. В табл. 4.20 наведені дані щодо часу затримки  $\tau$ , що відповідають різним значенням автокореляційної функції  $C_L$  та першому мінімуму середньої взаємної інформації  $I_{\min 1}$ . Далі було виконано обчислення вкладеної розмірності з метою подальшого реконструювання евклідового простору  $R^d$  [243-249].

Таблиця 4.20 – Значення  $\tau$ , що відповідають різним значенням автокореляційної функції  $C_L$  та першому мінімуму середньої взаємної інформації  $I_{\min 1}$

$C_L=0$	$C_L=0.1$	$C_L=0.5$	$I_{\min 1}$
120	62	7	9

Згідно із теоремою вкладення (див. напр., [246, 253]) шукана розмірність вкладення  $d_E$  повинна бути рівною або перевищувати значення розмірності аттрактору  $d_A$ . Для реконструювання розмірності аттрактору використані метод кореляційного інтегралу та алгоритм хибних найближчих сусідніх точок ( у версіях [246, 249, 253]). На рис. 4.11 наведені дані взаємозв'язку між показником кореляції (кореляційною експонентою) та розмірністю вкладення для початкового часового ряду (лінія 1), середніх значень заміни змінних (лінія 2) та одному здійсненню заміни (лінія 3). Столпчики помилок вказують мінімальні значення кореляційної експоненти серед всіх здійснень заміни змінних.

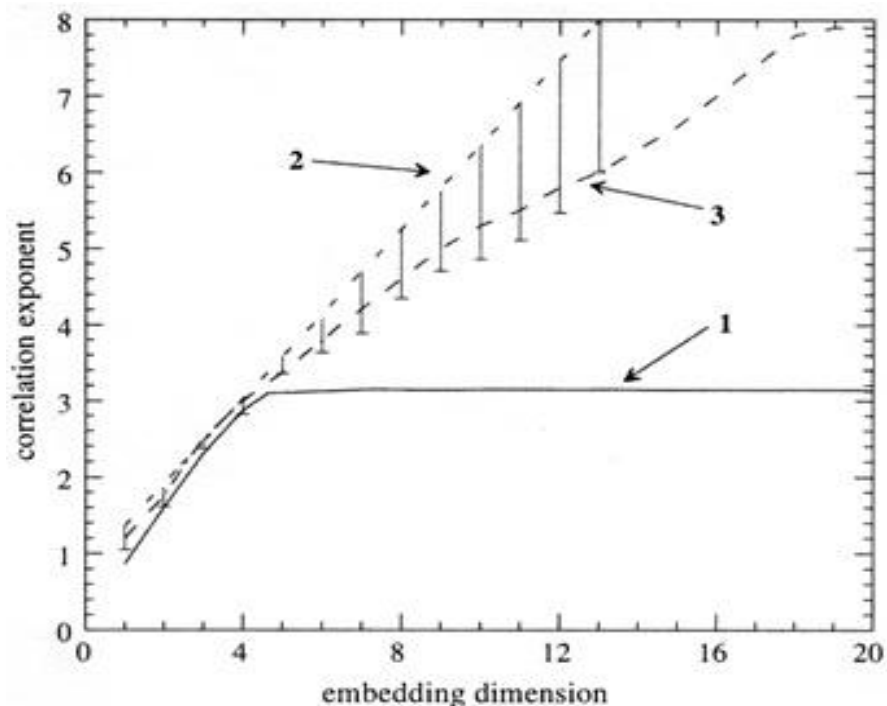


Рисунок 4.11 – Дані взаємозв'язку між показником кореляції та розмірністю вкладення для початкового часового ряду (лінія 1), середніх значень заміни змінних (лінія 2) та одному здійсненню заміни (лінія 3) (наш розрахунок для рубідію)

На рис. 4.12 представлені дані обчислення розмірності вкладення на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок для серії оригінальних даних (лінія 1), середніх значень сурогатних даних (2), однієї сурогатної реалізації (3).

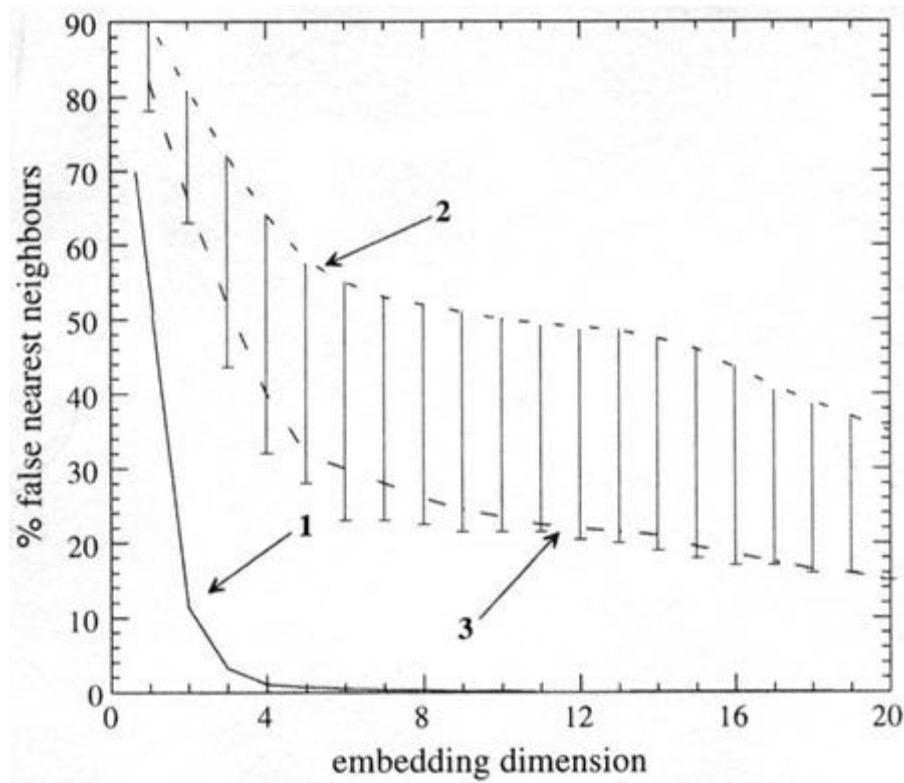


Рисунок 4.12 – Результати обчислення розмірності вкладення на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок для серії оригінальних даних (лінія 1), середніх значень сурогатних даних (2), однієї сурогатної реалізації (3) (наш розрахунок для рубідію)

Далі в таблиці 4.21 наведені дані обчислення кореляційної розмірності  $d_2$ , розмірності вкладення, визначеної на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок ( $d_N$ ) з процентом хибних сусідів (%) розрахованих для різних значень часу затримки  $\tau$  відповідно для аналізу рядів (рис. 4.12).

Наступний етап – обчислення глобальних розмірностей Ляпунова  $\lambda_\alpha$  та ентропії Колмогорова. В таблиці 4.22 наведені чисельні значення показників Ляпунова, ентропії Колмогорова  $K_{entr}$  для двох досліджених релятивістських атомних систем у мікрохвильовому полі.

Таблиця 4.21 – Кореляційна розмірність  $d_2$ , розмірність вкладення, визначена на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок ( $d_N$ ) з відсотком хибних сусідів (%) розрахованих для різних значень лагу  $\tau$

$\tau$	$d_2$	( $d_N$ )
60	3.52	5 (5.5)
6	3.01	4 (1.1)
8	3.01	4 (1.1)

Таблиця 4.22 – Чисельні значення параметра Готтвода-Мелбена, перших показників Ляпунова LE  $\lambda_1, \lambda_2$ , ентропії Колмогорова  $K_{entr}$  (для атомів Rb, Cs, Fr)

Regim	K	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$K_{entr}$
Chaos (Rb)	0,85	0,21	0,06	0,27
Chaos (Cs)	0,87	0,22	0,09	0,31
Chaos (Fr)	0,89	0,25	0,11	0,36

Перший важливий висновок стосовно даних по іонізаційній динаміці рубідію та францію – це те, що два перші показники Ляпунова є позитивними, що звісно є безумовним свідченням хаотичного режиму динаміки іонізації шуканих релятивістських систем.

Слідом за цим корисно оцінити масштабований параметр  $\omega_o = \omega n_o^3$  для Rb, Fr, при якому режим хаотичної іонізації переходить в режим динамічної стабілізації; наші оцінки показують, що це має місце при  $\omega_o = \omega n_o^3 > 0,29$  (Rb) і  $0,16$  (Fr), що для Rb реалістично узгоджується з подібними нерелятивістськими оцінками [111,122,118], відповідно, 0,3-0,31. Наприкінці зазначимо, що важкі рідбергівські лужні атоми на відміну від легких, вочевидь, є значно складнішими з точки зору динаміки об'єктами. З позиції квантового хаосу аналог так званого класичного хаосу імплементується послідовністю одно-фотонних близько

резонансних переходів з квазівипадковою відбудовою від резонансу (це також має місце в атомі водню). Але ця фізична картина далі істотно модифікується за рахунок резонансного ускладнення структури спектра Флоке, зростаючого посилення зв'язку квазістаціонарних станів з континуумом, зростаючого впливу багатофотонних резонансів, а також, зрозуміло, різкого посилення значення релятивістського багатоелектронного остова. Мова, звичайно ж, йде про квантові зрушення фаз внаслідок розсіювання рідбергівського електрона на релятивістському атомному остові, що безсумнівно не має ніякого аналога, наприклад, в класичній динаміці точкових частинок, яка здебільшого застосовується при дослідженні регулярної та хаотичної динаміки легких атомів літію, а також водню та гелію. В силу сказаного, безумовно, можна стверджувати, що феномен релятивістського квантового хаосу, який має місце в динаміці релятивістських атомних систем в мікрохвильовому електромагнітному полі, є значно більш складним, зокрема, у порівнянні із звичайним (нерелятивістським) квантовим хаосом, який дуже добре досліджений для таких систем як атоми літію, водню, гелію. У всякому разі наведені вище результати релятивістського квантово-динамічного та хаос-кібернетичного обчислення повністю це підтверджують. Нарешті, особливо зазначимо, що вони є першими у світовій літературі кількісними результатами, що демонструють фізику та особливості релятивістського квантового хаосу і відкривають сторінки нової хаотичної квантової оптики і спектроскопії рідбергівських атомів.

