удк 519.6;535 кпп хххххх № держреєстрації...0111U 005225 Инв. №

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ (ОДЕКУ) 65016, м.Одеса, вул. Львівська, 15; тел. (0482) 63 72 27

ЗАТВЕРДЖУЮ Проректор ОДЕКУ д.г.н.,с.н.с. Ю.С.Тучковенко

2015.12.10

ЗВІТ ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

«РОЗВИТОК ТА ЗАСТОСУВАННЯ НОВИХ МЕТОДІВ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ МАТЕМАТИКИ ТА МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ В ЗАДАЧАХ ТЕОРЕТИЧНОЇ КВАНТОВОЇ ОПТИКИ ТА АТОМНОЇ І ЯДЕРНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ»

(заключний звіт)

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

/ О.В.Глушков /

2015

Рукопис закінчено "30".11.2015р.

Рукопис розглянуто на засіданні науково-технічноі ради ОДЕКУ 2015., протокол №

СПИСОК АВТОРІВ

Керівник, зав. каф. вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат. наук, професор Зав.каф. інформаційних технологій, д-р фіз.-мат. наук, професор Професор кафедри вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат. наук, професор Професор кафедри вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат.наук, професор Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук Старший викладач кафедри інформатики, канд.фіз.-мат.наук Старший викладач кафедри вищої та прикладної математики Старший викладач кафедри вищої та прикладної математики Викладач кафедри військової підготовки

О.В. Глушков (р.1-4, висновки) Г.П.Препелица (п.р.1.2) О.Ю.Хецеліус (р.2, висновки) А.А.Свинаренко (р.3. висновки) Т.О.Флорко (р.1-4, висновки) Л.А.Вітавецька (п.р.2.2) Ю.В.Дубровська (п.р.2.3) Г.В.Ігнатенко (п.р.2.4) Д.Є. Сухарев (п.р. 3.2) І.М. Сєрга (п.р.3.4) Т.Б.Ткач (p.4)В.В. Буяджи (p.2)Г.С. Квасикова (п.р.4.2) В.Ф.Мансарлійський (п.р.3.3)

Нормоконтролер

С.В.Малацковська

ΡΕΦΕΡΑΤ

Звіт про НДР: с. 125, рис 6., табл.27, джерел 196.

Об'єкт дослідження – спектральні, радіаційні та автоіонізаційні характеристики релятивістських атомних систем.

Мета роботи – розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики та математичної фізики, включаючи методи квантової механіки та квантової електродинаміки, квантової геометрії, та їх застосування у розв'язанні задач теоретичної квантової оптики та атомної спектроскопії, зокрема, у визначенні та розрахунках радіаційних та автоіонізаційних характеристик релятивістських атомних систем, включаючи важкі багатозарядні іони.

Методи дослідження – методи обчислювальної математики та математичної фізики, квантової геометрії, обчислювальні методи для комп'ютерного моделювання.

У наданій роботі розглядаються нові високоточні чисельні калібровочно - інваріантні методи для розрахунку спектрів, радіаційних та автоіонізаційних характеристик релятивістських атомних систем, включаючи важкі багатозарядні іони.

Розроблені нові чисельні підходи та отримана на підставі їх реалізації нова спектроскопічна інформація щодо ряду радіаційних та автоіонізаційних характеристик релятивістських атомних систем представляє значний інтерес як у плані теоретичної перевірки нових ефектів, так і в плані її використання у широкому колі інших задач математичної фізики та обчислювальної математики, лінійної алгебри та теорії ймовірностей, а також квантової оптики, атомної та ядерної спектроскопії тощо.

РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД, КАЛІБОРОВОЧНО-ІНВАРІАНТНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ, РАДІАЦІЙНІ ТА АВТОІОНІЗАЦІЙНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

3MICT

Вступ 6
РОЗДІЛ 1 ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ФІЗИЧНУ ПРИРОДУ РАДІАЦІЙНИХ
ПЕРЕХОДІВ У АТОМНІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ. ОГЛЯД СУЧАСНИХ МЕТОДІВ
РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК РАДІАЦІЙНОГО РОЗПАДУ ЗБУДЖЕНИХ
АТОМНИХ СТАНІВ11
1. 1 Основні уявлення про фізичну природу радіаційних переходів в
релятивістській атомній спектроскопії11
1.1.1 Вступні зауваження11
1.1.2 Електричне дипольне випромінювання14
1.1.3. Електричне мультипольне випромінювання
1.1.4 Магнітне мультипольне випромінювання
1.2 Огляд методів розрахунку характеристик заборонених переходів в спектрах
багатоелектронних атомів і іонів. Актуальні проблеми теорії
РОЗДІЛ 2 НОВИЙ КАЛІБРОВОЧНО-ІНВАРІАНТНИЙ АВ ІΝІТІО ПІДХІД ДО
РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК ОПТИЧНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ
АТОМІВ ТА ІОНІВ З ПРЕЦИЗІЙНИМ УРАХУВАННЯМ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ
ТА КОРЕЛЯЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ
2.1 Енергетичний КЕД підхід до визначення характеристик заборонених
атомних переходів
2.1.1 Формула Гелл-Мана та Лоу. Уявна частина електронної енергії
2.1.2 Дійсна та уявна частини оператора міжелектронної взаємодії та ймовірності радіаційних переходів з урахуванням кутової симетрії атомної задачі
2.2 Квантово – електродинамічна теорія збурень для
багатоелектронного релятивістського атома47
2.2.1 Вхідні зауваження. Гамильтоніан релятивістського атома47
2.2.2 Базис релятивістських діраковських функцій нульового наближення
КЕД теорії збурень

2.2.3 Діаграматизація ряду ТЗ: основні фейнманівськи діаграми 2.2.4 другого та вищих порядків релятивістської атомної теорії Правки збурень..... 55 Матричні елементи оператора збурення на хвильових функціях ЗQP 2.2.5 2.2.6 Калібровочно - інваріантна КЕД процедура будування оптимізованих РОЗДІЛ З РОЗРАХУНОК ЕНЕРГІЇ, ЙМОВІРНОСТЕЙ І СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ ЗАБОРОНЕНИХ РАДІАЦІЙНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ ВАЖКИХ Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні Hg⁺ 68 3.1 3.2 Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні $Ar^+...71$ 3.3 3.4 Имовірності та сили заборонених радіаційних переходів в спектрі РОЗДІЛ 4 РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГІЙ І СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ В 4.1 Енергії та сили осциляторів радіаційних переходів в спектрах Li -4.4 Розрахунок рівнів енергій та сил осциляторів у Ga-подібних іонів.......98 Висновки 101 Перелік посилань...... 104

5

ВСТУП

Актуальність роботи. Дослідження спектрів і спектроскопічних властивостей важких атомів і багатозарядних іонів належить до дуже актуального і важливого класу задач сучасної атомної оптики і спектроскопії, що стимулюється потребами широкого кола додатків в астрофізиці і атомній фізиці, фізиці плазми, квантової електроніці і лазерній фізиці, включаючи розробку нових схем лазерів у ВУФ і рентгенівських областях спектру і т.д. В останні роки в зв'язку з безпрецедентним прогресом у розвитку експериментальних методик виникла гостра необхідність вирішення шуканих завдань на принципово новому рівні теоретичної послідовності і точності. У першу чергу це відноситься до визначення таких важливих атомних характеристик як ймовірності радіаційних переходів, сили осциляторів, причому, якщо у дослідженні найбільш інтенсивних дозволених (електричних дипольних Е1) переходів досягнутий певний прогрес, то у випадку заборонених атомних переходів (ЗАП), як правило, на декілька порядків менш інтенсивних в порівнянні з дозволеними, має місце досить критична ситуація. Очевидно, що без наявності надійної інформації про характеристики ЗАП виявляється в принципі неможливим адекватне вирішення багатьох актуальних завдань в астрофізиці, фізиці Сонця та полярних сяйв, а також щодо нових завдань, пов'язаних із з'ясуванням ролі слабких взаємодій в атомній оптиці, вивченням властивостей бозе-конденсату в парах лужних атомів, фонтанів холодних атомів, атомних годин і машин Карно. Хоча в сучасній атомній фізиці є широке коло методів розрахунку властивостей атомів (методи модельного потенціалу (МП), різні варіанти теорії збурень (ТЗ), методи ССП Хартрі-Фока (Х Φ), Дірака-Фока (Д Φ)), тим не менш, більшість з них мають цілу принципових недоліків (невиконання принципу калібровочної низку інваріантності, недостатньо повне і коректне урахування обмінно-кореляційних ефектів тощо). Особливо гостро такі проблеми стоять в теорії ЗАП. Результати розрахунку відповідних ймовірностей ЗАП часто відрізняються в кілька разів. Різниця у силах осциляторів (СО) ЗАП, радіаційних ширин для важких атомів з використанням різних виразів для фотонного пропагатору в операторах переходу досягає 5-40%, що фактично є вказівкою на невиконання принципу калібровочної інваріантності при розрахунку фізичних величин. Таким чином, в теперішній час можна констатувати гостру необхідність розвитку нової, калібровочно - інваріантної, релятивістської теорії ЗАП в спектрах таких істотно релятивістських систем як важкі атоми і багатозарядні іони.

Взаємозв'язок з іншими роботами. Дослідження, які виконані в роботі, увійшли до планів НДР Одеського державного екологічного університету: "Квантово - механічні методи розрахунку атомних систем у електричному і лазерному полях", "Нелінійні селективні фотопроцеси в атомах і молекулах", "Квантово-механічні методи розрахунку атомних і молекулярних систем у зовнішніх електричному, магнітному, лазерному полях", "Динамічний хаос в атомних та мультиосциляторних системах", "Нейромережеве моделювання у кібернетиці, прикладній математиці, геофізиці", "Розвиток і застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах класичної, квантової механіки, КЕД", "Розвиток та застосування нових квантово-механічних та КЕД методів в задачах обчислювальної математики та математичної фізики, теорії ядра і частинок, квантовій геометрії".

Мета роботи – розвиток нової, послідовної, калібрувально-інваріантної релятивістської теорії заборонених радіаційних переходів в спектрах важких атомних систем і багатозарядних іонів на основі КЕД теорії збурень (ТЗ) і проведення на її основі моделювання характеристик заборонених атомних переходів в цілому ряді важливих з точки зору додатків атомів і багатозарядних іонів (Li -, Zn-подібні іони, лужних атомів та ін.).

Для досягнення мети дослідження були сформульовані такі задачі:

- розвиток калібровочно - інваріантної релятивістської теорії ЗАП в спектрах важких атомних систем, що базується на формалізмі КЕД ТЗ;

- розробка і адаптація в розрахунках параметрів ЗАП схеми прецизійного урахування ефекту поляризаційної взаємодії і взаємного екранування зовнішніх квазічастинок в релятивістських багато – квазічастинкових (QP) системах;

- апробація нової теорії в розрахунках енергій, ймовірностей, сил осциляторів ЗАП (Е2, М1, а також й Е1) переходів у спектрах іонів Hg⁺ і Ar⁺;

- розрахунок енергій, ймовірностей ЗАП між рівнями конфігурацій $4s^2({}^1S_0)$, 4s4p (${}^{1,3}P^0_J$), 4s4d (${}^{1,3}D^0_J$) для Zn-подібних іонів із зарядом ядра Z~32-92;

- дослідження спектрів ряду важких атомів лантаноїдів і розрахунок ймовірностей радіаційних переходів типу $4f^{7}(^{8}S)6s^{2} \ ^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6snp^{8}P_{5/2,7/2,9/2}$ (n=6-8) в спектрі EuI і $4f^{14}6s^{2} \ ^{1}S_{0} - 4f^{14}6snp \ ^{1}P_{1}$ (n=6,7) в YbI;

- розрахунок рівнів енергій та сил осциляторів в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів із зарядом ядра Z~4-70.

Методи дослідження: методи квантової механіки і КЕД для опису релятивістських, кореляційних ефектів у спектрах важких атомних систем (КЕД ТЗ та інші); обчислювальні методи для розрахунку спектроскопічних параметрів атомів, розв'язання систем диференціальних рівнянь і т.і.

Зміст роботи. Робота складається з 4-х розділів:

 "Основні уявлення про фізичну природу радіаційних переходів у атомній спектроскопії. Огляд сучасних методів розрахунку характеристик радіаційного розпаду збуджених атомних станів"; 2) "Новий калібровочно - інваріантний ab initio підхід до розрахунку характеристик оптичних переходів у спектрах атомів та іонів з прецизійним урахуванням релятивістських та кореляційних ефектів ";
 "Розрахунок енергії, ймовірностей і сил осциляторів заборонених радіаційних переходів у спектрах важких багатоелектронних атомів та багатозарядних іонів"; 4) " Результати розрахунку енергій і сил осциляторів в Li-подібних багатозарядних іонів та лужних атомів ". **В першому розділі** проводиться виклад основних уявлень про природу радіаційних переходів в релятивістській атомній спектроскопії та огляд методів розрахунку властивостей заборонених переходів в спектрах багатоелектронних атомів та іонів.