## ВИСНОВКИ

Розвинені в роботі нові моделі й методи розрахунку енергетичних та спектроскопічних властивостей релятивістських атомних систем у вільному стані та у зовнішньому електромагнітному (мікрохвильовому) полі й отримані на їх основі нові дані закладають основи принципово нового підходу у сучасній релятивістській спектроскопії важких рідбергівських атомних систем, у т.ч. дають вперше найбільш повний кількісний опис явища релятивістського квантового хаосу.

Основні результати роботи полягають у наступному:

1. Розроблено новий прецизійний суттєво релятивістський підхід до опису та обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик важких рідбергівських атомів, який базується на *ab initio* релятивістському методі MP, енергетичному підході (на основі КЕД Glushkov-Ivanov формалізму та S-матричного Gell-Mann-Low формалізму) з оптимізацією базисів релятивістських рідбергівських орбіталей, дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та прецизійним урахуванням ОК ефектів, в т.ч. ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах і тиску континууму.

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

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

4. Розвинуто новий прецизійний вперше релятивістський підхід до розрахунку та аналізу енергетичних та спектроскопічних характеристик (енергії та ширини штарківських резонансів) важких рідбергівських атомів в DC, AC електромагнітному полі, динаміки хаотичної іонізації важких рідбергівських атомних систем у мікрохвильовому НВЧ полі, який базується на теорії квазістаціонарних квазіенергетичних станів, релятивістській версії оптимізованої операторній ТЗ та *ab initio* методі модельного потенціалу, алгоритмі комплексного обернення координат.

4. Вперше на основі нового суттєво релятивістського методу обчислено енергії і та ширини штарківських резонансів (DC ефект Штарку) для рідбергівських атомів в DC електричному полі для напруженостей  $\epsilon=2.189$ кВ/см і рідбергівських станів  $n_1=18-23$  ( $n_2=0-2$ ;  $m=0$ ) Rb (тестові обчислення),  $\epsilon= 2.25, 2.4$ кВ/см і рідбергівських станів  $n_1=18-25$  ( $n_2=0-2$ ;  $m=0$ ) відповідно Cs і Fr; розраховано залежності енергії штарківських компонент ( $j, |m_j|$ ) від напруженості електричного поля для рідбергівських станів  $nD_{3/2,5/2}$  ( $n=39-46$ ) Cs, які знаходяться у доброму узгодженні з експериментальними даними Zhao et al; вперше отримано аналогічні дані по ефекту Штарку для рідбергівського францію.

5. Розроблено та адаптовано універсальний, хаос-кібернетичний апарат для розв'язання задач кількісного опису та аналізу квантово-оптичних хаотичних особливостей в динаміці та спектроскопії релятивістських рідбергівських атомів в полі (вперше з використанням вейвлет-розкладань тощо), який одно-

часно включає низку нових моделей в релятивістській спектроскопії важких рідбергівських атомів у полі і групу нових або суттєво удосконалених методів аналізу (зокрема, кореляційно-інтегрального аналізу, фрактального, вейвлет-аналізу, середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, метод показників Ляпунова, ентропії Колмогорова, спектрів потужності тощо).

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

7. Вперше одержано кількісні характеристики релятивістського квантового хаосу для рідбергівських систем в мікрохвильовому НВЧ полі (з характерним резонансним ускладненням структури спектра Флоке, сильним зв'язком квазістаціонарних станів з континуумом, впливом багатофотонних резонансів, вагомим значенням релятивістського багатоелектронного остова); для рідбергівських Rb (тест), Cs, Fr в НВЧ полі обчислено кореляційні розмірності, показники Ляпунова  $\lambda_\alpha(+,+)$ , ентропія Колмогорова тощо і знайдено умови переходу режиму релятивістської хаотичної іонізації у режим стабілізації (для Cs, Fr вперше); вперше кількісно описано феномен релятивістського квантово-оптичного хаосу.



## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Grant I.P., *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules/ Grant I.P.-Oxford, 2008.-650P.*
2. Quiney H., *Relativistic Quantum Mechanics of Atoms and Molecules/ Quiney H.//New Trends in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2002.-Vol.6.-P.135–173*
3. Глушков А.В., *Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем/ Глушков А.В.- Одесса: Астропринт, 2008.- 700С.*
4. Glushkov A.V., *Advanced relativistic energy approach to radiative decay processes in multielectron atoms and multicharged ions// Advances in Theory of Quantum Systems in Chem. and Phys. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G.Delgado-Barrio (Berlin: Springer).-2012-Vol.26.-P.31-54.*
5. Glushkov A.V., *Operator perturbation theory for atomic systems in a strong DC electric field//Adv.in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. M.Hotokka, J.Maruani, E. Brändas, G.Delgado-Barrio (Berlin, Springer).-2013.-Vol.28.-Part2.-P.161-178.*
6. Басов Н.Г., *Оптические стандарты частоты/ Басов Н.Г., Летохов В.С.//Усп.физ наук. (Sov.Phys.Uspekhi).-1969.-Т.11.-С.855-880; Летохов В.С., Лазерная оптика нейтральных атомных пучков/Летохов В.С., Балыкин В.И.// Усп.физ наук. (Sov.Phys.Uspekhi).-1990.-Vol.33.-P.79-85.*
7. Ivanov L.N., *Autoionization states of multi-electron atoms/ Ivanov L.N., Letokhov V.S.//Com. Of Modern Phys. D. Atom. and Mol.Phys.-1985.-Vol.4.-P.169-184; Glushkov A.V., Nuclear quantum optics/ Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S.//Preprint ISAN, USSR Academy of Sciences, NAS-3, Moscow (1991).*
8. Кондратенко П.О. *Фотохімічна дія світла/ Кондратенко П.О.- Київ: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”. - 2005. – 401С.*
9. Glushkov A.V., *Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L. et al// Frontiers in*

- Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry, Eds.: S.Wilson, P.J.GROUT, J. Maruani, G. Delgado-Barrio, P. Piecuch (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.- P.505-522.
10. Glushkov A.V., Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A.// Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. P.Hoggan, E.Brandas, J.Maruani, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2011.-Vol.22.-P.51-70.
  11. Глушков А.В., Иванов Л.Н., Иванова Е.П., Радиационный распад атомных состояний. Обобщенный энергетический подход/ Глушков А.В., Иванов Л.Н., Иванова Е.П.// В кн.: Автоионизационные явления в атомах- М.: Изд-во МГУ.-1986.-С.58-160; Glushkov A.V., Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// Phys. Lett.A.-1992.-Vol.170.-P.33-38.
  12. 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; 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.
  13. Ivanov L.N., Ivanova E.P., Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra/ // Atom.Data Nucl .Data Tab.-1979.-Vol.24.-P.95-121; Ivanova E.P. High-order corrections in relativistic perturbation theory with model zero approximation: F- and Ne-like ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E.// Physica Scripta.-1985.-V.32,N4.-P.512-524.
  14. Martin G., NIST Spectra Database, version 2.0 / Martin G.//NIST.-Washington.-2004; (<http://physics.nist.gov.asd>); Moore C., NBS Spectra Database / Moore C.// NBS.-Washington.-1987.
  15. Grance M. Revised energy levels for neutral atoms and ions/ Grance M. // Atomic Data.-1973.-Vol.5.-P.185-220.

16. Stein M., Pseudo-potential approach to the relativistic treatment of alkali atoms/Stein M.//J.Phys.B.: At.Mol.Opt.Phys.-1993.-Vol.26.-P.2087-2097.
17. Reiher G., Atomic oscillator-strength distributions in spectral series of Li isoelectronic sequence/Martin G., Wiese W.//Phys. Rev. A.-1976.-Vol.13.-P.699-714; Martin G., Tables of critically evaluated oscillator strengths for lithium isoelectronic sequence/Martin G., Wiese W.//Journ. of Phys. Chem. Ref. Data.-1976.-Vol.5.-P.537-570.
18. Weiss A.W., Hartree-Fock line strengths for lithium, sodium and copper isoelectronic sequences/ Weiss A.W.// J.Quant. Spectr.Rad.Tr.-1977.- Vol.18.-P.481-491.
19. Gounand F., Calculation of radial matrix elements and Radiative lifetimes for highly excited states of alkali atoms using the Coulomb approximation/Gounand F. //Journ. de Phys.-1979.-Vol.40.-P.457-460.
20. Lindgard A., Transition probabilities for the alkali isoelectronic sequences: LiI, NaI, KI, RbI, CsI, FrI/ Lindgard A., Nielsen S.E.//Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.-1977.-Vol.19.-P.533-633; Theodosiou C.E., Lifetimes of alkali-metal—atom Rydberg states/ Theodosiou C.E.// Phys. Rev. A.-1984.-Vol.30.-P.2881-2888.
21. Nahar S. N., Relativistic fine structure oscillator strengths for Li-like ions: C IV - Si XII, SXIV, Ar XVI, Ca XVIII, Ti XX, Cr XXII, Ni XXVI/ Nahar S. N.//Astronomy and Astrophys.-2002.-Vol.389.-P.716-728.
22. Yerokhin V., QED treatment of electron correlation in Li-like ions/ Yerokhin V., Artemyev A., Shabaev V.M.// Phys.Rev.A.-2007.-Vol.75.-P.062501-1-062501-12.
23. Schweizer W., Model potentials for alkali metal atoms and Li-like ions/Schweizer W., Faßbinder P., Gonzalez R.//Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.-1999.-Vol.72.-P.33-55.
24. Zhi-Wen W., Calculations of the transition energies and oscillator strengths for  $\text{Cu}^{26+}$  ion/ Zhi-Wen W., Ye Li// Journ. of Atom. Mol. Sci.-2010.-Vol.1.-P.62-67.
25. Lianhua Qu, Theory of oscillator strength of the lithium isoelectronic sequence/ Lianhua Qu, Zhiwen Wang, Baiwen Li//1998 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1998.-Vol.31.-P.3601-3608; Hu M-H, Oscillator strengths for  $22S-n2P$  transitions of Li isoelectronic sequence from  $Z=11-20$ / Hu M-H, Wang Z-W//Chin.Phys.B.-2009.-Vol.18.-P.2244-2254.
26. Rafac R., Precision lifetime measurements of  $6p^2P_{1/2,3/2}$  states in atomic cesium / Rafac R., Tanner C., Livingston A., et al//Phys.Rev.A.-1994.-Vol.50.-P.R1976-