В другому розділі, слідуючи роботам Глушкова- Флорко [4,152-155], новий КЕД підхід до визначення характеристик заборонених розглядається (М1, Е2 та ін.) радіаційних переходів у спектрах важких атомів та багатозарядних іонів, яки базуються на S-матричному формалізмі Гелл-Мана и Лоу (енергетичний підхід) та методі формально точної багаточасткової КЕД ТЗ з прецизійним одночасним, урахуванням основних релятивістських та кореляційних ефектів, ефектів вище порядків ΤЗ. ЯК другого та Фундаментальними елементами новизни нової теорії заборонених атомних переходів являється використання енергетичного КЕД підходу та виконання принципу калібровочної інваріантності при генерації оптимізованих базисів релятивістських хвильових функцій у подальших розрахунках відповідних амплітудних переходів. Для генерації шуканих оптимізованих базисів використана відома КЕД методика Глушкова-Іванова [2], яка базується на фундаментальному принципі мінімізації енергетичного функціонала, який враховує внесок поляризаційних діаграм 4-порядку КЕД ТЗ (другий порядок атомної ТЗ), тобто вклад діаграм, пов'язаний з обміном продольними фотонами уявну частину електронної енергії системи або радіаційну ширину В відповідного рівня [1,2].

В третьому розділі, слідуючи роботам Глушкова- Флорко [4,152-155], представлені дослідження спектрів енергетичних рівнів, властивостей (ймовірностей, сил осциляторів) заборонених магнітного дипольного М1, електричного квадрупольного Е2 (а також для тесту дозволених електричних дипольних Е1) переходів в спектрах цілого ряду атомів та іонів, зокрема, іонів ртуті Hg⁺ та аргону Ar⁺, важких лантанідних атомів європію і ітербію EuI, YbI і Zn-подібних багатозарядних іонів з зарядом ядра іона Z=32-92. Дослідження спектроскопічних характеристик шуканих систем також мотивується, по-перше, метою апробування нової релятивістської теорії заборонених атомних переходів; по-друге, метою отримання нової спектроскопічної інформації про атоми або іони, для яких в літературі є або недостатньо надійні, і в недостатній з точки додатків кількість даних, або яка-небудь теоретична або експериментальна інформація відсутня взагалі. У третьому, важливий аспект теорії - явне прецизійне врахування релятивістських і кореляційних ефектів, зокрема, ефектів поляризації та екранування, в розрахунках ймовірностей і сил осциляторів заборонених переходів для різних атомів і іонів, оцінка калібровочнонеінваріантного вкладу в радіаційну ширину і з'ясування кількісного зв'язку між величиною шуканого калібровочно-неінваріантного вкладу та ступенем згоди теорії з експериментом.

В четвертому розділі ми наведемо результати детального вивчення спектрів, ймовірностей і сил осциляторів заборонених атомних переходів між рівнями конфігурацій у спектрах Li-, Rb, -Cs-, Fr-, Ga-подібних багатозарядних релятивістської неемпіричної теорії іонів. розрахованих на основі (енергетичний підхід) та теорії збурень (ТЗ) с модельным потенціалом нульового наближення [132, 194-196]. Мета дослідження - по-перше, подальше апробування розвиненого вище послідовного теоретичного підходу для декількох добре вивчених експериментально іонів; по-друге, отримання нової інформації про спектри і ймовірності заборонених радіаційних переходів для практично зовсім невивчених багатозарядних іонів мало вивчених або послідовності Li, що представляє величезний інтерес для цілого ряду додатків, завдань вирішення діагностики зокрема, для для плазми, розробки короткохвильових лазерів багатозарядних іонах, астрофізичних на додатків і т.і. [1,3,5-17].

1 ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ФІЗИЧНУ ПРИРОДУ РАДІАЦІЙНИХ ПЕРЕХОДІВ У АТОМНІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ. ОГЛЯД СУЧАСНИХ МЕТОДІВ РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК РАДІАЦІЙНОГО РОЗПАДУ ЗБУДЖЕНИХ АТОМНИХ СТАНІВ

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

1.1.1 Вступні зауваження

Як вказувалося, найбільш адекватною основою для послідовної теорії радіаційних атомних переходів є квантова електродинаміка [1,5,18-20]. Відома фундаментальна обставина, пов'язана 3 порівняльною слабкістю електромагнітної взаємодії (йдеться про малість відповідної безрозмірної «константи зв'язку»- постійної тонкої структури $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$), відіграє вкрай дозволяючи описувати взаємодію важливу роль, зокрема, електронів з електромагнітним полем (фотонним вакуумом), як правило, в рамках формалізму теорії збурень [18].

Як правило, для опису електромагнітної взаємодії в класичній електродинаміці використовується вираз [18,19]

$$-ej^{\mu}A_{\mu} \tag{1.1}$$

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

$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0, \qquad (1.2)$$

Слід згадати, що з шуканим законом збереження пов'язана така фундаментальна властивість як калібровочна інваріантність теорії. Очевидно, при заміні $A_{\mu} \rightarrow A_{\mu} + \partial_{\mu} \chi$ до щільності лагранжіана (1.1) додається величина $-ej^{\mu}\partial_{\mu} \chi$, яка в силу (1.2) представляється у вигляді 4-дивергенції

$$-e\partial_{\mu}(\chi j^{\mu})$$

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

Як відомо, в квантовій електродинаміці [18,19] відповідні 4-векторы *j* і *A* замінюються вдруге квантованими операторами, причому, наприклад, оператор струму визначається стандартно через ψ - оператори згідно $\hat{j} = \hat{\psi} \gamma \hat{\psi}$, а роль узагальнених «координат» *q* в лагранжіане

$$\int \hat{L}_{B3AHM} d^3 x = -e \int \left(\bar{j} \hat{A} \right) d^3 x$$

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

Оператор електромагнітної взаємодії (інтеграл по простору від щільності гамильтоніана взаємодії) має стандартний вигляд

$$\widehat{V} = e \int \left(\widehat{j} \widehat{A} \right) d^3 x \,. \tag{1.3}$$

Оператор вільного електромагнітного поля являє собою суму

$$\widehat{A} = \sum_{n} \left[\widehat{c}_n A_n(x) + \widehat{c}_n^* A_n^*(x) \right], \qquad (1.4)$$

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

Теорія випромінювання фотонів внаслідок радіаційного розпаду збуджених атомних станів, природно, будується в рамках формалізму ТЗ. Імовірність переходу під впливом збурень \hat{V} в першому наближенні дається відомими формулами ТЗ.

Нехай початкові і кінцеві стани випромінюючої системи відносяться до дискретного спектру. Імовірність переходу $i \rightarrow f$ з випусканням фотона визначається відомим виразом (золоте правило Фермі):

$$d\omega = 2\pi \left| V_{fi} \right|^2 \delta \left(E_i - E_f - \omega \right) dv, \qquad (1.5)$$

де v умовно позначає сукупність величин, які характеризують стан фотона і пробігаючих безперервний ряд значень (при цьому хвильова функція фотона передбачається нормованою на δ -функцію «за шкалою v»). Слід нагадати, що, якщо випускається фотон з певним значенням моменту, то єдиною безперервною величиною є частота ω . Інтегрування формули (1.5) по $dv \equiv d\omega$ усуває δ -функцію і тоді ймовірність переходу дається стандартним виразом

$$\omega = 2\pi \left| V_{fi} \right|^2. \tag{1.6}$$

Якщо розглядати випускання фотона з заданим імпульсом k, то очевидно:

$$dv = d^{3}k/(2\pi)^{3} = \omega^{2}d\omega do/(2\pi)^{3}$$
.

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

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta (E_i - E_f - \omega) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \qquad (1.7)$$

і далі після інтегрування по $d\omega$:

$$d\omega = \frac{1}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \,\omega^2 do \,. \tag{1.8}$$

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

$$V_{fi} = e\sqrt{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} e^*_{\mu} j^{\mu}_{fi}(k)$$
 (1.9)

Простота, на перший погляд, обчислення відповідних матричних елементів і відповідних ймовірностей в принципі зберігається лише для атома водню. Для багато електронних релятивістських систем ситуація виявляється значно складніша (див. нижче) [1,3, 5,21,22,14, 24-26].

1.1.2 Електричне дипольне випромінювання

Отримані вище формули легко адаптуються до опису випускання фотона релятивістським електроном в заданому зовнішньому полі. Нагадаємо, що струм переходу в розглянутому випадку - матричний елемент оператора $\hat{j} = \widehat{\psi} \gamma \widehat{\psi}$, де, як звичайно, ψ - оператори передбачаються розкладеними по системі хвильових функцій стаціонарних станів електрона в даному полі. Переходу електрона зі стану *i* в стан *f* відповідає матричний елемент $\langle 0_i 1_f | j | 1_i 0_f \rangle$. Шукана зміна чисел заповнення, природно, здійснюється оператором $a_f^+ a_i$, і струму переходу можна записати:

$$j_{fi}^{\mu} = \overline{\psi}_{f} \gamma^{\mu} \psi_{i} = \left(\psi_{f}^{*} \psi_{i}, \psi_{f}^{*} \alpha \psi_{i} \right), \qquad (1.10)$$

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

Далі, якщо хвильову функцію фотона вибрати в тривимірному поперечному калібруванні (4-вектор поляризації e = (0, e)), то неважко записати наступну відому формулу для ймовірності випромінювання (в 1 с) в елемент тілесного кута *do* фотона з поляризацією *e* [18,19]:

$$d\omega_{en} = e^2 \frac{\omega}{2\pi} \left| e^* j_{fi} \left(\mathbf{k} \right) \right|^2 do , \qquad (1.11)$$

де

$$\mathbf{j}_{fi}(\mathbf{k}) = \int \boldsymbol{\psi}_f^* \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\psi}_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3 x \,. \tag{1.12}$$

З урахуванням підсумовування по поляризаціям фотона (шляхом усереднення за напрямками е в площині, перпендикулярній заданому напрямку n = k/ ω), вираз для ймовірності випромінювання прийме наступний вигляд:

$$d\omega_n = e^2 \frac{\omega}{2\pi} \left[\left[n \mathbf{j}_{fi} \left(\mathbf{k} \right) \right] \right]^2 do. \qquad (1.13)$$

В атомній спектроскопії, як правило, розглядається випадок, коли довжина хвилі фотона λ велика в порівнянні з розмірами випромінюючої системи a. Така ситуація пов'язана з крихтою швидкостей частинок в порівнянні зі швидкістю світла. З іншого боку, типові для атомних радіаційних переходів довжини хвиль лежать у видимій і УФ частині спектру. Дипольне випромінювання відповідає першому наближению по a/λ в струмі переходу (1.12). У цьому випадку множник $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ мало змінюється в області, де ψ_i або ψ_f помітно відмінні від нуля, і може бути замінений просто одиницею. Фактично, шукана заміна означає нехтування імпульсом фотона в порівнянні з імпульсами частинок в атомній системі. У нерелятивістській теорії в рамках дипольного наближення інтеграл j_{*i*}(0), як звичайно, замінюється його нерелятивістським виразом, тобто просто швидкості відношенню матричним елементом електрона по ${\cal V}_{fi}$ до шредінгеровських хвильових функцій. Фактично, шуканий елемент має звичний вигляд: $v_{fi} = -i\omega \mathbf{r}_{fi}$, а відповідно $e\mathbf{r}_{fi} = \mathbf{d}_{fi}$, де \mathbf{d} – дипольний момент електрона орбітальному русі). Формула (y його для ймовірності дипольного випромінювання має наступний відомий вигляд [18,19]:

$$d\omega_{en} = \frac{\omega^3}{2\pi} \left| e^* d_{fi} \right|^2 do. \qquad (1.14)$$

В (1.14), як звичайно, напрямок n задано в неявному вигляді, т.к. фактично вектор поляризації є повинен бути перпендикулярний n. Після тривіального підсумовування по поляризаціям, неважко записати:

$$d\omega_n = \frac{\omega^3}{2\pi} \left[\left[\operatorname{nd}_{fi} \right] \right]^2 do. \qquad (1.15)$$

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

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \left| \mathbf{d}_{fi} \right|^2, \tag{1.16}$$

а повну інтенсивність І випромінювання отримати множенням ймовірності на ħ ω :

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3} \left| \mathbf{d}_{fi} \right|^2.$$
(1.17)

Зрозуміло, записані формули виявляються повністю аналогічними класичним формулам електродинаміки для інтенсивності дипольного випромінювання системою частинок, які періодично рухаються, зокрема, інтенсивність випромінювання частоти $\omega_s = s\omega$ (де ω - частота руху частинок, *s* - ціле число) дається відомим виразом:

$$I = \frac{4\omega_s^4}{3c^3} |\mathbf{d}_s|^2, \qquad (1.18)$$

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

$$d(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} d_s e^{-is\omega t} \quad . \tag{1.19}$$

Зрозуміло, що квантова формула (1.18) виходить з (1.19) заміною компонент Фур'є матричними елементами відповідних переходів. Детальний пояснення шуканих правил (фактично виражають собою відомий принцип відповідності Бора) можна знайти в класичних підручниках з квантової механіки та атомної спектроскопії [27,28]. Природно, тут мова йде про окремий випадок загальної відповідності між компонентами Фур'є класичних величин і квантовими матричними елементами.

1.1.3. Електричне мультипольне випромінювання

Далі розглянемо загальний випадок електричного мультипольного випромінювання (надалі особливу увагу ΜИ приділимо електричним квадрупольним переходам). Зручніше розглядати випромінювання фотона не в заданому напрямку (тобто із заданим імпульсом), а випромінювання фотона з певними значеннями моменту *j* і його проекції *m* на деякий обраний напрям, скажімо, z. Нагадаємо, що в цьому випадку зазвичай розглядають фотони двох типів - електричного і магнітного. Природно, у разі атомних систем знову вважати, що розміри випромінюючої системи малі в порівнянні з довжиною хвилі. Далі скористаємося уявленням хвильових функцій фотона в імпульсному представленні, тобто, зазвичай, розкладаючи 4-вектор як потенціалу електромагнітного поля $A^{\mu}(\mathbf{r})$ у вигляді інтеграла Фур'є [18,19]. Цікавий матричний елемент тоді записується у вигляді:

$$V_{fi} = e \int j_{ji}^{\mu}(\mathbf{r}) A_{\mu}^{*}(\mathbf{r}) d^{3}x = e \int d^{3}x \cdot j_{fi}^{\mu}(\mathbf{r}) \int \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} A^{*}(\mathbf{r}) e^{-ikr}.$$
 (1.20)

Тут, слідуючи стандартному спрощенню запису формул, опущені індекси ω_{jm} у хвильових функцій фотона. Далі для електричного E_j - фотона використовується стандартний вираз для хвильової функції з вибором довільної калібрувальної постійної С у вигляді: $C = -\sqrt{\frac{j+1}{j}}$. Мотивація такого вибору пояснюється стандартно (див., напр., [18,19]) і пов'язана з тим, щоб у просторових компонентах хвильової функції (A) скоротилися члени, що містять кульові функції порядку j-1. У цьому випадку A буде містить тільки кульові функції порядку j+1, в результаті чого відповідний внесок у V_{ji} виявиться більш високого порядку малості (по a/λ), ніж внесок від компоненти $A^0 = \Phi$, що містить кульові функції нижчого порядку j. Тоді можна стандартно записати:

$$A^{\mu} = (\Phi, 0), \quad \Phi = -\sqrt{\frac{j+1}{j}} \frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}} \delta(|\mathbf{k}| - \omega) Y_{jm}(\mathbf{n}), \quad (1.21)$$

де n=k/ ω . Перестановка (1.21) у вираз (1.20) дозволяє після тривіального інтегрування по |k|, отримати

$$V_{fi} = -e_{\sqrt{\frac{j+1}{j}}} \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3x \cdot \rho_{fi}(\mathbf{r}) \int do_{\mathbf{n}} e^{-ikr} Y_{jm}^*(\mathbf{n}). \qquad (1.22)$$

Зазвичай далі для обчислення внутрішнього інтеграла використовується відоме розкладання вигляду:

$$e^{ikr} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} i^{l} g_{l} \left(kr\right) Y_{lm}^{*} \left(\frac{\mathbf{k}}{r}\right) Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right), \qquad (1.23)$$

з функцією

$$g_{l}(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr),$$

яка містить функцію Бесселя першого роду. Відзначимо, тут, що надалі при формулюванні нашої теорії ми також будемо використовувати вираз виду (1.23), застосовуючи, однак, інше позначення. Неважко показати (див. детальніше викладки в [18,19], що підстановка (1.23) в (1.22), дозволяє тривіально отримати:

$$\int e^{-ikr} Y_{jm}^*(\mathbf{n}) do_{\mathbf{n}} = 4\pi i^{-j} g_j(kr) Y_{jm}^*\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right)$$
(1.24)

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

$$g_{j}(kr) \approx \frac{(kr)^{j}}{(2j+1)!!}$$
, (1.25)

що дозволяє остаточно отримати для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = (-1)^{m+1} i^{j} \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+1/2}}{(2j+1)!!} e(Q_{j,-m}^{(3)})_{fi}, \qquad (1.26)$$

де, як зазвичай, використовуються позначення для величин [18,19]:

$$\left(\mathcal{Q}_{jm}^{(3)}\right)_{fi} = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int \rho_{fi}\left(\mathbf{r}\right) r^{j} Y_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) d^{3}x, \qquad (1.27)$$

званих 2*j*- польними електричними моментами переходу системи за аналогією з відповідними класичними величинами. Це дозволяє для електрона на зовнішньому полі (с $\rho_{ji} = \psi_j^* \psi_i$) обчислювати (1.27) як матричні елементи від класичної величини $Q_{jm}^{(s)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\,j+1}} r^j Y_{jm}$. Зрозуміло, в нерелятивістської теорії момент переходу фактично обчислюється аналогічним чином для будь-якої системи N взаємодіючих частинок. Природно, відповідна щільність переходу буде тривіально виражатися через хвильові функції системи у вигляді

$$\rho_{fi}(\mathbf{r}) = \int \psi_{f}^{*}(\mathbf{r}_{1},...,\mathbf{r}_{N}) \psi_{i}(\mathbf{r}_{1},...,\mathbf{r}_{N}) \sum_{n=1}^{N} \delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_{N}) \cdot d^{3}x_{1}...d^{3}x_{N}, \qquad (1.28)$$

де інтеграл береться по всьому конфігураційному простору. Слід зауважити, що мова тут йде лише про загальні вирази, і зрозуміло, їх конкретна реалізація в разі переходів в спектрах багато електронних атомних систем стикається з відомими проблемами правильного і адекватного визначення як хвильових функцій частинок, так і ефектів міжчасткових кореляцій (див. класичні монографії [18,19]. Далі неважко отримати вираз для імовірності електричного *Еj* - випромінювання:

$$\omega_{jm}^{(3)} = \frac{2(2j+1)(j+1)}{j[(2j+1)!!]^2} \omega^{2j+1} e^2 \left| \left(Q_{j,-m}^{(3)} \right)_{ji} \right|^2.$$
(1.29)

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

$$\omega_{1m}^{(9)} = \frac{4\omega^3}{3} e^2 \left| \left(Q_{1,-m}^{(9)} \right)_{fi} \right|^2, \qquad (1.30)$$

де величини $Q_{1m}^{(3)}$ пов'язані з компонентами вектора електричного дипольного моменту відомими формулами:

$$eQ_{10}^{(9)} = id_{z},$$

$$eQ_{1,\pm 1}^{(9)} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \left(d_{x} \pm id_{y} \right).$$
(1.31)

Підсумовування у формулі (1.30) за значеннями *m* дозволяє легко отримати записану вище формулу для повної ймовірності дипольного випромінювання.

Корисним є також розгляд кутового розподілу мультипольного випромінювання. З урахуванням нормировки на повну імовірність випускання ω_{im} неважко записати шукану формулу у вигляді:

$$d\omega_{jm} = \left| \mathbf{Y}_{jm}^{(9)}(\mathbf{n}) \right|^2 \omega_{jm} do = \frac{\omega_{jm}}{j(j+1)} \left| \nabla_{\mathbf{n}} Y_{jm} \right|^2 do \quad .$$
(1.32)

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

$$Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta , \quad Y_{1,\pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi} ,$$

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

Відповідні тривіальні обчислення дають наступні відомі формули для кутовогом розподіл дипольного випромінювання з певними значеннями *m* [18,19]:

$$d\omega_{10} = \omega_{10} \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta do , \qquad d\omega_{1,\pm 1} = \omega_{1,\pm 1} \frac{3}{8\pi} \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} do . \tag{1.33}$$

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

$$Q_{im}^{(3)} \sim a^{j}$$
. (1.34)

а ймовірність ж мультипольного випромінювання дається оцінкою:

$$\omega_{im}^{(3)} \sim \alpha k (ka)^2. \tag{1.35}$$

Тобто, неважко помітити, що збільшення ступеня мультипольності на 1 зменшує ймовірність випромінювання у відношенні ~ $(ka)^2$.

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

$$\left|\left\langle n_{f}J_{f}M_{f}\left|Q_{j,-m}\right|n_{i}J_{i}M_{i}\right\rangle\right|^{2} = \left(\begin{matrix}J_{f} & j & J_{i}\\M_{f} & m & -M_{i}\end{matrix}\right)^{2} \left|\left\langle n_{f}J_{f}\left\|Q_{j,-m}\right\|n_{i}J_{i}\right\rangle\right|^{2},$$
(1.36)

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

$$\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2.$$
 (1.37)

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

$$\sum_{M_{f}} \left| \left\langle n_{f} J_{f} M_{f} \left| Q_{j,-m} \right| n_{i} J_{i} M_{i} \right\rangle \right|^{2} = \frac{1}{2J_{i} + 1} \left| \left\langle n_{f} J_{f} \left\| Q_{j,-m} \right\| n_{i} J_{i} \right\rangle \right|^{2}$$
(1.38)

дозволяє отримати повну імовірність випускання фотона даної частоти з початкового рівня атомної системи *n_iJ_i* [18].

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

$$\left|\mathbf{J}_{i}-\mathbf{J}_{f}\right| \leq j \leq \mathbf{J}_{i}+\mathbf{J}_{f}.$$

$$(1.39)$$

Звичайно, можливі значення моменту фотона j при заданих значеннях J_i і J_f визначаються тими ж правилами. В атомній спектроскопії протягом довгого часу основна увага приділялася електричним дипольним переходам в спектрах атомних систем як найбільш інтенсивним. Справа в тому, що в атомах ймовірність випромінювання швидко зменшується з збільшенням j і найбільш інтенсивне випромінювання відповідає, на відміну, скажімо, від ядер, найменшій можливій мультипольності. Проекції M_i и M_f моментів J_i і J_f разом з проекцією m моменту фотона задовольняють звичайному правилу [24]:

$$M_i - M_f = m. (1.40)$$

Парності P_i і P_f початкового і кінцевого станів випромінюючої атомної системи повинні задовольняти умові $P_f P_{\Phi} = P_i$, де P_{Φ} - парність випромінюючого фотона. Очевидно, оскільки парності можуть мати лише значення ± 1, це правило приймає вигляд: $P_i P_f = P_{\Phi}$. Звичайно, для фотона електричного типу $P_{\Phi} = (-1)^i$, звідси випливає правило відбору по парності для електричного мультипольного випромінювання:

$$P_i P_f = (-1)^J. (1.41)$$

Зрозуміло, шукані правила відбору по повному моменту і по парності є строгими і повинні дотримуватися при випромінюванні будь-якими атомними системами. З іншого боку, в різних частинах випадках і приватних системах можуть мати місце наближені правила відбору, які визначаються тими чи іншими особливостями випромінюючих систем [18,19,24,30]. Особливо багатою на відносно нові для класичної атомної спектроскопії областю, де вводиться багато нетрадиційних правил відбору, є наприклад лазерна - гамма - бета - альфа електронна спектроскопія атомів і молекул [1,5,30].

1.1.4 Магнітне мультипольне випромінювання

Розглянемо тепер відомі елементи теорії магнітного мультипольного випромінювання, оскільки побудова послідовної теорії заборонених магнітних дипольних переходів відноситься до однієї з найважливіших завдань роботи. Хвильова функція фотона магнітного типу $A^{\mu} = (0, A)$, де потенціал A дається стандартної формулою [18,19]. Підстановка хвильової функції фотона магнітного типу у вираз (1.20) дозволяє отримати наступний відомий вираз для матричного елемента переходу:

$$V_{fi} = -e \frac{\sqrt{\omega}}{2\pi} \int d^3 x \cdot \mathbf{j}_{fi} \left(\mathbf{r} \right) \int do_{\mathbf{n}} \cdot e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{Y}_{jm}^{(M)*} \left(\mathbf{n} \right).$$
(1.42)

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

$$V_{fi} = -ei^{-j} \frac{2\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} \int j_{fi}(\mathbf{r}) r^{j} \mathbf{Y}_{jm}^{(M)*}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) d^{3}x , \qquad (1.43)$$

дe

$$\mathbf{Y}_{jm}^{(M)}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{j\left(j+1\right)}} \Big[\mathbf{r} \nabla Y_{jm}\Big].$$

Зазвичай остаточно матричний елемент зручно представити у вигляді:

$$V_{fi} = (-1)^{m} i^{j} \sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}} \frac{\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!} e^{\left(Q_{j,-m}^{(M)}\right)_{fi}}$$
(1.44)

з явно введеними 2*j*-польними магнітними моментами переходу [18,19]:

$$\left(Q_{jm}^{(M)}\right)_{fi} = \frac{1}{j+1} \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} \int \left[\mathbf{r} \, \mathbf{j}_{fi} \right] \nabla \left(r^{j} Y_{jm}\right) d^{3} x \,. \tag{1.45}$$

Неважко зрозуміти, що формули для випускання фотона магнітного типу відрізняються від аналогічних формул випускання фотона електричного типу заміною електричних моментів магнітними. Це стосується також і відповідних виразів для кутового розподілу. Наприклад, класична формула для повної ймовірності М1-випромінювання записується у відомому вигляді:

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \left| \mu_{fi} \right|^2. \tag{1.46}$$

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

$$\mathbf{j}_{fi} = -\frac{i}{2m} \left(\boldsymbol{\psi}_f^* \nabla \boldsymbol{\psi}_i - \boldsymbol{\psi}_i \nabla \boldsymbol{\psi}_f^* \right) + \frac{\mu}{es} \operatorname{rot} \left(\boldsymbol{\psi}_f^* \hat{\mathbf{s}} \boldsymbol{\psi}_i \right), \tag{1.47}$$

де µ - магнітний момент, s- спін. Вираз для μ_{fi} має звичайний вигляд:

$$\mu_{fi} = \int \psi_f^* \left(\frac{e}{2m} \hat{E} + \frac{\mu}{s} \hat{s} \right) \psi_i d^3 x , \qquad (1.48)$$

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

$$\widehat{\mu} = \frac{e}{2m}\widehat{E} + \frac{\mu}{s}\widehat{s} , \qquad (1.49)$$

що складається з операторів орбітального і власного магнітних моментів частинки. Нарешті, відзначимо, що для магнітного мультипольного випромінювання правила відбору аналогічні правилам для електричного випадку. Зокрема, для парності справедливо правило $P_iP_f = (-1)^{j+1}$.