- R1979; Ali Nadeem Ali, Haq S.U., Photoionization from the  $5p\ 2P_{3/2}$  state of rubidium/ Nadeem Ali, Haq S.U.//Phys. Rev. A.-2011.-Vol.83.-P.063404 (8p.).
27. Simsarian J., Two-Photon. Spectroscopy of the Francium  $8S_{1/2}$  Level/ Simsarian J., Zhao W., Orozco L., Sprouse G.//Phys.Rev.A.-1999.-Vol.59.-P.195-202.
- 28.Piotrowicz M., Measurement of the electric dipole moments for transitions to rubidium Rydberg states via Autler-Townes splitting/ Piotrowicz M., MacCormick C., Kowalczyk A., Bergamini S., Beterov I., Yakshina E.A. // arXiv:1103.0109v2 [quant-ph] 14 Mar 2011.
- 29.Safronova U.I., Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms/ Safronova U.I., Johnson W., Derevianko A.// Phys.Rev.A.-1999.-Vol.60.-P.4476-4486.
- 30.Marinescu M., Radiative transitions and van der Waals coefficients for francium / Marinescu M., Vrinceanu D., Sadeghpour H.P. // Phys. Rev. A.-1998.-Vol.58.-R4259-4262; Marinescu M., Two-photon excitation of the  $5/2\ D$  states of rubidium/ Marinescu M., Florescu V. and Dalgarno A. //Phys.Rev.A.-1994.-Vol.49(2).-P.2714-2718.
- 31.Safronova M.S., Critically evaluated theoretical energies, lifetimes, hyperfine constants, and multipole polarizabilities in  $^{87}\text{Rb}$ / Safronova M.S., Safronova U.I.// Phys.Rev.A.-2011.-Vol.83.-P.052508; Safronova M.S., , State-insensitive bichromatic optical trapping/ Safronova M.S., , Williams C.J., Clark C.W., //Phys. Rev. A.-2004.-Vol. 69.-P. 022509 (5p.).
- 32.Zhi-Gang Feng, Lifetime measurement of ultracold caesium Rydberg states/ Zhi-Gang Feng, Lin-Jie Zhang, Jian-Ming Zhao, Chang-Yong Li and Suo-Tang Jia// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.145303 (5P.); Zhao J., Measurement of Polarizability of Cesium  $nD$  State in Magneto-Optical Trap/J.Zhao, H.Zhang, Z. Feng, X.Zhu, L.Zhang, C.Li, S.Jia//J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 034303 (7P.).
- 33.van Wijngaarden W.A., Lifetimes and polarizabilities of low lying S,P, D states of francium/ van Wijngaarden W.A., Xia J.// Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer.-1999.-Vol.61, N4.-P.557-561; Huang S., Sun Q., Calculation of the Rydberg

- Energy Levels for Francium Atom/ Huang S., Sun Q. // *Phys.Res.Internat.*-2010.-Vol.33.-P. 203497 (5P.).
- 34.Weber K. H., Accurate energies of  $nS$ ,  $nP$ ,  $nD$ ,  $nF$  and  $nG$  levels of neutral cesium/ Weber K. H., Sansonetti C. J. // *Phys.Rev.A.*-1987.-Vol. 35.-P.4650–4660.
- 35.Martin I., Quantum defect orbitals and the Dirac second-order equation/ Martin I., Karwowski J.// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-1991.-Vol.24.-P.1539-1544.
- 36.Зилитис В.А., Теоретическое определение сил осцилляторов для главных серий литиеподобных ионов/Зилитис В.А//*Опт. Спектр.*-1983-Т.55.-С.215-218
- 37.Zilitis V.A., Determination of Rydberg  $D$  and  $F$  energy levels of Cs-like ions by method of interpolation of relativistic quantum defects/Zilitis V.A.//*Opt. Spectr.*-2012.-Vol.113.-P.231-234.
- 38.Ткач Т.В., Optimized relativistic model potential method and quantum defect approximation in theory of radiative transitions in spectra of multicharged ions/Ткач Т.В.// *Photoelectronics.*- 2012.-Vol.21.-P.14-17.
- 39.Froese Fischer C., Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences/ Froese Fischer C., Tachiev G.// *Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.*-2004.-Vol.87.-P.1–184; Froese Fischer C., Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences/ Froese Fischer C., Tachiev G., Irimia A.//*Atom.Dat.Nucl.Dat.Tabl.*-2006.-Vol.92.-P.607–812.
- 40.Baldwin G.G. Approaches to the development of gamma ray lasers / Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. // *Rev.Mod.Phys.*-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742.
- 41.Гольданский В.И. О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер/ В.И. Гольданский, В.С. Летохов // *ЖЭТФ.*-1974.-Т.67,№2(8).-С. 513-516; Иванов Л.Н. Спектр электронно-ядерных гамма переходов ядра в атоме/ Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, // *ЖЭТФ.*-1987.-Т.93,№2(8).-С.396-402; Glushkov A.V. Nuclear quantum optics/ Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S // Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Acad. Sci.(ISAN), AS N4, 1991.-16P.
- 42.Glushkov A.V. DC strong - field Stark effect: New consistent quantum-mechanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//*J.Phys.B: At.Mol.Opt. Phys.*-1993.-Vol.26.-P.L379-386; Глушков А.В. Отрицательные ионы инертных газов/Глушков А.В.//*JETP Lett.*-1992.-Vol.55.-P.97-100.

43. Заславский Г. М., Минимальный хаос, стохастическая паутина и структуры с симметрией типа “квазикристалл”/ Заславский Г. М., Сагдеев Р. З., Усиков Д. А., Черников А. А. //УФН.-1988.-Т.156.-С.193-250.
44. Feigenbaum M. J., Quantitative universality for a class of non-linear transformations/Feigenbaum M. J.//J.Stat.Phys.-1978.-Vol.19.-P.25-52; Feigenbaum M. J., The metric universal properties of period doubling bifurcations and the spectrum for a route to turbulence/ Feigenbaum M. J.// Ann. New York. Acad. Sci.-1980.-Vol.357.-P.330-336.
45. Bunimovich L., Dynamical Systems, Ergodic Theory and Applications/ Bunimovich L.- Berlin: Springer, 2000-210P.; Sinai Ya.G., Ergodic Theory and Dynamical Systems/ Sinai Ya.G.-Berlin: Springer, 2010.-450P.
46. Ullmo D., Many-body physics and quantum chaos/ Ullmo D.// Rep. Prog. Phys. - 2008.-Vol.71.-P.026001 (43p); Semiconductor lasers: Stability, Instability, Chaos. Ed. Ohtsubo J.-London: Taylor and Francis.-2006.-356P.
47. Елютин П.В., Проблема квантового хаоса/ Елютин П.В.//УФН.-1988.-Т.155.-С.398-437; Штокман Х.-Ю., Квантовый хаос: Введение/ Штокман Х.-Ю.-М.: Физматлит., 2004.-376С.
48. Steiner F., Quantum chaos/Steiner F.//Festschrift Univ.Hamburg: Schlaglichter der Forschung 75,Ed.R.Ansorge//Dietrich Reimer Verlag, Hamburg.-1994.-P.543-564; Flambaum V. V., Narrow chaotic compound autoionizing states in atomic spectra/ Flambaum V. V., Gribakina A. A., Gribakin G. F.//Phys.Rev.A.-1996.-Vol.54.-P. 2066-2079.
49. Connerade J.P., Quantum chaos and many electron atoms/ Connerade J.P.//J.Phys.B: Atom.Mol.Opt .Phys.-1997.-Vol.30.-P.L31-38
50. Берман Г.П., Квантовый хаос при взаимодействии многоуровневых квантовых систем с полем когерентного излучения/ Берман Г.П., Коловский А.Р. //УФН.-1992.-Т.162.-С.95-160.
51. Рагозин Е.Н. Лазерные источники в мягкой рентгеновской области спектра/ Рагозин Е.Н., И.И. Собельман// УФН.-2005.-Т.175.-С.1139-1141.
52. Kunisz M.D., Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths/ Kunisz M.D.// Acta Phys.Pol.-1982.-Vol.A62.-P.285-296.

- 53.Иванов Л.Н. Селективная Ионизация атомов в электрическом и лазерном полях/ Л.Н. Иванов, В.С. Летохов // Квантовая Электроника.-1975.-Т.2,№3.-С.585-590
- 54.Seaton M.J., Quantum defect theory/ Seaton M.J.//Rep. Prog. Phys.-1983.-Vol.46.-P.167-258.
- 55.Feynman R.P., Quantum mechanics and path integrals/ Feynman R.P., Hibbs A.R.-N.-Y.:McGraw-Hill Co., 1965.-382P.
- 56.Ландау Л.Д. Квантовая механика/ Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. -М.: Наука, 1977.-700С.; Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М., Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.-М.: Наука, 1971.-238С.
- 57.Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода/ В.С. Лисица //УФН.-1987.-Т. 153(3).-С.379-422.
- 58.Дамбург Р.Я. Асимптотический подход к задаче Штарка/ Р.Я. Дамбург, В.В. Колосов; Рига: Зилитис,1987.-180С.; Damburg R.J. Hydrogen atom in uniform electric field/ Damburg R.J., Kolosov V.V. // J.Phys.B.: Atom.,Mol.,Opt.Phys.-1979.-V.12.-P.2637-2644.
- 59.Казанский А.И. Диабатические квазистационарные состояния и неустойчивые замкнутые траектории/ А.И.Казанский, В.Н.Островский//ЖЭТФ.-1989.-Т.95,№4.-С. 1162-1168; Турбинер А.В., Об алгебраизации теории возмущений в квантовой мехике//Письма в ЖЭТФ.-1981.-Т.33,№3.-С.15-18.
- 60.Popov V.S. Strong field Stark effect: perturbation theory and  $1/n$  expansion / Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A., Weinberg V.M. //Phys.Lett.A.-1990.-V.149,№9.-P.418-424; Popov V.S.  $1/n$  expansion for the Stark effect in Rydberg atoms/ Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.//Phys.Lett.A.-1990.-V.149.-P.425-433.
- 61.Kornev A. Rydberg spectra of atoms and positive ions in the Thomas-Fermi model / Kornev A., Zon B.//J.Phys.B:At.Mol.Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.4027-4034.
- 62.Zimmerman M. Stark and Zeemane structure of Rydberg states of alkali-metal atoms/ Zimmerman M., Littman M., Kash M., Kleppner D. // Phys.Rev.A.-1979.-V.20,№6.-P.2251-2275.
- 63.Brändas E. Pade approximants to Stark effect energies for excited states of hydrogen/ Brändas E., Floelich P., //Phys. Rev.A.-1977.-Vol.16.-P.2207-2216; Hehenberger M. Weil's theory applied to the Stark effect in the hydrogen atom/

- Hehenberger M., McIntosh H.V., Brändas E. //Phys.Rev.-1974.-V.10.-P.1494-1506.
- 64.Silverstone H. Stark effect in hydrogen: Dispersion relations, asymptotic formulas and calculation of the ionization rate via high-order perturbation theory/ Silverstone H., Adams B., Cizek J., Otto P.// Phys.Rev. Lett.-1979.-Vol.43,N20.-P.1498-1501.
- 65.Анохин С.Б., Иванов М.В., Атом водорода и лития в сильном электрическом поле/ С.Б.Анохин, М.В.Иванов//Опт.Спектр.-1984.-Т.59.-С.499-502; Ivanov M.V., Grid calculation of energies and widths for ground state of H molecule in strong electric field/ Ivanov M.V. // Opt.Spectr.-1994.-V.78(5).-P.711-713.
- 66.Глушков А.В. Последовательный квантово-механический подход в задаче об эффекте Штарка в сильном поле: Операторная форма теории возмущений. Атомы H, Li, Tm в электрическом поле/ А.В.Глушков, Л.Н.Иванов // Матер.III Семина по Атомной Спектроскопии. - Черногоровка, 1992.-Р.III-3.-P.21.
- 67.Glushkov A.V. DC Strong Field Stark effect: consistent quantum mechanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//Preprint N92-1-AS.-Institute of Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-13p.; Glushkov A.V. A broadening of the thulium atom autoionization resonances in a weak electric field/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// Preprint N92-2-AS.- Institute of Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-6p.
- 68.Глушков А.В. Атомы и двухатомные молекулы во внешних эффективных полях N-компонентных материалов / Александр Васильевич Глушков // Моделирование на ЭВМ элементарных атомных процессов.- Киев, 1992.-С.121-124.
- 69.Filho O. Different approaches to Stark effect: Application to H ground state/Filho O, Fonseca A.,Nazareno H.,Guimaraes P.//Phys.Rev.A-1990.-Vol.42.-P.4008-4014.
- 70.Stambulchik E. Stark effect of high- $n$  hydrogen-like transitions: quasi-continuous approximation/ Stambulchik E., Maron I.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2008-Vol.41-P.095703 (9p).
- 71.Meng H-Y. Theoretical complex Stark energies of lithium by a complex scaling plus the B-spline approach/ Meng H-Y., Zhang Y-X., Kang S., Shi T-Y., Zhan M-S // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.155003 (12p).



- 72.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.
- 73.Harmin D.A. Theory of the non-hydrogenic Stark Effect/ Harmin D.A.// Phys.Rev.Lett.-1982.-Vol.49,N2.-P.128-131.
- 74.Glushkov A.V. Chaos and regular dynamics of complex atomic systems in magnetic field/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V.// Journ. of Techn. Phys.-1996.-Vol.37, N3-4.- P.347-348.
- 75.Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L., Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the  $\beta$ -Decay parameters// Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. Piecuch P., Maruani J., Delgado-Barrio G., Wilson S. (Berlin, Springer).-2009.-Vol. 20.-P. 125-172.
- 76.Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Consistent Quantum Approach/ Glushkov A.V.,Malinovskaya S.V., Ambrosov S.V.// Journ. of Techn. Phys.-1997.-Vol.38,N2.-P.215-218.
- 77.Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Non-linear Effects. Autoionization Resonances in Tm/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Shpinareva I.M.// Journ.of Techn.Phys.-1997.-Vol.38, N2.- P.211-214.
- 78.Glushkov A.V., QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A. // Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer).-2008.-Vol.18.-P. 201-220.
- 79.Глушков А.В. Расчет характеристик радиационных линий много фотонного поглощения и излучения при взаимодействии атома с импульсом лазерного излучения/ А.В. Глушков, А.В. Лобода, // Журн. Прикл. Спектр.-2007.-Т.74,№2.-С.271-274.
- 80.Dunning F.B. Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields/ Dunning F.B., Mestayer J.J., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdorfer J.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.022001.-22p.

81. Grutter M. Spectroscopic study and multichannel quantum defect theory analysis of the Stark effect in Rydberg states of neon/ Grutter M., Zehnder O., Softley T.P., Merkt F.// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2008.-Vol.41.-P.115001.-11p.
82. Kohn W., Sham L., Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas//*Phys. Rev.A.*-1965.-Vol.137.-P.1697-1710; Green A.E.S., Analytic independent particle model for atoms/ Green A.E.S., Sellin D.L., Eachor A.S.//*Phys.Rev.A.*-1969.-Vol.184,N1.-P.1-9.
83. Glushkov A.V., New laser-electron nuclear effects in the nuclear  $\gamma$  transition spectra in atomic and molecular systems/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer)*.-2008.-Vol.18.-P. 221-234.
84. Глушков А.В. Новый метод расчета спектра, энергии связи отрицательных молекулярных ионов//*Опт.Спектр.*-1992.-Т.72.,N1.-С.55-61; Глушков А.В. Новый подход в теоретическом определении потенциалов ионизации молекул на основе метода функций Грина// *Журн. Физ. химии.*-1992.-Т.66,N10.-С.2671-2677.
85. Glushkov A.V. QED Theory of Radiation Emission and Absorption Lines for Atoms and Atomic Ensembles in a Strong Laser Field/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E., Svinarenko A.// *Physica Scripta.*-2009.- Vol.134.-P.305001 (6p).
86. Khetselius O.Yu. Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products/ Khetselius O.Yu. // *Physica Scripta.*-2009.-Vol.134.-P. 305090-1-7.
87. Gutzwiller M. Chaos in Classical and Quantum Mechanics/ Gutzwiller M.-N.-Y.:Springer-Verlag, 1990.-720p.
88. Kleppner D. Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos/ Kleppner D., Chun-Ho I., Welch G.R. - Ed. J.C.Gay, N-Y.: Kluwer, 1990.-P.21-48.; Kleppner D., Stark structure of Rydberg states of alkali-metal atoms/Kleppner D., Myron L., Zimmerman M., Littman M.G., Kash M.//*Phys.Rev.A.*-1977.-Vol.20.-P.2251-2274.
89. Ott E. Chaos in dynamical systems/ Ott E.; Cambridge: Cambridge Univ. Press,

- 2002.- 490p.; Wiggins S. Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos/ Wiggins S.; New York: Springer-Verlag, 1997.-688 p.
90. Gottwald G.A. A new test for chaos in deterministic systems / G.A. Gottwald, I. Melbourne/ Gottwald G.A. // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. – 2004. – Vol. 460. – P. 603-611.
91. Lorenz E.N. Deterministic nonperiodic flow // J. Atmos. Sci. – 1963. – Vol. 20. – P. 130-141.
92. Letellier C. Analysis of the dynamics of a realistic ecological model/ Letellier C., Aziz-Alaoui M.A. // Chaos, Solitons & Fractals.-2002.-V.13, №1.-P.95-107; Sprott J.C. Coexistence and chaos in complex ecologies / Sprott J.C., Vano J.A., Wildenberg J.C., Anderson M.B., Noel J.K. // Phys. Lett. A.-2005.-V.335, № 2-3.- P.207-212.
93. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods/ Schreiber T. // Phys. Rep.-1999. V.308,№1.-P.1-64; Packard N.H. Geometry from a time series / N.H. Packard, J.P. Crutchfield, J.D. Farmer, R.S. Shaw // Phys. Rev. Lett. – 1980. – Vol. 45. – P. 712-716.
94. Fraser A.M. Independent coordinates for strange attractors from mutual information / A.M. Fraser, H.L. Swinney // Phys. Rev. A. – 1986. – Vol. 33. – P. 1134-1140.
95. Глушков А.В. Томас-Фермиевская модель многочастичного осциллятора/ Глушков А.В.// Изв.вузов. Сер.Физика.- 1992.- N7.-С.41-47; Kornev A., Rydberg spectra of atoms and positive ions in Thomas–Fermi model/ Kornev A., Zon V.A.// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.4027-4034.
96. Зельдович Я.Б. Квазиэнергия квантово-механической системы в периодическом поле/Я.Б. Зельдович //ЖЭТФ.-1967.-Т.26.-С.1006-1018.
97. Преображенский М. Квазистационарные состояния атома водорода в поле сильной монохроматической волны/ Преображенский М., Рапопорт Л.//ЖЭТФ-1990.-Т.78-С.929-935.
98. Семенов В., Расчет вероятностей ионизации атома водорода линейно-поляризованной волной методом комплексных координат/В. Семенов//Опт. Спектр.-1983.-Т.54.-С.36-42.
99. Dupret K. Resonances in the Diamagnetic Rydberg Spectrum: Order and Chaos/ Dupret K., Zakrzewski J., Delande D.// Europhys.Lett.-1995.-V.31(5).-P.251-256.