1.2 Огляд методів розрахунку характеристик заборонених переходів в спектрах багато електронних атомів і іонів. Актуальні проблеми теорії

До теперішнього часу в задачах розрахунку характеристик заборонених радіаційних переходів в спектрах атомів і іонів використання отримали теоретичні методи, які добре відомі в сучасній теоретичній атомної спектроскопії багато електронних атомів. Шукані методи досить детально розглянуті в цілому ряді відомих оглядів і монографій [1, 3,5,14,15,17-27, 30,31, 63-66]. Серед шуканих підходів, насамперед, слід відзначити такі відомі підходи, як різні версії класичного методу самоузгодженого поля Хартрі - Фока (ХФ) і його релятивістське узагальнення - метод Дірака-Фока (ДФ) в одно - та багато конфігураційному наближенні, метод Дірака- Фока - Слетера, релятивістський метод ХФ і Хартрі-Фока-Слетера [1,5,7-9,13,21,22,30-33,35,59-61]. 3 ïx допомогою протягом декількох десятиліть була реалізована велика програма рівнів i розрахунків спектрів енергетичних різних спектроскопічних характеристик, зокрема, ймовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, потенціалів іонізації, перетинів різних елементарних процесів, включаючи збудження і іонізацію, і т.д. для цілого ряду елементів періодичної таблиці таблиці Менделєєва Менделєєва, насамперед, елементів перших двох періодів [7-9,21,22,30,32-35,59-62,]). Крім шуканих підходів (див. широко використовувалися і такі методи як різні версії ТЗ, наприклад, ТЗ за потенціалом міжелектронної взаємодії, ТЗ по 1/Z (Z- заряд ядра атома), ТІ з модельним потенціалом (МП) нульового наближення, з ХФ або ДФ нульовим Меллера - Плессета, метод псевдопотенціалу, метод наближенням, ТЗ функціонала шільності (ФЩ) в нерелятивістському наближенні Кона - Шема і релятивістському наближенні Дірака – Кона - Шема, наближення випадкових фаз, метод одно- і багато - канального квантового дефекту та ін. Фактично всі вони базуються на наближенні самоузгодженого поля і моделі незалежних

електронів, точніше квазічастинок. Зрозуміло, що питання точності того чи іншого методу потребує окремого розгляду, проте в цілому слід підкреслити, що, хоча перераховані методи в багатьох випадках дозволили отримати з тією чи іншою мірою точності корисну спектроскопічну інформацію, тим не менш, точність більшості з них залишається далекою від рівня спектроскопічної. Численний (з урахуванням постійного прогресу в розвитку обчислювальної техніки) досвід використання зазначених методів в атомній спектроскопії показав, проте, що розрахунок спектрів і спектральних характеристик складних важких, надважких атомів, ймовірностей радіаційних переходів і т.і., нерідко наближених призводить або спектроскопічним ЛО дуже ланих ПО характеристикам, або пов'язаний в ряді ключових завдань з дуже серйозними обчислювальними труднощами [1,5,17,22,62,142-151]. Детальний розгляд деяких основних недоліків методів ССП, включаючи методи ДФ і різних версії ТЗ дано в ряді недавніх монографій та оглядів [1,3, 5,14,17, 23,62,143-151]. Зокрема, до основних недоліків класичних методів слід віднести і досить невисоку точність визначення матричних операторів фізичних величин, включаючи оператор радіаційних переходів, часто вкрай повільну збіжність відповідних рядів ТЗ. Серйозні проблеми виникають при спробах адекватного опису таких найважливіших кореляційних ефектів як "швидке розмазування" вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, тиск континууму, ефекти поляризації та екранування в багато електронних системах [1,3,14]. Вельми показовим є той відомий факт, що практично у всіх перерахованих підходах з тим або іншим ступенем виявляється порушеним фундаментальний принцип калібрувальної інваріантності у відповідних базисах, що фактично є прямою вказівкою на неадекватний, а в ряді випадків вкрай неефективний, неповний облік складних кореляційних ефектів [1,5,21,22]. Застосування в розрахунках базисів електронних хвильових функцій, що генеруються в методах типу ХФ, ДФ і т.і., в розрахунках ймовірностей магнітних дипольних та електричних квадрупольних переходів для ряду важких атомів та іонів часто призводить до

відмінностей від експериментальних значень, що складають кілька порядків величини (див. [1,5,7-9,17, 23,32-34]). Опис цілого ряду найважливіших ефектів в сучасній атомній фізиці зі спектроскопічної точністю виявляється неможливим на основі зазначених вище стандартних підходів. Тут мова йде, наприклад, про властивості негативних іонів, параметрах автоіонізаціонних і лазерноіндукованих резонансів у спектрах важких атомів, характеристиках заборонених радіаційних переходів. У цьому сенсі доречно відзначити [1,5], що, незважаючи на відносно тривалий розвиток квантової механіки і досить переконливе теоретичне обґрунтування багатьох питань фізики атома, в практичному відношенні теорія розрахунку різних характеристик залишається багато в чому незадовільною. Саме це служить причиною досить високої активності в останні роки з розвитку принципово нових підходів або радикально удосконаленню відомих класичних методів. У цьому сенсі варто згадати про розвиток в останнє десятиліття нових методів і комплексів програм на основі вдосконалених версій ДФ, зокрема, методу мега-ДФ, ДФ-Брейта ("Dirac"-package, "Beta-package", "QED", "GRASP", "BERTHA") [1,5,22,31,62,63,70,143-150]. Широкий розвиток одержали так звані кластерні методи, а також багаточасткова ТЗ з ДФ нульовим наближенням [1,5,22,28,71,90,91]. Вельми перспективними є нові версії відомого -матрічного методу та узагальнення методу ДФ на випадок обліку R мультиполярності у відповідних операторах [63,70, 144-150]. Незважаючи на шуканий прогрес, переважна більшість нових або вдосконалених методів не дозволяє в ряді важливих завдань добитися високої точності. Ця обставина багато в чому пояснюється тим, що і в нових теоріях виявляється невиконаним фундаментальний принцип калібрувальної інваріантності (див. [1,2,5,144-148]). Очевидно, спостережувані фізичні властивості не повинні залежати від калібрування потенціалів електромагнітного поля [18,19]. Тим не менш, фактично має місце в конкретних обчисленнях залежність вкладів окремих порядків ТЗ від калібрування фотонного пропагатору. Кількісно невиконання умови калібрувальної інваріантності обумовлює високу похибку в обліку

багаточасткових кореляційних ефектів (помилка може досягати для заборонених переходів сотні %) [1-3,5,22,31,60,61,96-102, 121,142-151]. Ясно, що застосування таких схем для опису параметрів заборонених радіаційних переходів є, очевидно, не прийнятним. Тут вельми показовим є класичний приклад, запозичений нами з монографії [3]. Річ йдеться про значну розбіжність ймовірностей радіаційних переходів (сил осциляторів) і радіаційних та автоіонізаціонних ширин, розрахованих в рамках стандартного амплітудного підходу (див. подр.1.2) з використанням операторів переходу у формі "довжини" і "швидкості" (калібрування: кулонова і Бабушкіна [18]). Ступінь розбіжності шуканих величин традиційно є ефективним показником якості, як результатів розрахунку, так і в цілому послідовності теоретичного методу. В [1,3,5,146] детально аналізуються приклади, що ілюструють шуканий ефект для значень ймовірностей електричних дипольних переходів в різних атомах. Зазначено, що відмінність значень ймовірностей дозволених переходів і сил осциляторів, визначених за формулами довжини і швидкості досягає ~ 50%. Звичайно, в квантовій механіці і КЕД було здійснені численні спроби побудови послідовних теорій максимально позбавлених зазначених принципових недоліків. Тут слід згадати, по-перше, відомий метод натуральних орбіт Девідсона і співр. (див. [1]), який, однак, не отримав широкого використання через труднощі проведення масових розрахунків атомних характеристик. Метод Дитца - Хесса [102,148] ґрунтується на використанні варіаційного принципу і систем рівнянь типу ХФ (g-ХФ рівняння), а останнім часом і ДФ, що є більш оптимальними, ніж мастерні рівняння в стандартних методах ХФ, ДФ. Однак, шукані теорії не забезпечують повну інваріантність. Один час інтерес викликав напівемпіричний метод Рудзікаса та ін. (див., напр., [100]), які в методі ХФ - Паулі запропонували використовувати калібрувальну постійну С в якості підганяльного параметра. Незважаючи на окремі обнадійливі результати, далі цей підхід зазнав значної критиці через невисокої точності в масових розрахунках і очевидною теоретичної непослідовності [1,5,146,147]. У методах типу мега - ДФ і

багаточасткової ТЗ з ДФ нульовим наближенням, а також методі кластерних розкладів вдалося суттєво підвищити точність визначення характеристик за рахунок послідовного врахування складних кореляцій, проте, навіть в цих методах як і раніше порушується суттєво принцип калібрувальної інваріантності [1,5,22,31,90,9,144-149]. Крім того, у ряді спеціальних завдань, пов'язаних з описом автоіонізаціонних резонансів, а також заборонених радіаційних переходів точність розрахунку виявляється не досить високою. У разі розрахунку констант різних елементарних процесів за участю іонів, фотонів, електронів особливо в зовнішньому електромагнітному полі зазначені вище особливо [1,5,21,22,64,93,133]). проблеми стоять критично (див. До теперішнього часу, однією найбільш послідовних спроб подолання 3 фундаментальних проблем теорії є КЕД підхід, розвинений в роботі Глушкова-Іванова [2]. У шуканої роботі в рамках адіабатичного формалізму Гелл-Манна і Лоу розвинений новий метод генерації калібрувально-інваріантних базисів орбіталей, шо базується на фундаментальному принципі мінімізації калібрувально - неінваріантних вкладів у радіаційну ширину (уявну частину електронної енергії). Шукана схема послужила основою для розвитку принципово нового методу в атомній спектроскопії (квантовій механіці, КЕД) -КЕД ТЗ з калібрувально-інваріантним нульовим наближенням [1,3,43,46, 84,89,129-131]. Подальший розвиток цієї теорії зроблено в численних роботах з метою застосування в розрахунках тих чи інших параметрів самих різних атомних систем (див. [14,30,31, 47, 69,105-107,132-141]). З метою розширення класу функцій для опису електронної щільності в атомі надалі Глушков-Малиновська узагальнили шукану КЕД схему (див. [105-107]), запропонувавши новий клас рівнянь типу Дірака – Кона - Шема. Цей підхід був успішно реалізований для адекватного опису та визначення характеристик дозволених радіаційних переходів. У моделях [6,47-49] з метою ідентифікації ефекту лазерного посилення і розрахунку кінетики заселення рівнів в плазмі багатозарядних Ne-, Ni-подібних іонів використана схема Глушкова-Іванова [2] з

доповненням базису дискретних станів рівняння Дірака штурмовським доповненням для врахування станів континууму. В [31,10,106,130-139] метод КЕД ТЗ успішно використаний у вивченні параметрів надтонкої структури важких атомів, спектрів важких багатозарядних іонів з урахуванням радіаційних поправок, а також розрахунку поляризуемості атомів, зсуву спектральних ліній атомів в атмосфері інертних газів і ін. Новим є використання калібрувальноінваріантного формалізму КЕД ТЗ в задачах лазерно-електронно-ядерної спектроскопії, включаючи лазерну-бета-електрон ядерну спектроскопію (див. [1,3,5,64], а також посилання в «нобелівських» виданнях, початок яким поклали нобелівські лауреати І. Prigogin и W.Kohn [4,30,89,133,135, 146,147]).

У нашій роботі ми викладемо принципово новий релятивістський підхід до визначення характеристик заборонених (М1, Е2 та ін.) переходів в спектрах важких атомів і багатозарядних, зокрема, Zn - і Li - подібних, іонів [4, 132, 152-155, 194-196]. Вибір Zn - і Li - подібних та ін. іонів в якості об'єкта дослідження мотивований, з одного боку, крайньою високою теоретичною складністю шуканих атомних об'єктів, а з іншого боку, їх вивчення представляється вкрай важливим для цілого кола актуальних додатків в лазерній фізиці, квантовій електроніці, астрофізиці і фізиці термоядерного синтезу і т.д. [1,3,5,6,14, 15, 17,23-26, 62- 64, 142-151].

2 НОВИЙ КАЛІБРОВОЧНО-ІНВАРІАНТНИЙ АВ ІNITIO ПІДХІД ДО РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК ОПТИЧНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ АТОМІВ ТА ІОНІВ З ПРЕЦИЗІЙНИМ УРАХУВАННЯМ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ТА КОРЕЛЯЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ

2.1 Енергетичний КЕД підхід до визначення характеристик заборонених атомних переходів

2.1.1 Формула Гелл-Мана та Лоу. Уявна частина електронної енергії

В енергетичному підході у релятивістській теорії атомних станів, що розпадаються, відома методика [1,2,121], пов'язана з діагоналізацією власної матриці М, для розрахунку здвигу енергії ΔЕ станів. У релятивістської теорії шуканий здвиг повної енергії довільного атомного стану взагалі представляється у вигляді:

$$\Delta \mathbf{E} = \mathbf{R} \mathbf{e} \Delta \mathbf{E} + \mathbf{i} \, \mathrm{Im} \Delta \mathbf{E}, \qquad \mathbf{Im} \, \Delta \mathbf{E} = -\Gamma/2 \,, \qquad (2.1)$$

де ймовірність розпаду атомного стану А=Г. Для вироджених або частково вироджених атомних станів відповідна секулярна матриця М записується у вигляді ряду ТЗ [1]:

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

де *k* — число квазічастинок (електронів або вакансій з так званими кореляційними «шубами»),

М⁽⁰⁾ — внесок вакуумних діаграм,

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

М⁽²⁾ – внесок двоквазічастинкових діаграм и т.д. (див. нижче).