100. Dando P.A. Atoms in Static Fields: Chaos or Diffraction/ Dando P.A., Monteiro T.S.// In: Photonic, Electronic, Atomic Collisions, Eds.W.Aumyr, H.Winter.-World Sci. Pub.,Singapore.- 1997.-P.621-630
101. Gasati G. Classical Stabilization of periodically kicked hydrogen atoms/ Gasati G., Guarneri I., Mantica G. // Phys.Rev.A.-1994.-V.50(6).-P.5018-5024; Casati G., Localization of chaotic diffusion for hydrogen atom in microwave fields/ Casati G., Bayfield J.E., Guarneri I., Sokol D.W.//Phys.Rev.Lett.-1989.-Vol.63.-P.364-368.
102. Casati G., Rydberg Stabilization of atoms in strong fields: “magic” mountain in chaotic sea/ Casati G., Benvenuto F., Shepelyansky D.L.// Z.Phys.B.-1994.-V.94.-P.481-486; Casati G., 100-photon microwave ionization of Rydberg atoms in a static electric field/ Casati G., Benvenuto F., Shepelyansky D.L.// Phys.Rev.-1998.-V.57,N3.-P.1977-1986; Casati G., Chaotic enhancement in microwave ionization of Rydberg atoms/ Casati G., Benvenuto F., Shepelyansky D.L.// Eur. Phys. J. D.-1999.-V.5.-P.311-326.
103. Matrasulov D.U. Stochastic ionization of relativistic hydrogen-like atom/ Matrasulov D.U.// arXiv:chao-dyn/9801023v1 15 Jan 1998; Матрасулов Д. У. Стохастическая ионизация релятивистского водородоподобного атома / Д. У. Матрасулов // ЖТФ. – 1999. – Т. 69, вып. 2. – С. 127–129.
104. Cheng T. Rydberg atoms in parallel microwave and magnetic fields- classical dynamics/ Cheng T., Liu J., Chen S., Guo H. // Phys.Lett.A.-2000.-V.265.-P. 384-390.
105. Wang D. Influence of oscillating electric field on the recurrence spectra of a Li Rydberg atom in strong magnetic field/ Wang D., Din S., Liu S.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2003.-V.36.-P.4225-4232.
106. Hegerfeldt G.C. Level statistics for continuous energy spectra with application to H atom in crossed electric and magnetic field/ Hegerfeldt G.C.,Henneberg R.// Phys.Rev.A.-1994.-Vol.49.-P.3531-3540.
107. Fielding H. Rydberg-electron wave-packet dynamics in electromagnetic fields and evidence for stabilization/ Fielding H., Wals.J., van der Zande W., van den Heuvel H.//Phys.Rev.A-1995-Vol.51.-P.611-618.
108. Rao J. Quantum manifestations of scattering orbits in scaled spectrum of non-hydrogenic atom in crossed fields/ Rao J., Delande D.,Taylor K.//

- J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2002.-V.35.-P.L1-10; Kaulakys B., Scaling relations for the hydrogen atom in a harmonic field: classical chaos and quantum suppression of diffusion/Kaulakys B., Gontis V., HermannG., Scharmann A.//Phys.Lett.-1991.-Vol.159.-P.261-265.
109. Buchleitner A. Secular motion of the three-dimensional Rydberg states in a microwave field/ Buchleitner A., Delande D.//Phys.Rev.A.-1997.-Vol.55.-P.1585-1598.
110. Krug A. Residual symmetries in the spectrum of periodically driven alkali Rydberg states/ Krug A., Buchleitner A. // Europhys.Lett.-2000.-Vol.49.-P.176-180; Chaotic Ionization of non-hydrogenic alkali Rydberg states// Phys. Rev. Lett. -2001.-Vol.86.-P.3538-3541.
111. Krug A. Microwave ionization alkali-metal Rydberg states in a realistic numerical experiment/ Krug A., Buchleitner A.//Phys. Rev. A.-2002.-Vol.66.-P.053416 (10p.).
112. Koch P.M. Observation of resonances in microwave-stimulated Multiphoton excitation and ionization of highly excited hydrogen atoms/ Koch P.M., Bayfield J.E., Gardner L.D.//Phys.Rev.Lett. 1977.-Vol.39.-P.76-80.
113. Koch P.M. The importance of resonances in microwave ionization of excited atoms/ Koch P.M., van Leeuwen K.A.H.//Phys.Rep.-1996.-Vol.255.-P.289-364.
114. Gallagher T. F. Ionization of sodium and lithium Rydberg atoms by 10-MHz to 15-GHz electric fields/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Dexter J. L., Pillet P.// Phys. Rev. A.-1991.- Vol.44.-P. 1859-1872.
115. Gallagher T. F. Classical subharmonic resonances in microwave ionization of lithium Rydberg atoms/ Gallagher T. F., Noel M. W., Griffith M. W. // Phys. Rev. A.-2000.-Vol.62.-P.063401-063412.
116. Gallagher T. F. Microwave ionization of hydrogenlike Li and Na/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Pillet P., Fu P., Newman J.B.// Phys. Rev. A.-1989.-Vol.39.-P.4545-4554.
117. Gallagher T. F. Microwave ionization of Rydberg states of the barium ion/ Gallagher T. F., Seng M., Eichmann U., Lange V., Sandner W.//Eur.Phys.J.D.-1998.-Vol.3.-P.21-26.

118. Walther H. From coherent to noise-induced microwave ionization of Rydberg atoms/ Walther H., Benson O., Buchleitner A., Raithel G., Arndt M., Mantegna R.//Phys.Rev.A-1995.-Vol.51.-P.4862-4876.
119. Arndt M., Experimental study of quantum and classical limits in microwave ionization of rubidium Rydberg atoms/ Arndt M., Buchleitner A., Mantegna R., Walther H. //Phys. Rev. Lett.-1991.-Vol.67.-P.2435-2442.
120. Glushkov A.V., Physics of the laser-photoionization atomic processes in the isotopes and gases separator devices: new optimal schemes/ Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P., Ambrosov S.V., Bakunina E.V., Loboda A.V.//Sensors Electronics and Microsystems Techn.-2011.-Vol.2(8),N1.-P.27-35.
121. Ambrosov S., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Wannier-Mott exciton and H, Rb atom in DC electric field: Stark effect// Photoelectronics.-2008.-N17.-P.84-87
122. Ignatenko A.V., Microwave ionization of lithium rydberg atoms and Wannier-Mott exciton: Regular and stochastic features// Photoelectronics.-2006 .-N15.-P.108-111.
123. Glushkov A.V., Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum/ Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V. // Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine).-2008.-N4.-P.5-11.
124. Svinarenko A.A., Spectroscopy of autoionization states in spectra of helium, barium and lead atoms: New spectral data and chaos effect / Svinarenko A.A.// Photoelectronics.-2013.-Vol.22.-P.31-36; Svinarenko A.A., Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas/Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Tkach T.B.//Physica Scripta (IOP, London, UK).-2013.- Vol.T153-P.01437 (5p.).
125. Khetselius O.Yu., Relativistic Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure Parameters for Some Heavy-Element Isotopes/ Khetselius O.Yu.// Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109.- N14.-P. 3330-3335.
126. Glushkov A.V. Quantum stochastic modelling energy transfer and effect of rotational and v-t relaxation on multi-photon excitation and dissociation for  $CF_3Br$  molecules/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Shpinareva I.M., Kozlovskaya V.P., Gura V.I.// Int. Journ.Quant.Chem.-2005.-Vol.104, N4 .-P. 512-516.

127. Glushkov A.V., Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A.// *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry*, Eds. P.Hoggan, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2011.-Vol.22.-P.51-70; Glushkov A.V. Sensing the capture of negative muon by atoms: Energy approach/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Loboda A.V.// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2006.-N3.-P.21-26.
128. Glushkov A.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.
129. Seaton M.J. Quantum defect theory/ Seaton M.J.// *Rep.Prog.Phys.*-1983.-Vol.46.-P.167-195.
130. Ho Y-K., The method of complex coordinate rotations and its application to atomic collision processes//*Phys.Rep.*-1983.-Vol.99.-P.3-84.
131. 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; Иванов Л.Н. Метод штурмовских орбиталей в расчетах физических характеристик излучения атомов/ Иванов Л.Н., Иванова Е.П.// *ЖЭТФ.*-1996.-Т.110.-С.483-498.
132. 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.
133. Desclaux J.P., Multiconfiguration relativistic Dirac-Fock program//*Comp. Phys. Commun.*-1975.-Vol.9,N1.-P.31-45; Fuentealba P., Stoll H. On the reliability of semiempirical pseudopotentials: simulation of Hartree-Fock and Dirac-Fock methods// *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.*-1983.-Vol.16, N2.- P.L323-328.

134. Dietz K., Heß B.A. Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics// *Phys.Scripta.*-1989.-Vol.39.-P.682-688.
135. Krainov V.P., Dynamic chaos in the tunnelling ionization produced by a strong low-frequency electromagnetic field/ Krainov V.P.// *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2014.-Vol.47.-P.204005 (5p.); Delande D., Buchleitner A., Classical and quantum chaos in atomic systems///*Adv. in atomic, molecular, and optical physics.*-1994.-Vol. 34.-P. 85-123
136. Gottwald G.A., Melbourne I. A new test for chaos in deterministic systems // *Proc. Roy. Soc. London. Ser.A: Math.-Phys.Sci.*–2004.–Vol. 460. – P. 603-611.
137. Gottwald G.A., Melbourne I. Testing for chaos in deterministic systems with noise // *Physica D.* – 2005. – Vol. 212. – P. 100-110.
138. Sauer T., Yorke J.A., Casdagli M. Embedology // *J. Stat. Phys.* – 1991. – Vol. 65. – P. 579-616.
139. Packard N.H., Crutchfield J.P., Farmer J.D., Shaw R.S. Geometry from a time series // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45. – P. 712-716.
140. Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J., Tsimring L.Sh. The analysis of observed chaotic data in physical systems // *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 1331-1392.
141. Mañé R. On the dimensions of the compact invariant sets of certain non-linear maps // *Dynamical systems and turbulence, Warwick 1980. Lecture Notes in Mathematics No. 898 / D.A. Rand, L.S. Young (Eds.).* – Berlin: Springer, 1981. – P. 230-242.
142. Takens F. Detecting strange attractors in turbulence // *Dynamical systems and turbulence, Warwick 1980. Lecture Notes in Mathematics No. 898 / D.A. Rand, L.S. Young (Eds.).* – Berlin: Springer, 1981. – P. 366-381.
143. Gallager R.G. *Information theory and reliable communication* – NY: Wiley, 1968. – 608 p.
144. Fraser A.M., Swinney H.L. Independent coordinates for strange attractors from mutual information // *Phys. Rev. A.* – 1986. – Vol. 33. – P. 1134-1140.
145. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods // *Phys. Rep.* – 1999. – Vol. 308. – P. 1-64.
146. Grassberger P, Procaccia I. Measuring the strangeness of strange attractors //