У якості нульового наближення будемо розглядати систему невзаємодіючих діраковських електронів, які рухаються у довільному центральному полі. Вибір відповідного атомного гамільтоніана, також як і визначення нульового наближення ТЗ буде викладено нижче. Мастерною у рамках енергетичного підходу виявляється формула Гелл-Мана та Лоу для енергетичного здвигу (2.1):

$$\Delta E = \lim_{\gamma \to 0} i \gamma g \frac{\partial}{\partial g} \ln \langle \Phi | S_{\alpha}(0, -\infty | g) | \Phi \rangle_{g=1}$$
(2.3)

3 КЕД матрицею розсіювання, яка може бути стандартним образом представлена у вигляді ряду ТЗ по взаємодії електронів з полем:

$$S_{\alpha}(0, -\infty | g) = 1 + \sum_{p} S^{(p)} g^{p}$$

$$S^{(p)} = \frac{(-e)^{p}}{p!} \int d^{4}x_{1} \dots \int d^{4}x_{p} \exp[\gamma(t_{1} + \dots + t_{p}) \cdot T[\overline{\Psi}(1)A(1)\Psi(1)...\overline{\Psi}(p)A(p)\Psi(p)]$$
(2.4)

Усі позначення з [1,19]. Підстановка (2.4) у (2.3) приводить до розкладання енергетичного здвигу у ряд ТЗ:

$$\Delta E = \lim_{\gamma \to 0} i\gamma [2 < \Phi \mid S^{(2)} \mid \Phi > +4 < \Phi \mid S^{(4)} \mid \Phi > -...]$$
(2.5)

У формулі (2.5), звичайно, фігурують тільки парні порядки матриць розсіювання. Для подальшого розглядання визначимося з станом атомних електронів. Наприклад, для подальшого зручно ввести поняття одно - двох- и т.і. квазічастинкових станів як станів з одним , двома и т.д. електронами (вакансіями) над остовом заповнених електронних оболонок. Тоді в уявленні вторічного квантування одноквазічастинковий стан визначається стандартно як:

$$a_{\alpha}^{+} \Phi_{0}, \quad a_{\alpha} \Phi_{0} (-1)^{j\alpha - m\alpha},$$

$$(2.6)$$

а двоквазічастинковий стан представляють у вигляді:

$$\sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta} a^{+}_{\alpha} a^{+}_{\beta} \Phi_{0}, \quad \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta} a_{\alpha} a_{\beta} \Phi_{0}, \quad \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta} a^{+}_{\alpha} a_{\beta} \Phi_{0} , \qquad (2.7)$$

де використані стандартні оператори народження та знищення, Φ_0 – функція стану остова з заповненими електронними оболонками (діраковський біспінор). У (2.7) функції *C*₀ включають коефіцієнти Клебша-Гордана, генеалогічні коефіцієнти , фазовий множник и т.і. Неважко записати аналогічний вираз для трьохквазічастинкових станів [5]:

$$\sum_{\alpha,\beta,\gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a^+_{\alpha} a^+_{\beta} a^+_{\gamma} \Phi_0, \quad \sum_{\alpha,\beta,\gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a_{\alpha} a_{\beta} a_{\gamma} \Phi_0, \quad \sum_{\alpha,\beta,\gamma} C_{\alpha\beta\gamma} a^+_{\alpha} a_{\beta} a_{\gamma} \Phi_0.$$
(2.8)

Далі у стандартному енергетичному підході розв'язується задача розрахунку повних матричних елементів S- матриці другого та четвертого порядків T3. Дійсна частина (визначаюча спектр енергетичних рівнів) та уявна частина здвигу (пов'язана з ймовірністю радіаційного розпаду збурених атомних станів) зручно виділити в подальшому після інтегрування по годинам та частотам віртуальних фотонів. Стандартна процедура усереднення фотонних операторів по стану фотонного вакууму приводить до наступних виразів [1, 43,119-121] в другому порядку:

$$S^{(2)} = \frac{e^2}{2} \int d^4 x_1 \int d^4 x_2 D(12) \exp[\gamma(t_1 + t_2) \cdot T[\overline{\Psi}(1)\gamma^{\mu}\Psi(1)\overline{\Psi}(2)\gamma^{\mu}\Psi(2)]$$
(2.9)

і в четвертому порядку:

$$S^{(4)} = \frac{e^4}{4} \int d^4 x_1 \dots \int d^4 x_4 D(12) D(34) e^{[\gamma(t_1 + \dots + t_4)]}$$
$$\cdot T[\overline{\Psi}(1)\gamma^{\mu}\Psi(1)...\overline{\Psi}(4)\gamma^{\mu}\Psi(4)]$$
(2.10)

37

Фігуруючий у виразах (2.9), (2.10) фотонний пропагатор може бути обраний у різних калібровках. На даному етапі для визначеності використаємося кулонівською калібровкою [18]:

$$D(12) = -\frac{i}{8\pi^2} \frac{1}{r_{12}} \int d\omega \exp\left(-i\omega t_{12} + i|\omega|r_{12}\right)$$
(2.11)

У матричних елементах 4 порядку можна зневажати на спізнення міжелектронної взаємодії в одному з пропагаторів, в результаті чого D(12) буде містить дельта-функцію за часом. Звичайно, електроні матричні елементи в (2.9) та (2.10) можуть бути представлені у вигляді суми різних систем парувань електронних операторів Ψ и $\overline{\Psi}$, при цьому кожній системі парувань ставляться у відповідь визначені фейнманівськи [1]. діаграми Для системи с k квазічастинками над остовом матричні елементи матриці М представляються у вигляді розкладання (2.3), яке фактично являється аналогом до відомого електронного кластерного розкладання, але містить к членів. Детальний опис можливих діаграм та відповідних їм матричних елементів подано в [1,119-121].

В другому порядку ТЗ єдина діаграма яка дає ненульовий внесок до уявній частини електронної енергії атома – ХФ діаграма вигляду В (Рис.2.1). Одноквазічастинкові діаграми четвертого та другого порядку КЕД ТВ (A_d – пряма поляризаційна и A_{ex}- обмінна поляризаційна), яка дає ненульовий внесок у частину електронної енергії, наведені на Рис.2.2.

Рисунок 2.1 - Єдина одноквазічастинкова діаграма другого порядку КЕД ТЗ «В», яка дає ненульовий внесок в уявну частину електронної енергії атома



Рисунок 2.2 - Одноквазічастинкові діаграми четвертого та другого порядку КЕД ТЗ (A_d – пряма поляризаційна та A_{ex}- обмінна поляризаційна), яка дає ненульовий внесок в уявну частину електронної енергії

Помітимо тут же, що внески діаграм рис.2.2 в уявну частину електронної енергії атома являються фактично залежними від калібровки фотонного пропагатора та багато електронними за своєю природою. До цього питання ми повернемося нижче, а зараз наведемо вираз для внеску діаграми В в уявну частину електронної енергії атома.

Детально відповідна процедура викладена в [1,119-121] та зводиться до фіксації в (1.8) системи парування, відповідній діаграмі В (Рис.2.1), підстановці виразів для електронного та фотонного пропагаторів та подальшому обчислюванню інтегралів за часом та частотою.

Електронний пропагатор:

$$G(X_1 X_2) = \begin{cases} -\sum_{s \le F} \exp(-i\omega_s t_{12}) \Phi_s(r_1) \Phi_s(r_2), & t_1 < t_2\\ \sum_{s > F} \exp(-i\omega_s t_{12}) \Phi_s(r_2) \Phi_s(r_1), & t_1 > t_2 \end{cases}$$
(2.12)

Де $\sum_{s>F} \left(\sum_{s\leq F} \right)$ позначає додавання по всім електронним станам вище (нижче) рівня Фермі електронів в остові, включаючи верхній континуум. Кожній пунктирній лінії на діаграмах відповідає вираз $\gamma^{\mu} D_{\mu\nu} \gamma^{\nu}$. Після інтегрування за часом (перехід до позачасових діаграм) пунктирні лінії відповідає -"оператор" міжелектронної взаємодії

$$\frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{r_{12}} \exp(i|\omega|r_{12})(1-\alpha_1\alpha_2).$$
(2.13)

Другий член в (2.12) описує магнітну (брейтовську) взаємодію; експонента враховує запізнення взаємодії. Діаграма другого порядку містить тільки один електронний пропагатор. Внесок в Im Σ дає $\sum_{s \leq F}$ (якщо активна частинка - електрон) або $\sum_{s > F}$ (частинка - вакансія). Кінцевий вираз має вигляд (в атомних одиницях):

$$Im\Delta E = -\frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{\substack{a \mid n \\ n \mid 1}} V_{anan}^{|\omega_{an}|} , \qquad (2.14)$$

де матричний V елемент (уявна частина) має вигляд:

$$\mathbf{V}_{ijkl} = \iint \mathbf{d}^{3} \mathbf{r}_{1} \mathbf{d}^{3} \mathbf{r}_{2} \varphi_{1}^{*}(\mathbf{r}_{1}) \varphi_{j}^{*}(\mathbf{r}_{2}) \frac{\sin |\omega| \mathbf{r}_{12}}{\mathbf{r}_{12}} \cdot (1 - \alpha_{1} \alpha_{2}) \varphi_{k}(\mathbf{r}_{2}) \varphi_{1}(\mathbf{r}_{1}), \quad (2.15)$$

де функція φ_i – релятивістські біспінори електронів у відповідних станах. Деякі члени суми у (2.14) являють собою парциальні внески різноманітних каналів, відповідно ймовірність радіаційного переходу α-n визначається матричним елементом $V_{anan}^{|\omega_{an}|}$ [1]:

$$\Gamma_{\alpha_n} = \frac{1}{4\pi} \cdot V_{\alpha_n \alpha_n}^{\left|\omega_{\alpha_n}\right|}.$$
(2.16)

В загальному вигляді елемент релятивістського оператора міжелектронної взаємодії має вигляд:

$$\mathbf{V}_{ijkl} = \iint \mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{1}\mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{2}\varphi_{1}^{*}(\mathbf{r}_{1})\varphi_{j}^{*}(\mathbf{r}_{2}) \frac{\exp(i|\omega|\mathbf{r}_{12})}{\mathbf{r}_{12}} \cdot (1 - \alpha_{1}\alpha_{2})\varphi_{k}(\mathbf{r}_{2})\varphi_{1}(\mathbf{r}_{1}). \quad (2.17)$$

Розглянемо далі дійсну та уявну частину (2.17), використовуючи кутову симетрію задачі [1,119-121].

2.1.2 Дійсна та уявна частини оператора міжелектронної взаємодії та ймовірності радіаційних переходів с урахуванням кутової симетрії атомної задачі

Згідно [1,119-121], дійсна частина матричного елемента оператора міжелектронної взаємодії (2.17) має вигляд:

$$\frac{\cos|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda)J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_{<})J_{-\lambda-1/2}(|\omega|r_{>})P_{\lambda}(\cos \mathbf{r_1r_2}), \quad (2.18)$$

де Ј-функція Беселя першого роду,

$$(\lambda)=2\lambda+1.$$

Уявна частина «потенціалу» (2.16) ~ $\sin|\omega|r_{12}/r_{12}$ розкладається так само в ряд [1]:

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+\frac{1}{2}}(|\omega|r_1) J_{\lambda+\frac{1}{2}}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\cos r_1r_2), \quad (2.19)$$

Згідно[119-121], дійсна та уявна частини всіх матричних елементів мають однакові кутові частини та розрізняються тільки радіальними інтегралами. Розкладення (2.18) фактично відповідає стандартному мультипольному розкладенню ймовірності радіаційного розпаду та в нерелятивістськім наближенні відповідає амплітудній схемі операторам переходу у формі довжини (див. підрозділ 1.2). Т.ч., у рамках релятивістського енергетичного підходу уявна частина матричного елемента (2.17) напряму пов'язана з радіаційною шириною (див. [1]) або ймовірністю радіаційного переходу:

$$gf = \lambda_g^2 \cdot \Gamma_{\alpha_e} / 6.67 \cdot 10^{15} , \qquad (2.20)$$

де *g* – ступінь виродження,

 λ - довжина хвиль переходу в ангстремах (Å).

Далі підстановка розкладення (2.19) у матричний елемент міжелектронної взаємодії (уявна частина) приводить до виразу [1]:

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]_{2}^{1/2} \sum_{\lambda \mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \operatorname{Im} Q_{\lambda}(1234);$$
$$Q_{\lambda} = Q_{\lambda}^{\operatorname{Qul}} + Q_{\lambda}^{\operatorname{Br}}, \qquad (2.21)$$

де величини Q_{λ}^{Qul} и Q_{λ}^{Br} відповідають розбиттю «потенціалу» на кулонівську, $\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}}$ та брейтовську — $\frac{\sin|\omega|r_{12}\alpha_1\alpha_2}{r_{12}}$ частини. Кулонівська частина Q_{λ}^{Qul} в (2.21) виражається через радіальні інтеграли R_{λ} та кутові коефіцієнти S_{λ} :

$$\operatorname{Im} Q_{\lambda}^{\operatorname{Qul}} = \frac{1}{Z} \operatorname{Im} \left\{ R_{l} (1243) S_{\lambda} (1243) + R_{l} (\widetilde{1} \ 24\widetilde{3}) S_{\lambda} (\widetilde{1} \ 24\widetilde{3}) + R_{l} (\widetilde{1} \ \widetilde{2}4\widetilde{3}) S_{\lambda} (\widetilde{1} \ \widetilde{2}4\widetilde{3}) + R_{l} (\widetilde{1} \ \widetilde{2}4\widetilde{3}) S_{\lambda} (\widetilde{1} \ \widetilde{2}4\widetilde{3}) \right\},$$

$$(2.22)$$

де позначення 1 (2,3,4) відповідають більшій компоненті f діраковської функції електрона, а $\tilde{1}(\tilde{2},\tilde{3},\tilde{4})$ - малій компоненті g діраковської функції. Для прикладу наведемо визначення одного з радіальних інтегралів в (2.22):

$$R_{\lambda}(1243) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1(r_1) f_3(r_1) f_2(r_2) f_4(r_2) Z_{\lambda}^{(1)}(r_2) Z_{\lambda}^{(1)}(r_2), \quad (2.23)$$

де *f* – більша компонента радіальної частини діраковської функції одноелектронного стану, а функція *Z* виражається через беселевські функції:

$$Z_{\lambda}^{(1)} = \left[\frac{2}{|\omega_{13}|\alpha Z}\right]^{\lambda+\frac{1}{2}} \frac{J_{\lambda+\frac{1}{2}}(\alpha|\omega_{13}|r)}{r^{\lambda}\Gamma(\lambda+\frac{3}{2})}.$$
(2.24)

У нерелятивістській границі у (2.22) залишається тільки перший доданок, який визначається через великі компоненти *f* одноелектронних функцій Дірака. В цьому доданку уявна частина радіального інтеграла

$$\operatorname{Im} R_{\lambda}(1243) = \frac{\pi(\lambda)}{2} \left(\frac{|\omega_{13}|Z\alpha}{2} \right)^{(\lambda)} \left| \Gamma(\lambda + \frac{3}{2})^2 X_{\lambda}(13) X_{\lambda}(24) \right|$$
$$X_{\lambda}(12) = \int dr r^{2\lambda+1} Z_{\lambda}^{(1)} f_{n_l l_1 j_1} f_{n_2 l_2 j_2}.$$

Інші доданки у (2.22) включають малі компоненти функцій Дірака, причому знак «~»позначує, що в (2.22) більшу радіальну компоненту f_i треба замінити на малу g_i , а в кутових множниках (див. нижче визначення) l_i треба замінити на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\mathfrak{a}_1 > 0$, та $l_i + 1$ для $\mathfrak{a}_i < 0$.

В [6, 121] поданий детальний аналіз різноманітних властивостей функції, включаючи аналіз асимптотик. При розрахунку дійсної частини радіальних інтегралів вводиться аналогічна функція:

$$Z_{\lambda}^{(2)} = \left[\frac{|\omega_{13}|\alpha Z}{2}\right]^{\lambda + \frac{1}{2}} J_{-\lambda - \frac{1}{2}}(\alpha |\omega_{13}|r) |(\lambda + \frac{3}{2})|r^{\lambda + 1}.$$
(2.25)

Відмітимо, що для функцій (2.24) та (2.25) характерна асимптотика $\rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$, та відповідно їх відмінність від 1 пов'язана виключно з ефектом спізнення. Кутовий множник у (2.22) має тільки дійсну частину:

$$S_{\lambda}(1243) = \{\lambda l_1 l_3\} \{\lambda l_2 l_4\} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

де $\{\lambda l_1 l_3\}$ вказує, що $\lambda + l_1 + l_3 -$ парне число.

Далі розглянемо брейтівську частину матричного елемента (2.21). Треба підкреслити, що для важких атомів та багатозарядних іонів внесок брейтівських членів може бути достатньо суттєвим [99,17,23,129-131]. Згідно з [1], брейтівська частина величини *Q* визначається наступним виразом:

$$Q_{\lambda}^{\mathrm{Br}} = Q_{\lambda,\lambda-1}^{\mathrm{Br}} + Q_{\lambda,\lambda}^{\mathrm{Br}} + Q_{\lambda,\lambda+1}^{\mathrm{Br}}, \qquad (2.27)$$

де відповідні внески визначаються як:

$$\operatorname{Im} Q_{\lambda}^{\operatorname{Br}} = \frac{1}{Z} \operatorname{Im} \left\{ R_{l} \left(12\widetilde{4}\widetilde{3} \right) S_{\lambda}^{l} \left(12\widetilde{4}\widetilde{3} \right) + R_{l} \left(\widetilde{1}\widetilde{2}43 \right) S_{\lambda}^{l} \left(1243 \right) + R_{l} \left(\widetilde{1}\widetilde{2}\widetilde{4}3 \right) S_{\lambda}^{l} \left(\widetilde{1}\widetilde{2}\widetilde{4}3 \right) + R_{l} \left(\widetilde{1}\widetilde{2}\widetilde{4}\widetilde{3} \right) S_{\lambda}^{l} \left(\widetilde{1}\widetilde{2}\widetilde{4}\widetilde{3} \right) \right\}.$$

$$(2.28)$$

)

Кутова частина брейтівського матричного елементу *S*(1243) виражається стандартним чином через *3j* символи та при цьому факторізіруется за індексами відповідно 1, 3 и 2, 4:

$$S_{\lambda}^{(1)}(1243) = (\lambda)(-1)^{\lambda+l+1}S_{\lambda}^{l}(13)S_{\lambda}^{l}(24),$$

$$S_{\lambda}^{(1)}(13) = (-1)^{l_{3}+j_{3}}(ll_{1}l_{3})\begin{pmatrix} j_{3} & j_{1} & \lambda \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda+1)}} \times \left[(-1)^{j_{1}+j_{3}+\lambda} (j_{3}) + (j_{1}) \right] \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} + (-1)^{l_{3}+j_{1}+\lambda} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\}.$$
(2.29)

Фігуруючи в (2.26) та (2.29) 3*j* символи визначаються відомими аналітичними формулами. Більш детальна інформація представлена в цілому ряді відомих монографій [3,14,24].

На закінчення цього підрозділу наведемо тепер явні вирази визначаючі ймовірності λ-польного розпаду збурених атомних станів. Оскільки мета роботи полягає в побудуванні нової калібровочно - інваріантної теорії заборонених (тобто М1, Е2 и т.н.) радіаційних переходів, наведемо наступні вирази, акцентуючи увагу на шукані переходи. Повна ймовірність λ -польного переходу уявляється як сума електричної (електричне мультипольне розкладення) $A_{\lambda}^{E} = P_{\lambda}^{E}$ та магнітної (магнітне мультипольне розкладення) $A_{\lambda}^{M} = P_{\lambda}^{M}$ частин. Можна, показати, що y випадку розпаду одноквазічастинкового атомної стану системи відповідні вирази для ймовірностей електричного та магнітного λ -польного переходу $\gamma \rightarrow \delta$ дорівнюють:

$$P_{\lambda}^{E}(\gamma \to \delta) = 2(2j+1)Q_{\lambda}^{E}(\gamma\delta;\gamma\delta) \qquad Q_{\lambda}^{E} = Q_{\lambda}^{Cul} + Q_{\lambda,\lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda,\lambda+1}^{Br}$$

$$P_{\lambda}^{M}(\gamma \to \delta) = 2(2j+1)Q_{\lambda}^{M}(\gamma\delta;\gamma\delta) \qquad Q_{\lambda}^{M} = Q_{\lambda,\lambda}^{Br}.$$
(2.30)

Як вказано у розділі 1.2, при електричному λ -польному переході парність стану змінюється на λ одиниць, а при магнітному λ -польному переході – на (λ +1) одиниць. При чисельних розрахунках звично розкладають ймовірність переходу у ряді по $\alpha\omega$ [33,34,43,75-77]. З точністю до першого члену цього розкладу

$$Q_{\lambda}^{Qul} \approx (\alpha \omega)^{(\lambda)}, \ Q_{\lambda,\lambda-1}^{Br} \approx (\alpha \omega)^{\lambda}, \ Q_{\lambda,\lambda}^{Br} \approx (\alpha \omega)^{\lambda+3}, \ Q_{\lambda,\lambda+1} \approx (\alpha \omega)^{\lambda+5}$$

У випадку більш складного двохквазічастинкового стану для ймовірності λ -польного одноквазічастинкового переходу, наприклад, $j_1 j_2 [J] \rightarrow \overline{j}_1 j_2 [\overline{J}]$ маємо:

$$P(\lambda \mid j_1 j_2 [J], \bar{j}_1 j_2 [\bar{J}]) = (\bar{J}) \begin{cases} \lambda ... J ... \bar{J} \\ j_2 ... \bar{j}_1 ... j_1 \end{cases} P(\lambda \mid 1 \bar{1})(\bar{j}_1), \quad (2.31)$$

де електрична та магнітна частини $P(\lambda | 1\overline{1})$ визначені вище. Слід, однак, замітити, що звичайно стани двохквазічастинкових атомних систем, які відрізняються тільки значенням $j_1 j_2$, являються майже виродженими. Більш того, для цікавих нас в подальшому достатньо складних в теоретичному відношенні та вкрай важливих з практичної точки зору багатозарядних іонів спектри містять, як правило, конгломерати ліній, відповідних майже виродженим атомним станам [1,3,10-22,35-65,76-131]. Звичайно, це приводить до поганої збіжності

ряду ТЗ [1]. Для отримання комплексних енергій у рамках ТЗ для майже вироджених станів необхідна діагоналізация комплексної секулярної матриці М (2.3) між станами (2.6), (2.7). Звичайно, у нижчому, наприклад, другому порядку ТЗ, секулярна матриця співпадає із звичайною енергетичною матрицею. Повна реалізація процедури діагоналізації комплексної матриці М пов'язана з відомими обчислювальними труднощами, однак, як відомо, практично без втрат точності обчислювання шукана процедура може бути значно спрощена [119-121]. У теорії спектрів багато електронних атомів добре відома процедура переходу від уявлення чистої ј-ј схеми зв'язку моментів до уявлення проміжної схеми зв'язку, яка дозволяє здолати вказану проблему. Цій підхід реалізується діагоналізаціею комплексної секулярної матриці *M=ReM+iImM*, обчисленою між групою майже вироджених станів з однаковим набором квантових чисел $n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, J.$ Тоді:

$$\operatorname{Im} M_{J}(mm') = \sum_{j_{1}, j_{2}, j_{1}, j_{2}} C_{J}^{*}(j_{1}j_{2}m) \operatorname{Im} M_{J}(j_{1}j_{2}j_{1}j_{2}) C_{J}(j_{1}j_{2}m')$$
(2.32)

де $M_J(j_1j_2j_1j_2), M_J(mm')$ - відповідні секулярні матриці в старому уявленні з jj схемою пов'язані одноелектронними моментами та в новому уявленні з проміжною схемою з'вязку.

Коефіцієнти С_J у нижчому порядку ТЗ визначаються діагоналізацією енергетичної матриці другого порядку. Матриця M_J розраховується за тими же діаграмами, що й ΔE . Повна ширина рівня mJ тоді дорівнює Im $M_J(mm')$.

Матриці $M_J(j_1j_2j_1j_2)$ та $M_J(mm')$ можуть бути представлені в вигляді суми за квантовими числами віртуальних одноквазічастинкових станів, виділяючи в якої члени з відповідною електронною конфігурацією j_{1,j_2} можна, згідно (2.32) отримати сумарну ймовірність переходу станів *mJ* в стан з той же електронною конфігурацією. 2.2 Квантово - електродинамічна теорія збурень для багато електронного релятивістського атома

2.2.1 Вхідні зауваження. Гамільтоніан релятивістського атома

У попередньому розділі ми виклали теорію обчислення ймовірностей радіаційних λ-польних електричних та магнітних переходів, для повного завершення якої необхідно визначитися з гамільтоніаном релятивістського багато електронного атому, частково, методом обчислення релятивістських функцій електрону. Для цієї мети ми використаємося хвильових добре розвинутими та апробованими у різних задачах атомної оптики та спектроскопії апаратом формально точної КЕД ТЗ. Повне викладання формальної процедури будування формалізму КЕД ТЗ, його діаграматизації, можна знайти у класичних посиланнях [1,3,14]. Відмітимо, що мастерною формулою для обчислення здвигів атомних рівнів виявляється адіабатична формула Гелл-Мана та Лоу з електродинамічною матрицею розсіювання, яка приводить як і вище до рядів ТЗ по сталій зв'язку для здвигів ΔE .

Як і в [1], будемо описувати релятивістську багато електронну атомну систему рівнянням Дірака з релятивістським гамільтоніаном (атомні од.):

$$H = \sum_{i} h(r_i) + \sum_{i>j} V(r_i r_j)$$
(2.33)

де *h*(*r*) – гамільтоніан Дірака для електрона у полі точкового ядра, а релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії

$$V(r_i r_j) = exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(I - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}, \qquad (2.34)$$

де, як звичай, α_i, α_j – матриці Дірака;

 ω_{ij} – частота атомного переходу.

У [1,3,14] в ядерному потенціалі враховувався ефект кінцевого розміру ядра. Оскільки добре відомо [1,3,5,17,23], що внесок цього ефекту у величини ймовірностей заборонених переходів вкрай малі, ми у подальшому працюємо з ядерним потенціалом точкового ядра с зарядом Z.

Також в подальшому при обчисленні ймовірностей радіаційних переходів у атомах та іонах ми не будемо враховувати радіаційні поправки типу лембовського здвигу та поляризації вакууму, так як бачимо наскільки малі шукані вклади в значення ймовірностей. Таким чином, у використаному апараті релятивістської ТЗ фактично будуть враховані одноелектронні релятивістські поправки (окрім здвигу Лемба), а двохелектронні – з точністю до членів $\approx (\alpha Z)^2 (\alpha$ структури). Альтернативні формалізму КЕД T3 -стала тонкої схеми [14,30,31,47,69,105-107,132-140]. реалізовувалась В багатьох роботах Гамільтоніан нульового наближення *H*₀ та оператор збурення далі можна записати в вигляді:

$$H_{0} = \sum_{i} a_{i}^{+} a_{i} E_{i}$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{ij} a_{i}^{+} a_{j} V_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_{i}^{+} a_{j}^{+} a_{k} a_{l}$$

$$V_{ij} = \int d\vec{r} \cdot \varphi_{i}(\vec{r}) [-V_{C}(r)] \cdot \varphi(\vec{r})$$

$$V_{ijkl} = \iint d\vec{r}_{1} d\vec{r}_{2} \ \varphi(\vec{r}_{1}) \varphi(\vec{r}_{2}) V(r_{1}r_{2}) \varphi_{k}(\vec{r}_{2}) \varphi_{l}(\vec{r}_{1}),$$
(2.35)

де $\phi(\vec{r})$ – одноелектронні функції (біспінори),

 E_i – одноелектронні енергії,

V_C - самоузгоджений потенціал центрального поля.