- Physica D.–1983.–Vol.9.–P.189-208; Grassberger P., Characterization of strange attractors/ Grassberger P., Procaccia I. // Phys.Rev.Lett.–1983.–Vol.50.–P.346-349.
147. Osborne A.R., Provenzale A. Finite correlation dimension for stochastic systems with power-law spectra // Physica D. – 1989. – Vol. 35. – P. 357-381.
148. Havstad J.W., Ehlers C.L. Attractor dimension of nonstationary dynamical systems from small data sets // Phys. Rev. A. – 1989. – Vol. 39. – P. 845-853.
149. Kennel M.B., Brown R., Abarbanel H.D.I. Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction // Phys. Rev. A. – 1992. – Vol. 45. – P. 3403-3411.
150. Песин Я.Б. Характеристические показатели Ляпунова и гладкая эргодическая теория // Успехи математических наук. – 1977. – Т. 32. – С. 55-112.
151. Kaplan J.L., Yorke J.A. Chaotic behavior of multidimensional difference equations // Functional differential equations and approximations of fixed points. Lecture Notes in Mathematics No. 730 / H.-O. Peitgen, H.-O. Walter (Eds.). – Berlin: Springer, 1979. – P. 204-227.
152. Оселедец В.И. Мультипликативная эргодическая теорема. Характеристические показатели Ляпунова динамических систем // Труды Московского математического общества. – 1968. – Т. 19. – С. 179-210.
153. Sano M., Sawada Y. Measurement of the Lyapunov spectrum from a chaotic time series // Phys. Rev. Lett. – 1985. – Vol. 55. – P. 1082-1085.
154. Rissanen J. Stochastic complexity in statistical inquiry. – Singapore: World Scientific, 1989. – 177 p.
155. Kuguimtzis D., Lingjaerde O.C., Christophersen N. Regularized local linear prediction of chaotic time series // Physica D. – 1998. – Vol. 112. – P. 344-360.
156. Sugihara G., May R. Nonlinear forecasting as a way of distinguishing chaos from measurements error in time series // Nature.–1990.–Vol. 344.– P. 734-741.
157. Friedman J.H. Multivariate adaptive regression splines (with discussion) // Annals of Statistics. – 1991. – Vol. 19. – P. 1-141.
158. Smith L.A. Identification and prediction of low-dimensional dynamics // Physica D. – 1992. – Vol. 58. – P. 50-76.
159. Elsner J.B., Tsonis A.A. Nonlinear prediction, chaos and noise // Bull. Amer. Meteorol. Soc. – 1992. – Vol. 73. – P. 49-60.
160. Goldberg D.E. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learn-

- ing – Reading: Addison-Wesley, 1989. – 412 p.
161. Андриевский Б. Р., Фрадков А. Л. Управление хаосом. Методы и приложения. Часть II. Приложения/ Андриевский Б. Р., Фрадков А. Л. // Автоматика и телемеханика. – 2004. – № 4. – С. 3–34.
162. Безручко Б. П., Построение модельных отображений по хаотическим временным рядам. Уч.-мет. пособие / Б. П. Безручко, Д. А. Смирнов. – Саратов: Изд-во ГосУНЦ “Колледж”, 2000. – С. 39
163. Васюта К. С. Застосування технології формування сурогатних сигналів для статистичного усереднення флуктуацій параметрів хаотичних сигналів під час їхньої обробки / К. С. Васюта, Ф. Ф. Зоц // Прикладна радіоелектроніка: наук.-техн. журнал. – 2013. – Том 12. – № 4. – С. 559–563.
164. Меклер А. А. Применение аппарата нелинейного анализа динамических систем для обработки сигналов ЭЭГ/ А. А. Меклер // Актуальные проблемы современной математики: учёные записки. Т. 13 (вып. 2) / ред. проф. Калашникова Е. В., изд. ЛГУ им. А. С. Пушкина, С.-Пб. – 2004. – С. 112–140.
165. Астафьева Н.М. Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения/ Астафьева Н.М. //УФН. - 1996. - Т.166. - № 11. - С. 1145-1170.
166. Глушков А.В., Кинетика энергообмена в молекулах  $CF_3Br$  в среде буферного газа под действием интенсивного лазерного излучения/ Глушков А.В., Зеленцова Т.Н., Шпинарева И.М., Свиначенко А.А. //Физика Аэродисперсных Систем.-2002.-№39.-С.129-136.
167. Дыхне А.М. Внезапные возмущения и квантовая эволюция/ А.М. Дыхне, Г.Л. Юдин. - М.: Наука, 1996.-380С.
168. Берка Ф. Атомы в астрофизике/ Под ред. Ф.Берка, И. Эйснера, Д. Хаммера И. Персиваль.- М.: Мир.-1986.-340С.
169. Gell-Mann M., Bound states in quantum field theory/ Gell-Mann M., Low F.//Phys.Rev.-1951.-Vol.84.-P.350-356.
170. Браун М.А., Релятивистская теория тяжелого атома/ Браун М.А., Дмитриев Ю.Ю., Лабзовский Л.Н.//ЖЭТФ.-1969.-Т.57, №6.-С.2189-2198; Браун М.А., Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И. Релятивистская теория атома/ М.А. Браун, А.Д. Гурчумелия, У.И. Сафронова.-М.: Наука, 1984.- 268С.
171. Окс Е.А. Спектроскопия плазмы с квазимонохроматическими электрическими полями/ Е.А. Окс. - М.:Энергоатомиздат.-1990.-240С.

172. Делоне Н.Б. Атом в сильном световом поле/ Н.Б.Делоне, В.П. Крайнов;- М.: Атомиздат., 1994.-370С.
173. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/ В.С. Летохов.-М.:Наука.-1993.-408С.
174. Радциг А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике/А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.- М.: Энергоиздат, 1986.-240С.
175. NIST atomic spectra database (version 3.1.3; 2009), <http://physics.nist.gov/asd3>. Corlis C. Energy levels of iron/ Corlis C., Sugar J.//J.Phys.Ch.Ref.Dat.-1982.-Vol.11.-P. 135-241.
176. Ланцош К. Практические вопросы прикладного анализа/ К. Ланцош.-М: Физматг., 1961.
177. Botham C. Relativistic effects in atoms and molecules/ Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G.-Vancouver: Elsevier,2001.- 645p.
178. Buchanov V.V. Laser separation of Silicon Isotopes by the AVLIS Technology/ Buchanov V.V., Kazaryan M.A., Kalugin M.M., Prokhorov A.M.// Atomic and Molecular Pulsed Lasers.-Tomsk: SO RAN, 2001.-P.72.
179. Glushkov A.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // Europ.Phys.Journ. ST.-2008.-Vol.160.-P.195-204.
180. Glushkov A.V. Spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear effects in multiatomic molecules/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V.// Molec. Physics (UK).-2008.-Vol.106.-N9,10.-P.1257-1260.
181. Plummer M. Non-hermitian dynamics of argon atoms at 248 nm/ Plummer M., Noble C.J.// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.L219-L226.
182. Staudt A. Stabilization of He in intense high-frequency laser pulses beyond dipole approximation/ Staudt A., Keitel C.H.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2003.-Vol.36-P.L203-209.
183. Hasbani R. Resonant and non-resonant ionization of He by XUV short intense pulses/ Hasbani R., Cormier E., Bachau H.//J.Phys.B.At.Mol.Phys.-2000.-Vol.33.-P.2101-2116.

184. Bucksbaum P.H. Resonant double-excitation induced by wiggling ATI electrons/ Bucksbaum P.H., Sanpera A., Lewenstein M. // J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.-1997-Vol.30.-P.L.843-850.
185. Laughlin C. Model potential method/ Laughlin C., Victor G.A. //Adv. Atom. Mol. Phys.-1988- Vol.25.- P.163-194.
186. Guimaraes M.N. A study of the confined hydrogen atom using the finite element method/ Guimaraes M.N., Prudente F.V.//J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.-2005.-Vol.38.-P.2811-2825.
187. 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.
188. Mercouris T. Solution of the many-electron many-photon problem for strong fields: Application to  $\text{Li}^-$  in one and two-colour laser fields/ Mercouris T., Nikolaides C.A.//Phys.Rev.A.-2003.-Vol.67.-P.063403-1-063403-12.
189. Kamta G.L. Elucidating the mechanisms of double ionization using intense half-cycle, single-cycle and double-half-cycle pulses/ Kamta G.L., Starace A.F.// Phys.Rev.A.-2003.-Vol.68.-P.043413-1-043413-11.
190. Заславский Г.М., Слабый хаос и квазирегулярные структуры / Заславский Г.М., Сагдеев Р.З., Усиков Д.А., Черников А.А. – М.: Наука, 1991. – 240 с.
191. Безручко Б.П., Построение модельных отображений по хаотическим временным рядам/ Безручко Б.П., Смирнов Д.А. – Саратов: Издательство ГосУНЦ “Колледж”, 2000 – 39С.
192. Кузнецов С.П., Динамический хаос и однородно гиперболические аттракторы/ Кузнецов С.П.// УФН.-2011.-Т.181.-С.121-142; Кузнецов С.П., Динамический хаос/ Кузнецов С.П.- Саратов: СУ.-2004.-170С.
193. Кузнецов А.П., Кузнецов С.П., Рыскин Н.Н., Исаева О.Б., Нелинейность: от колебаний к хаосу.-М-Ижевск: НИЦ РХД.-2006.-184С.
194. Кроновер Р.М. Фракталы и хаос в динамических системах: Пер. с англ. – М.: Постмаркет, 2000. – 352С.
195. Glushkov A.V., Atmospheric teleconnection patterns: Wavelet analysis/ Glushkov A.V., Khokhlov V.N., Tsenenko I.A.// Nonlinear Proc. in Geophys.-2004.-Vol.11(3).-P.285-293.