B подальшому у якості самоузгодженого потенціалу ми будемо використовувати або модифікованний потенціал ДФ, або ab initio ефективний потенціал типу Іванова-Івановой [46,66], (оба з ab initio визначним за допомогою оптимізованих параметрів b) та одночасною реалізацією КЕД процедури мінімізації калібровочно - неінваріантного вклад в радіаційну ширину рівня, при генерації оптимізованих базисів релятивістських хвильових функцій (ab initio схема визначення b) та перевірки співпадання значень ймовірностей заборонених переходів, розрахованих за формулами оператора швидкості та довжини (т.ч. фотонний пропагатор буде обиратися в кулонівській калібровці та калібровці Бабушкіна) [1,2,4,152]. Ефективний потенціал Іванова-Івановой V_C звичайно представляють у вигляді сум потенціалів, імітуючи вклад К, L, М... оболонок *N* – електронного атомного остова [2]:

$$v_{K} = 2[1 - e^{-2rb}(1 + rb)]/Zr$$

$$v_{L} = 8[1 - e^{-br}(1 + 0.75br + 0.25b^{2}r^{2} + 0.0625b^{3}r^{3})]/Zr$$

$$v_{M} = (N - 10)[1 - 1/(1 + br + b^{2}r^{2} + b^{3}r^{3})]/Zr$$
(2.36)

Потенціал (2.36) використовується для іонів з різним N [1]. Важливо відзначити, що шуканий потенціал $V_{\rm C}$ має правильні асимптотики: $V_{\rm C} \rightarrow \text{const}$, $dV_C/dr \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$, $V_{\rm C} \rightarrow N/rZ$ при $r \rightarrow \infty$. Правильна поведінка $V_{\rm C}$ при $r \rightarrow 0$ дуже важлива при визначені положення вузлів орбіталей квазічастинок і обчисленні радіаційної ширини рівнів (імовірності радіаційних переходів).

Принципова новизна нашої роботи в порівнянні із згаданими роботами, а також альтернативними класичним методами [1,3,5,14,17,23,31,47,62,70,105-107,132-150] полягає у використанні вперше сконструйованих таким чином

оптимізованих базисів релятивістських біспінорів в завданні обчислення імовірності заборонених магнітного дипольного, електричного квадрупольного і так далі радіаційних переходів в спектрах досить складних важких атомів і іонів ряду ізоелектронних серій, зрозуміло, з послідовним прецизійним врахуванням релятивістських і кореляційних поправок.

2.2.2 Базис релятивістських діраковських функцій нульового наближення КЕД теорії збурень

Одноквазічастинкові релятивістські хвильові функції визначаються як вирішення одноквазічастинкового релятивістського рівняння Діраку. Діраковські біспінори, як завжди, представляються у вигляді [19]:

$$\Psi_{jlm}(r) = \begin{pmatrix} \varphi_{jlm}(r) \\ \chi_{jlm}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm}(r) \\ G(r)\Omega_{jlm}(r) \end{pmatrix}, \qquad (2.37)$$

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

 $l=j\pm \frac{1}{2}, l'=2j-1,$

F(r) і *G(r)* – радіальні функції Діраку, які задовольняють системі звичайних диференціальних рівнянь:

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

$$\frac{\partial G}{\partial r} + (1-\chi)\frac{G}{r} + (\varepsilon - m - V)F = 0,$$
 (2.38)

де F і G – велика і мала компоненти;

V(r) – самоузгоджений потенціал точкового ядра,

 χ - квантове число Діраку (стала тонкої структури тут $\alpha = 1$).

Вигляд радіальних функцій Діраку, звичайно, залежить від вигляду потенціалу V(r). Далі, як завжди, для того, щоб уникнути відомих труднощів при чисельній інтеграції рівнянь в області $r \rightarrow 0$, виділяємо в F і G головну степеневу залежність при малих r:

$$f = Fr^{1-|\chi|}, \ g = Gr^{1-|\chi|}$$
 (2.39)

Тоді рівняння Діраку для компонент *F* і *G* перетворяться в нову систему (нижче використовуємо кулонівські одиниці (С.u.), пов'язані із звичайними атомними одиницями (a.u): 1 С.u. довжини = 1 a.u.*Z*; 1 С.u. енергії = 1 a.u. Z^2):

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha ZVg - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g$$
$$g' = (\chi - |\chi|)g/r - \alpha ZVf + \alpha ZE_{n\chi}f, \qquad (2.40)$$

де $E_{n\chi}$ - одноелектронна енергія (без врахування енергії спокою).

Граничні значення коректних рішень визначаються першими членами розкладання функцій в ряд Тейлора [3,4]:

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

Умова $f, g \to 0$ при $r \to \infty$ визначає квантовані енергії Е. Рівняння (2.39) вирішуються чисельно методом Рунге-Кутта.

2.2.3 Діаграматизація ряду ТЗ: основні фейнманівськи діаграми для секулярної матриці. Поправка першого порядку атомної теорії збурень

Розглянемо основні класи фейнманівських діаграм, які важливі для задачі обчислення ймовірності заборонених атомних переходів. Детальний виклад принципів діаграматизації ряду ТЗ можна знайти, наприклад, в [1-4]. На рис.2.3 зображені основні діаграми першого порядку атомної ТЗ.



Рисунок 2.3 - Діаграми першого порядку атомної ТЗ

Стандартні правила опису зводяться коротко до наступного [3]: діаграми без кінцевих ліній - вакуумні, з однією парою кінцевих ліній – одноквазічастинкові 1QP, з двома парами – двухквазічастинкові 2QР. відповідає міжелектронній взаємодії V(r₁r₂), хвиляста – Пунктирна лінія одноелектронному потенціалу $V_c(r)$. Кінцеві лінії, направлені зліва направо, вакансію в остові, справа наліво – електрон над остовом. позначають Секулярна матриця розраховується в просторі функцій, що описують стан з електронів і вакансій. Внутрішні електронні лінії, одним числом ШО починаються і кінчаються на одній пунктирній лінії (діаграми c,d,e,f на рис.2.3) відповідають електронам остову. На рис.2.4 дані діаграми 2-го

порядку, що описують безпосередню (без участі остову) взаємодію частинок: 2.4а описує взаємодію 2-х QP, 2.4b – взаємодію 3-х QP і т.і. На рис.2.5 зображені пряма поляризаційна діаграма, що описує поляризаційну взаємодію двох QP через поляризований остов (а), а також діаграми, що враховують обмінну взаємодію QP и електронів остову.



Рисунок 2.4 - Діаграми другого порядку: безпосередня взаємодія двох (трьох) QP.



Рисунок 2.5 - Діаграми другого порядку, що враховують обмінну і поляризаційну взаємодію QP і електронів остову.

У загальному випадку секулярну матрицю можна представити у вигляді суми (2.2). Відзначимо, що у вираженні (2.2) $M^{(0)}$ визначається вкладом вакуумних діаграм, $M^{(1)}$ —"1"- квазічастинкових, $M^{(2)}$ —"2"-квазічастинкових і т.і.

Наприклад, для випадку системи з двома QP над остовом заповнених електронних оболонок [3,14]:

$$M_{ii}^{(1)} = -E(n_1 l_1 j_1) - E(n_2 l_2 j_2)$$

Згідно [3,14], у першому порядку атомної ТЗ немає діаграм, що містять компенсаційний член - $V_C(r)$ повного обурення V_{int} і розраховувати слід лише матричні елементи "оператора" (2.34) між 2QP (або 3QP). Стандартний вклад першого порядку в $M^{(2)}$ має вигляд [3]:

$$M_{1}^{(2)} = \left\langle n_{1}l_{1}j_{1} \quad n_{2}l_{2}j_{2}[J]|V_{int}|n_{4}l_{4}j_{4} \quad n_{3}l_{3}j_{3}[J] \right\rangle =$$

$$= P_{1}P_{2}(-1)^{1+j_{2}+j_{4}+J} \left[(2j_{1}+1)(2j_{2}+1)(2j_{3}+1)(2j_{4}+1) \right]^{1/2} \times \qquad (2.41)$$

$$\times \sum_{i,k} \sum_{a} \left\{ \frac{j_{i}j_{k}J}{j_{2}j_{1}a} \right\} \left(\delta_{i,3}\delta_{k,4} + (-1)^{J}\delta_{i,4}\delta_{k,3} \right) \cdot Q_{a},$$

дe

$$P_{1} = \begin{cases} 1 & \text{при} & n_{1}l_{1}j_{1} \neq n_{2}l_{2}j_{2} \\ \frac{1}{2} & \text{при} & n_{1}l_{1}j_{1} = n_{2}l_{2}j_{2} \end{cases}, \quad P_{2} = \begin{cases} 1 & \text{при} & n_{3}l_{3}j_{3} \neq n_{4}l_{4}j_{4} \\ \frac{1}{2} & \text{при} & n_{3}l_{3}j_{3} = n_{4}l_{4}j_{4} \end{cases},$$

а величина Q_a визначена вище (див. формули в подразд. 1.2).

2.2.4 Поправки другого та вищих порядків релятивістської атомної теорії збурень

Багаточисельний досвід обчислення ймовірності радіаційних переходів [1,3,5,14,17,23,62,142-150] показує, що для релятивістських багато електронних атомних систем прецизійне визначення шуканої ймовірності можливе лише при коректному, максимально повному врахуванні як релятивістських, так і багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. У стандартних версіях методу ДФ зазвичай використовується багато конфігураційне наближення, в рамках якого послідовно проводиться досить трудомістка процедура накладення додаткових станів в кожному з елементів секулярної матриці (2.2) [142-150]. Шукана процедура передбачає як введення багаточисельних нових збуджених станів для врахування в секулярній матриці, так і введення поправок вищих порядків в кожний з матричних елементів із збереженням розміру енергетичної матриці. Зокрема, у випадку N-QP атомних систем стани, що додатково накладаються, зазвичай включають як стани із збудженим остовом (тобто включається явно поляризаційна взаємодія між QP) так і станів із замороженим віртуально збудженими QP (так звані поправки на екранування, остовом і відповідні вкладам сходових діаграм на рис.2.4, 2.5).

У нашій теорії ми надалі скористаємося добре відпрацьованими процедурами врахування станів обох типів, що додатково накладаються. Зокрема, слідуючи [66,121] див. також [1,3,14], вклад основних поляризаційних діаграм (другого і вищих порядків) в енергію атома представимо у вигляді:

$$E(A) = \iint dr_1 dr_2 \cdot \rho_1(r_1) \cdot V^d_{pol}(r_1 r_2) \cdot \rho_2(r_2)$$
(2.42)

з ефективною двухквазічастинковою взаємодією [119]:

$$V_{pol}^{d}(r_{1}r_{2}) = X \left\{ \int \frac{dr'(\rho_{c}^{(0)}(r'))^{l/3} \theta(r')}{|r_{1} - r'| \cdot |r' - r_{2}|} - \int \frac{dr'(\rho_{c}^{(0)}(r'))^{l/3} \theta(r')}{|r_{1} - r'|} \int \frac{dr''(\rho_{c}^{(0)}(r''))^{l/3} \theta(r'')}{|r'' - r_{2}|} / \left\langle \left(\rho_{c}^{(0)}\right)^{l/3} \right\rangle \right\}$$
(2.43)
$$\left\langle \left(\rho_{c}^{(0)}\right)^{l/3} \right\rangle = \int dr \left(\rho_{c}^{(0)}(r)\right)^{l/3} \theta(r)$$
$$\theta(r) = \left\{ 1 + \left[3\pi^{2} \cdot \rho_{c}^{(0)}(r) \right]^{2/3} / c^{2} \right\}^{1/2},$$

де ρ_c^0 - електронна щільність остову (без урахування QP),

Х – чисельний коефіцієнт,

с – швидкість світла.