196. Безручко Б.П. , Моделирование и диагностика взаимодействия нелинейных колебательных систем по хаотическим временным рядам (приложения в нейрофизиологии)/ Безручко Б.П. , Пономаренко В.И. , Прохоров М.Д. , Смирнов Д.А. , Тасс П.А.// УФН.-2008.-Т.178.-С.323-328.
197. Дыхне А.М., Устойчивость и хаос в двумерных случайно-неоднородных средах и LC цепочках/ Дыхне А.М., Снарский А.А., Женировский М.И.// УФН.-2004.-Т.174,№8.-С.887-894.
198. Глушков А.В., Лобода А.В., Свиначенко А.А. Теория нейросетевых систем на основе фотонного эха и их программная реализация. – Одесса: ТЭС, 2003. – 195С.
199. Глушков А.В., Бунякова Ю.Я. Анализ и прогноз влияния антропогенных факторов на воздушный бассейн промышленного города.- Одесса: Экология, 2010.- 256С.
200. Глушков А.В., Хецелиус О.Ю., Свиначенко А.А., Лобода А.В., Обчислювальні методи динаміки суцільних середовищ.-Одесса: Екологія, 2008.-175С.
201. Вальтер Г., Одноатомный мазер и другие эксперименты квантовой электродинамики резонатора/Вальтер Г.//УФН. -1996.-Т.166.-С.777-793.
202. Wellens T., Stochastic resonance in a fundamental quantum system/ Wellens T., Buchleitner A. //J. Phys. A: Math. Gen.-1999.Vol.32.-P.2895–2919.
203. Бетеров И. М., Лернер П. Б., Спонтанное и вынужденное излучение ридберговского атома в резонаторе / Бетеров И. М., Лернер П. Б. //УФН. -1989.-Т.139.-С.665-684.
204. Vedenov A.A., Non-linear systems with memory and functions of neuron ensembles/ Vedenov A.A., Ezhov A.A., Levchenko E.B.//Non-linear waves. Structure and bi-furcations Eds Gaponov-Grekhov A.V., Rabinovich M.I..-M: Nauka.-1987.-P.56-72.
205. Владимиров А. Г., Режим динамического хаоса в генерации лазера с поглощающей ячейкой/ Владимиров А. Г., Фрадкин Э. Е.//Опт.Спектр.-1989.-Т.67.-С.219-224.
206. Вудс С., Волоконные лазеры средней мощности и их применение/ Вудс С., Дака М., Флин Г. //Фотоника.-2008.-№ 4.-С.6-10.

207. Fischer I., High-dimensional chaotic dynamics of an external cavity semiconductor laser/Fischer I., Hess O., Elsaber W., Gobel E.//Phys.Rev.Lett.-1994.-Vol.73.-P.2188-2192.
208. Aymar M., Three-step laser spectroscopy and multichannel quantum defect analysis of odd-parity Rydberg states of neutral ytterbium/Aymar M., Champeau R., Delsart C., Robaux O.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1984.-Vol.17.-P.3645-3658.
209. Vidolova-Angelova E.,Relativistic perturbation method for studying radiation decay of highly-excited manyelectron atoms: Tm/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L, Ivanova E., Angelov D.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1986.-Vol.19.-P.2053-2069.
210. Vidolova-Angelova E. Autoionization decay of excited Rydberg Tm states/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., Angelov D.A.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1988.-Vol.21.-P.3877-3890; 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.
211. Беков Г.И. Лазерная спектроскопия узких двукратно возбужденных автоионизационных состояний атома иттербия/ Г.И. Беков, Е. Видолова-Ангелова, Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, В. Мишин// ЖЭТФ.- 1981.-Т.80,№3.-С.866-878.
212. Видолова-Ангелова Е.П. Узкие низколежащие состояния отрицательного иона Yb/ Е.П. Видолова-Ангелова, Е.П. Иванова, Л.Н. Иванов// Опт. Спектр.-1983.-Т.54,№4.- С.590-596; Видолова-Ангелова Е.П. Энергии и ширины автоионизационных состояний атома Yb / Е.П. Видолова-Ангелова, Е.П. Иванова, Л.Н. Иванов // Опт. Спектр.-1981.-Т.5.-С.243-248.
213. Glushkov A.V. Calculation of the spectroscopic characteristics of complex atoms and ions in electric field; the Thulium/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V. // Bound Volume of Paris-Meudon Observatory (Paris, France).-1996.-P.139-140.
214. Glushkov A.V. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Chernyakova Yu. G., Svinarenko A.V., Khetselius O.Yu.// Nucl. Phys.A.-2004.-Vol. 734.-Pe21-25.

215. Indelicato P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method/ Indelicato P., Desclaux J.P. // *Phys.Scripta.*-1993.-Vol.46.-P.110-115.
216. Karaçoban B., Energies, Landé Factors, and Lifetimes for Some Excited Levels of Neutral Ytterbium ( $Z = 70$ )/ Karaçoban B., Özdem L.//*Acta Phys.Polonica.A.*-2011.-Vol.119.-P.342-353.
217. Jong-hoon Yi, Autoionizing states of the ytterbium atom by three-photon polarization spectroscopy/ Jong-hoon Yi, Lee J., Kong H.J.//*Phys. Rev. A.*-1995.-Vol.51.-P.3053–3057.
218. Jong-hoon Yi, Investigation of even parity autoionizing states of ytterbium atom by two-photon ionization spectroscopy/ Jong-hoon Yi, Park H., Lee J.//*J.of Korean Phys.Soc.*-2001.-Vol.39.-P.916-920.
219. Glushkov A.V., Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanides atoms/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A.//*Physica Scripta (IOP, London).*-2013.-Vol.T153-P.01429
220. 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 Theor. Chem. and Phys.*, Eds. M.Nascimento, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer).-2015-Vol.29.-Ch.12.-P.197-218.
221. Shevchuk V.G., Atom of hydrogen in electric field: Modified Operator Perturbation theory/ Shevchuk V.G., Prepelitsa G.P., Shumlyansky I.I., Ignatenko V.M.// *Uzhgorod Univ.Scientific Herald.Ser.Phys.-Math.*-2001.-Vol.8.-P.331-335.
222. Vaschenko V.N., Non-linear chaotic treating vibrational motion for molecules in the multi-photon photoexcitation regime/Vaschenko V.N., Mikhailenko V.I., Ambrosov S., Loboda A.V.,Ponomarenko E.L.//*Photoelectronics.*-2014.-N23.-P.81-85.
223. Malakhov A.V., Stochastic dynamics of the laser field rotational excitation for molecules / Malakhov A.V., Korchevsky D.A., Ignatenko A.V., Ponomarenko E.L., Shpinareva I.M. // *Photoelectronics.*-2014.-N23.-P.86-90.
224. Glushkov A.V. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum/ Glushkov A.V.,

- Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V. // *Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine)*.-2008.-N4.-P.5-11.
225. Glushkov A.V. DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A. // *Int. Journ. Quantum Chem.*-2004.-Vol.99,N5.-P.936-940.
226. Glushkov A.V. Atmospheric teleconnection patterns and eddy kinetic energy content: wavelet analysis/ Glushkov A.V., Khokhlov V.N., Tsenenko I.A.// *Non-linear Processes in Geophysics*.-2004.-V.11,N3.-P.285-293.
227. Glushkov A.V. Using non-decimated wavelet decomposition to analyse time variations of North Atlantic Oscillation, eddy kinetic energy, and Ukrainian precipitation/ Glushkov A.V., Loboda N.S., Khokhlov V.N., Lovett L.// *Journal of Hydrology (Amsterdam, Elsevier)*.-2006. – Vol. 322. – No. 1-4. – P. 14-24
228. Glushkov A.V. Using meteorological data for reconstruction of annual runoff series over an ungauged area: Empirical orthogonal functions approach/ Glushkov A.V., Loboda N.S., Khokhlov V.N. // *Atmospheric Research (Amsterdam, Elsevier)*.-2005. – Vol. 77. – No. 1-4 – P. 100-113.
229. Glushkov A.V. Signatures of low-dimensional chaos in hourly water level measurements at coastal site of Mariupol, Ukraine/ Glushkov A.V., Khokhlov V., Loboda N.S., Serbov N.G., Zhurbenko K.// *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment (Berlin, Springer)*. – 2008. – Vol. 22. – No. 6. – P. 777-787.
230. Glushkov A.V. Short-range forecast of atmospheric pollutants using non-linear prediction method/ Glushkov A.V., Khokhlov V., Loboda N.S., Bunyakova Y.// *Atm. Environment (Amsterdam,Elsevier)*.-2008.-Vol.42.-N31-P.7284-7292.
231. Glushkov A.V., Studying interaction dynamics of the non-linear vibrational systems within non-linear prediction method (application to quantum autogenerators)/ Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A., Zaichko P.A, // *Dynamical Systems Theory Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J, Mrozowski (Lodz, Polland)*.-2013.-Vol.T1.-P.467-477.
232. Prepelitsa G.P., Modeling of interaction of the non-linear vibrational systems on the basis of temporal series analyses (application to semiconductor quantum generators)/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuzakon V.M.,



- Solyanikova E.P., Svinarenko A.A.// *Dynamical Systems - Theory and Applications*.-2011.-Vol.2.-P.31-38.-BIF110 (8p.).
233. Glushkov A.V., Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P.//In: *Coherence and Ultrashort Pulsed Emission*, Ed. Duarte F. J. (Intech, Vienna).-2011.-P.159-186.
234. Prepelitsa G.P., Nonlinear dynamics of quantum and laser systems with elements of a chaos/ Prepelitsa G.P.// *International Scientific Journal "Photoelectronics" ("Scopus")*.-2014.-Vol.23.-P.73-78.
235. Rusov V.D., On possible genesis of fractal dimensions in the turbulent pulsations of cosmic plasma – galactic-origin rays – turbulent pulsation in planetary atmosphere system/ Rusov V.D., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Loboda A.V., Khetselius O.Yu., Khokhlov V.N., Svinarenko A.A.// *Advances in Space Research* (Elsevier).-2008.-Vol.42.-P.1614-1627.
236. Glushkov A.V. Sensing the stochastic laser pulse structure and chaotic, photon-correlation effects in the non-linear multi-photon atomic dynamics in laser and DC electric field/ Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A.// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2004.- №2.-P.8-14.
237. 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.; Cowan D., *Methods of atomic structure calculations*/Cowan D.-N.Y.:Acad., 1974.-280P.; Cowan Code, adapted by A.Kramida.-Troitsk: ISAN, version 1993.
238. Glushkov A.V. PC Program Complex for calculation of atomic characteristics in external electric and magnetic field: SuperAtom – Blocks “Stark-Zeemane”, “StarkMix”/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Prepelitsa G.P.,Svinarenko A.A., Ignatenko A.V.// Preprint of Physics Institute of I.I.Mechnikov Odessa National University.-Odessa.-N Ph-L-E3.-2004.-45P.
239. Ternovsky V.B., PC Program Complex for calculation of Rydberg atoms characteristics in a free state and electric field: Blocks “Rydberg-Stark”, “Rydberg-RadDecay”/Ternovsky V.B.//E-preprint of Mathematics Department of the OSE-NU.-2010.-N MA-05 (48p.).

240. Терновський В.Б., Спектроскопія важких рідбергівських атомів та релятивістський квантовий хаос/ Терновський В.Б.-Одеса: ОДЕКУ, 2014.-150С.
241. Глушков А.В., Хецелиус О.Ю.,Дубровская Ю.В., Терновский В.Б., Теория кооперативных квантовых эффектов в атомах в сильном электромагнитном поле/ Глушков А.В., Хецелиус О.Ю.,Дубровская Ю.В., Терновский В.Б.–Одесса: Вид-во ТЕС, 2015.-405С.
242. Glushkov A.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B.-Odessa: OSENU (TEC), 2014.-180P.
243. Glushkov A.V., Advanced relativistic energy approach to radiation decay processes in atomic systems/ Glushkov A.V.,Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Nikola L.V. //Photoelectronics.-2015.-Vol.24.-P.11-22.
244. Glushkov A.V., Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos/ Glushkov A.V., Kuzakon V.M., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V.// Dynamical Systems Theory Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski (Lodz, Poland).-2013.-Vol.T1.-P.461-466.
245. Glushkov A.V., Geometry of Chaos: Consistent combined approach to treating of chaotic self-oscillations in backward-wave tube/ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B. // International Scientific Journal “Proceedings of International Geometry Center”.-2013.-Vol.6,N2.-P.6-12.
246. Ternovsky V.B., Non-linear analysis of chaotic self-oscillations in backward-wave tube/ Ternovsky V.B., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., //International Scientific Journal “Photoelectronics”.-2013.-Vol.22.-P.103-107.
247. Glushkov A.V., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology/ Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., Zaichko P.A.// Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering, Ed. J.Balicki.( World Sci. Pub.).-2014.-Vol.21.-P.69-75.
248. Glushkov A.V., Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series:

- Recent Advances in Computer Engineering, Ed. J.Balicki.( World Sci. Pub.).- 2014.-Vol.21.-P.143-150.
249. Ternovsky V.B., Geometry and Dynamics of a Chaos: Modelling non-linear processes in relativistic backward-wave tubes chain// International Scientific Journal “Proceedings of International Geometry Center”.- 2014.-Vol.7,N3.-P.79-86.
250. Glushkov A.V., Geometry of a Relativistic Quantum Chaos: New approach to dynamics of quantum systems in electromagnetic field and uniformity and charm of a chaos / Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Prepelitsa G.P.// International Scientific Journal “Proceedings of International Geometry Center”.- 2014.-Vol.7,N4.-P.60-71.
251. Ternovsky V.B., Advanced relativistic model potential approach to calculation of radiation transition parameters in spectra of multicharged ions/ Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., Nikola V.V., Seredenko S.S., Tkach T.B.// Journal of Physics: C Series (IOP, London, UK).-2014.-Vol.548.-P. 012047 (6p.).
252. Ternovsky V.B, Advanced relativistic model potential approach to calculation of the radiation transition and ionization characteristics for Rydberg atoms/ Ternovsky V.B., Florko T.A., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Tkach T.B.// Photoelectronics.-2014.-N23.-P.91-95.
253. Prepelitsa G.P., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Sensor Electronics and Microsystems Techn.-2014.-Vol.11,N4.-P.43-57.
254. Ternovsky V.B., New relativistic model potential approach to sensing radiative transitions probabilities in spectra of heavy Rydberg atomic systems/ Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Zaichko P.A., Khetselius O.Yu., Florko T.A.// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2015.-Vol.12, N1.-P.47-52.
255. Glushkov A.V., Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of helium: Test and new spectral data/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.V., Smirnov A.V. , Zaichko P.A.//Photoelectronics.-2015.-Vol.24.-P.94-102.
256. Ternovsky V.B., New version of relativistic energy approach and its application to studying spectra and radiative widths of the heavy Rydberg atoms/ Ter-

- novsky V.B.// Proc. Europ. REHE Workshop on “Spin-Orbit Coupling in Chem.Reactions”.-Torun (Poland). -1998.-P.34.
257. Ternovsky V.B., New relativistic approach to computing DC Stark effect resonances energies and shifts for heavy Rydberg atoms systems in electric field/ Ternovsky V.B. //Abs. of the 5<sup>th</sup> European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics”.-Uppsala (Sweden).-2000.-P.142.
258. Ternovsky V.B., Relativistic quantum chaos: New spectral data on the Rydberg rubidium ionization dynamics in a microwave field/ Ternovsky V.B., Glushkov A.V.// Abs. of the 5<sup>th</sup> European Workshop “Quantum Systems in Chemistry and Physics”.-Uppsala (Sweden).-2000.-P.143.
259. Ternovsky V.B., New ab initio relativistic model potential approach to computing spectra and radiation transitions probabilities for heavy Rydberg atoms/ Ternovsky V.B.// Proc. of the Eighth European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-VIII) Spetses (Greece).-2003.-P. 71.
260. Ternovsky V.B., Chaotic dynamics of relativistic Rydberg atomic systems in a DC and AC electric field. New effects and data/ Ternovsky V.B., Glushkov A.V.// Proc. of the Eighth European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-VIII) Spetses (Greece).-2003.-P. 72.
261. Lepikh Ya.I., New Microsystem technology to chaotic dynamics of relativistic backward-wave tubes: New effects and data/ Lepikh Ya.I., Glushkov A.V., Ternovsky V.B.//Abstr. of 5<sup>th</sup> International Scientific and Technical Conference “Sensor Electronics and Microsystem Technologies (with the Exhibition of sensor developments and industrial samples)”“SEMST-5”.-Odessa (Ukraine).-2012.-P.11.4b.
262. Ternovsky V.B., Nonlinear optics and dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos/ Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P. , Zaichko P.A.//Abs. of the International Conference on Photonics.-Belgrade (Serbia).-2013.-P.64.
263. Prepelitsa G.P., Non-linear analysis of chaotic self-oscillations in backward-wave tube and chaos regime parameters in generation of laser with absorbing cell/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.//Abs. of the XI International Conference on Atomic and Molecular Pulsed Lasers (AMPL-13).-Tomsk (Russia).-2013.-P.D4.

264. Ternovsky V.B., Nonlinear chaotic dynamics of relativistic atomic systems in microwave field and relativistic backward-wave tubes chains/Ternovsky V.B.//Abs. of the XVIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics.-Paraty-Rio de Janeiro (Brasil).- 2013.- P.P18.
265. Glushkov A.V., Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos/ Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V.//Abs. of 12<sup>th</sup> International Conference „Dynamical Systems – Theory and Applications” (DSTA- 2013).- Lodz (Poland).- 2013.- P.VIB140.
266. Prepelitsa G.P., Optimal schemes of laser ionization and dissociation of molecules and their application to optimization of isotope separation method/ Prepelitsa G.P., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B.//Abs. of the 32<sup>nd</sup> European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2014) .-Heinrich-Heine-University, Düsseldorf (Germany).-2014.-P.258.
267. Glushkov A.V., Nonlinear Stochastic Dynamics of Quantum and Laser Systems / Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.//Proc. of the International Conference on Statistical Physics.-Rhodes (Greece).-2014.-P.18.
268. Ternovsky V.B, Advanced relativistic model potential approach to calculation of the radiation transition and ionization characteristics for Rydberg atoms/ Ternovsky V.B, Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., Tkach T.B.//22<sup>nd</sup> International Conference on Spectral Line Shapes.- UT Space Institute, Tullahoma, Tennessee (USA).-2014.-P.65.
269. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Brusentseva S.V., Ternovsky V.B., Nonlinear Optics and Dynamics of Quantum and Laser Systems with Elements of a Chaos/ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A., Brusentseva S.V., //Abs. of the 21<sup>th</sup> Central European Workshop on Quantum Optics.-Brussels (Belgium)-2014.- P.94.
270. Glushkov A.V., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method / Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Brusentseva S.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.//Abs. of 13<sup>th</sup> International Conference on Artificial Intelligence, Knowledge Engineering and Data Bases (AIKED14).-Gdansk (Poland).-2014.-P.P11.
271. Glushkov A.V., New nonlinear optics and dynamics of quantum and laser systems with elements of a chaos/ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Prepelitsa G.P. ,

- Ternovsky V.B. //Abs. of the V International School and Conference on Photonics-2015.- Belgrade (Serbia).-2015.-P.82-83.
272. Ternovsky V.B., Rydberg atoms in a black-body radiation field: Relativistic calculation of radiation transition and ionization characteristics/ Ternovsky V.B. , Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Tkach T.B. //Abs. of the XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC).-Toledo (Spain, 22 –28 July).-2015.-P.ID 896.
273. Buyadzhi V.V., Nonlinear optics and dynamics of atoms, molecules in an electromagnetic field and laser systems with elements of a chaos/ Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B.// Abs. of the 47<sup>th</sup> Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS-2015).-Univ. of Latvia, Riga (Latvia, July 14-17).-2015.- P.154 (P85).
274. Ternovsky V.B., Relativistic quantum chaos in the heavy Rydberg atoms in an electromagnetic field and backward-wave oscillators/Ternovsky V.B.//Abs. of the XX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology.-Varna (Bulgaria.- 2015.- P.112.
275. Ternovsky V.B., Advanced relativistic energy approach to computing the radiation transition probabilities for heavy Rydberg atoms/Ternovsky V.B. //Abs. of the XX International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology.-Varna (Bulgaria).- 2015.- P.111.