Аналогічне наближене потенційне уявлення може бути отримане для обмінної поляризаційної взаємодії квазічастинок, зокрема, відповідний обміннополяризаційний потенціал:

$$V_{pol}^{ex}(r_{1}, r_{2}) = -\frac{X}{2}(0,375)^{1/3} \times \left\{ \frac{\left[\left(\rho_{c}^{(0)}(r_{1}) \right)^{1/3} + \left(\rho_{c}^{(0)}(r_{2}) \right)^{1/3} \right]}{|r_{1} - r_{2}|} - \left(\int dr \cdot \left(\rho_{c}^{(0)}(r) \right)^{1/3} \right)^{-1} \times \right.$$

$$\times \int dr' \left(\rho_{c}^{(0)}(r') \right)^{-2/3} \cdot \left[\frac{\left(\rho_{c}^{(0)}(r_{1}) \right)^{-1/3}}{|r_{1} - r'|} + \frac{\left(\rho_{c}^{(0)}(r_{2}) \right)^{-1/3}}{|r' - r_{2}|} \right] \right\}.$$

$$(2.44)$$

Детальне виведення відповідних виразів дано в оригінальних роботах [66,119]; при цьому важливою є та обставина, що кутові частини матричних елементів операторів $\exp(i|\omega|r_{12})/r_{12}$, $V_{pol}(r_1r_2)$ збігаються. Згідно [6,119], чисельна процедура визначення (2.42), (2.43) зводиться таким чином до обчислення поправок до радіальних інтегралів вигляду (2.23):

$$R_{\lambda}^{d} = \iiint dr_{1}dr_{2}dr_{3}r_{1}^{2}r_{2}^{2}r_{3}^{2}\rho_{1}(r_{1})\widetilde{u}_{\lambda}(r_{1}r_{3})\rho_{c}^{1/3}(r_{3})\widetilde{u}_{\lambda}(r_{3}r_{2})\rho_{2}(r_{2}), \quad (2.45)$$

що в рамках методу диференціальних рівнянь [1,3], у свою чергу, зводиться до вирішення системи диференціальних рівнянь з відомими граничними умовами при r=0. Наприклад, інтеграл (2.45) можна представити у вигляді:

$$R^d = \lim_{r \to \infty} Y(r),$$

де функція Y(r) визначається із рішення системи диференціальних рівнянь з нульовими граничними умовами:

$$Y_{1}' = \left(\rho_{1} r^{2} Z_{\lambda}^{(1)} - (\lambda + 1)Y_{1}\right)/r;$$

$$Y_{2}' = \left(\rho_{2} r^{2} Z_{\lambda}^{(1)} - (\lambda + 1)Y_{2}\right)/r;$$

$$Y_{3}' = \left(\rho_{c}^{1/3} r^{2} Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(1)} - (2\lambda + 1)Y_{3}\right)/r;$$

$$Y_{4}' = \left(\rho_{2} r^{2} Y_{3} + \rho_{c}^{1/3} Y_{2} Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(2)} - (\lambda + 1)Y_{4}\right)/r,$$

$$Y_{5}' = \left(\rho_{1} r^{2} Y_{3} + \rho_{c}^{1/3} Y_{1} Z_{\lambda}^{(1)} Z_{\lambda}^{(2)} - (\lambda + 1)Y_{5}\right)/r;$$

$$Y'(r) = \left(\rho_{1} r^{2} Y_{4} + \rho_{2} r^{2} Y_{5} + \rho_{c}^{1/3} r^{2} Y_{2} Z_{\lambda}^{(2)}\right)Z_{\lambda}^{(2)}$$

Отже, фактично введення ефективного поляризаційного V_{pol} дозволяє звести проблему до задачі про 2QP з точністю до другого порядку ТЗ. Ще один важливий кореляційний ефект - враження екранування зовнішніх QP можна справити, слідуючи роботам [66, 119], шляхом додавання до потенціалу взаємодії зовнішньої QP з остовом в гамільтоніане нульового наближення додаткового екранованого потенціалу, що виникає від присутності другої QP (квазічастинок):

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

де $r_>$ – більше з r і r'. Розрахунок показав (див. [66]), що потенціал W для будьякого стану екрануючої частинки добре апроксимується вираженням:

$$W(r|g)=g/Z(3+gr)/(3+2gr+2g^2r^2),$$

де $g = Z/n^2 (Z+N),$

N – число електронів в остові.

Потенціали W(r), W(r|g) асимптотично збігаються при $r \rightarrow \infty$, а для

$$g = \int \frac{dr'}{r'} \Psi_{nlj}^2$$

і при $r \rightarrow 0$. Параметр g може бути знайдений з умови мінімізації основного стану. Включення W(r|g) в нульовий порядок дозволяє ефективно врахувати діаграми сходового типа всіх порядків ТЗ (див. рис.2.3-2.5). Вся процедура включає наступні етапи:

1) для кожного стану зовнішньої частинки nlj вирішується рівняння Діраку з гамільтоніаном H_0 з потенціалом $V_c(r)$;

2) в одноелектронне рівняння для кожної зовнішньої частинки вводиться потенціал *W*(*r*|*g*); знаходяться енергії - нові орбіталі. Остаточний вигляд потенціалу нульового наближення

$$V_{\rm c}(r_1) + V_{\rm c}(r_2) + W(r_1|g) + W(r_2|g) - Z/r_1 - Z/r_2$$
,

а обурення

$$e^{i\omega r_{12}}/r_{12}+V_{\text{pol}}(r_1r_2)-[V_c(r_1)+V_c(r_2)+W(r_1|g)+W(r_2|g)];$$

3) з новими орбіталями розраховуються радіальні інтеграли і енергетична матриця; з діагональних елементів енергетичної матриці

$$< n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 [J] \frac{e^{i\omega r_{12}}}{r_{12}} n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 [J] >$$

віднімається величина

$$< n_1 l_1 j_1 |W(r|g)| n_1 l_1 j_1 > + < n_2 l_2 j_2 |W(r|g)| n_2 l_2 j_2 >,$$

тобто матричний елемент від другого компенсуючого члена в операторові обурення. Вся процедура розрахунку практично повністю враховує поправку другого порядку $\Delta E^{(2)}$, а також деяку частину поправок вищих порядків ТЗ. Енергія станів представляється в результаті у вигляді ряду КЕД ТЗ. Розрахунок із самого початку проводиться в представленні јј-схемі скріплення одноелектронних моментів, а перехід до реальної схеми здійснюється, як завжди, діагоналізаціею енергетичної матриці М.

Повна система рівнянь задачі включає також рівняння для релятивістських 1QP радіальних діраковських хвильових функцій і вирішується методом Рунге-Кутта четвертого порядку [1,3,4,119]. Завершальний етап побудови послідовної калібрувально-інваріантної релятивістської теорії обчислення імовірності заборонених радіаційних переходів в спектрах важких атомів і багатозарядних іонів полягає в імплементації КЕД процедури побудови оптимізованих базисів релятивістських діраковських функцій.

2.2.5 Матричні елементи оператора збурення на хвильових функціях 3QP станів

У цьому підрозділі ми приведемо вираження для матричних елементів оператора збурення (2.35), побудовані на хвильових функціях 3QP станів. Дані вирази виведені в роботах [51,135], де описані принцип виводу і визначення шуканих величин. Вказані матричні елементи фактично виражаються через матричні елементи, розраховані між 2QP станами, и звичайно виявляються різними залежно від того, відрізняються чи ні квантові числа в кожному з обкладань. Приведемо вирази матричного елементу 1-го порядку для трьох можливих типів трьох-квазічастинкових обкладань: однорідно-однорідної, однорідно-неоднорідної и неоднорідно-неоднорідної електронних конфігурацій, слідуючи роботам [51,135]. Вираження для матричного елементу при цьому розбивається на два доданків: перше містить взаємодію електрон-електрон, друге – взаємодію електрон-вакансія. У приведених нижче формулах γ означає трійку квантових чисел hlj, показник (-1) відноситься до вакансії, риса над буквою позначає квантові числа кінцевого стану.

Отже, для матричного елементу однорідно-однорідної конфігурації

$$\left\langle \gamma_1^2 (\boldsymbol{J}_{12}) \gamma_3^{-1} \boldsymbol{J} | \boldsymbol{M} | \bar{\gamma}_1^2 (\bar{\boldsymbol{J}}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} \boldsymbol{J} \right\rangle$$

маємо:

а) Електрон-електронна частина

$$\left\langle \gamma_1^2 ig(J_{12} ig) M ig| ar{\gamma}_1^2 ig(J_{12} ig) \right\rangle \delta ig(\gamma_3, ar{\gamma}_3 ig) \delta ig(J_{12}, ar{J}_{12} ig)$$

б) Електрон - вакансная частина

$$2\sum_{J_{12}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{12}) | M | \gamma_1 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{12}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + \bar{j}_1} * \begin{cases} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{cases} \begin{pmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_1 \end{pmatrix} \rangle.$$

Матричний елемент типу

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

однорідно-неоднорідної електронної конфігурації містить два доданків:

а) електрон - електронна частина:

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

де $\pi_{I} = (-1)^{2};$

б) електрон-вакансная частина:

$$\begin{split} &\delta(\pi_{13},\bar{\pi}_{13})\sum_{J_{13}} \left\langle \gamma_{1}\gamma_{3}^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{1}\bar{\gamma}_{3}^{-1}(J_{13}) \right\rangle \delta(\gamma_{1}\bar{\gamma}_{2}) (-1)^{J_{12}+\bar{J}_{12}+\bar{J}_{3}+\bar{J}_{3}+\bar{J}_{1}+\bar{J}_{2}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{1} & j_{1} \end{cases} \left\{ \bar{J}_{12} & \bar{j}_{3} & J \\ J_{13} & \bar{j}_{1} & \bar{j}_{2} \end{cases} + \\ &+ \delta(\pi_{13},\bar{\pi}_{23}) \sum_{J_{13}} \left\langle \gamma_{1}\gamma_{3}^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{1}\bar{\gamma}_{3}^{-1}(J_{13}) \right\rangle \delta(\gamma_{1}\bar{\gamma}_{1}) (-1)^{J_{12}+\bar{J}_{3}+\bar{J}_{3}+J_{1}+J_{2}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{1} & j_{1} \end{cases} \left\{ \bar{J}_{12} & \bar{j}_{3} & J \\ J_{13} & \bar{j}_{2} & \bar{j}_{1} \end{cases} * \\ &* (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})} \end{split}$$

де $\pi_{ij} = (-1)^{\ell_i + \ell_j};$

і нарешті, для неоднорідно-неоднорідної електронної конфігурації

$$\left\langle \gamma_1 \gamma_2 (J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \overline{\gamma}_1 \overline{\gamma}_2 (\overline{J}_{12}) \overline{\gamma}_3^{-1} J \right\rangle$$

маємо:

а) електрон- електронна частина:

$$\langle \gamma_1 \gamma_2 (J_{12}) | M | \overline{\gamma}_1 \overline{\gamma}_2 (J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \overline{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \overline{J}_{12}),$$

б) електрон-вакансная частина:

$$\begin{split} \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{1} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{2} \bar{\gamma}_{2}) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + \bar{J}_{3} + \bar{I}_{3}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{2} & j_{1} \end{cases} \begin{pmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{J}_{3} & J \\ J_{13} & \bar{J}_{2} & \bar{J}_{1} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{2} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{2} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{1} \bar{\gamma}_{1}) (-1)^{J_{2} + j_{3} + \bar{j}_{2} + \bar{j}_{3}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{1} & j_{2} \end{cases} \langle J_{13} & \bar{J}_{1} & \bar{J}_{2} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{2} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{2} \bar{\gamma}_{1}) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + \bar{J}_{3} + \bar{J}_{2} + j_{2}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{1} & j_{2} \end{cases} \langle J_{13} & J \\ J_{13} & J_{1} & J_{2} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{2} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{1} \bar{\gamma}_{2}) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + \bar{J}_{3} + \bar{J}_{2} + j_{2}} * \begin{cases} J_{12} & j_{3} & J \\ J_{13} & j_{2} & J_{1} \end{cases} \langle J_{13} & J \\ J_{13} & J_{1} & J_{2} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{1} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{1} \bar{\gamma}_{2}) (-1)^{J_{12} + J_{12} + J_{12} + J_{12} + J_{12}} * \langle J_{12} & J_{3} & J \\ J_{13} & J_{2} & J_{1} \end{cases} \langle J_{13} & J \\ J_{13} & J_{1} & J_{2} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{3}^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_{1} \bar{\gamma}_{3}^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_{1} \bar{\gamma}_{2}) (-1)^{J_{12} + J_{12} + J_{12} + J_{12}} * \langle J_{12} & J_{13} & J \\ J_{13} & J_{1} & J_{2} \end{cases} \langle J_{13} & J \\ J_{13} & J_{1} & J_{2} \end{cases} \langle J_{13} \rangle \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\ \sum_{J_{13}} \langle \gamma_{1} \gamma_{1} \gamma_{1} \gamma_{1} \gamma_{1} \rangle \langle J_{13} \rangle \langle J \rangle$$

Детальніше, процедура виводу і обчислення приведених матричних елементів оператора обурення на хвильових функціях 3QP станів викладена в [51,135].

2.2.6 Калібровочно-інваріантна КЕД процедура будування оптимізованих базисів релятивістських діраковських функцій

У даному підрозділі буде викладена вперше застосована нами в задачах обчислення характеристик заборонених атомних переходів для важких атомів і іонів КЕД процедура Глушкова-Іванова [2] генерації оптимізованого 1QP шуканої процедури уявлення. Основна ідея пов'язана 3 мінімізацією енергетичного функціонала, що є вкладом поляризаційних діаграм 4-порядку КЕД ТЗ або другого порядку атомної ТЗ (2.41,2.42). Як підкреслювалося вище, вклад вказаних діаграм, що описують по суті колективні поляризаційні ефекти, залежать від калібрування фотонного пропагатора. Звідси слідує основна задача шуканого підходу – мінімізіровати відповідний калібровочно-нєїнваріантний вклад, тобто вклад, пов'язаний з обміном подовжніми фотонами в уявну частину електронної енергії. Збуренням в КЕД ТЗ є оператор (див. вище, а також підрозділ 1.2):

$$-V_{c}(r) - J_{\mu}(x)A^{\mu}(x), \qquad (2.47)$$

де А — вектор-потенціал електромагнітного поля,

J — оператор струму.

Розглянемо далі, слідуючи [2], вклад діаграм, представлених вище на рис.2.1 и 2.2, тобто фактично розглядається 1QP система. Далі фотонний пропагатор вибирається в наступному загальному вигляді з калібрувальною константою С:

$$D = D_T + C \cdot D_L$$
(2.48)
$$D_T = \frac{\delta_{\mu\nu}}{k_0^2 - k^2},$$
$$D_L = \frac{k_{\mu}k_{\nu}}{k_0^2 - k^2},$$

де *D*_T представляє обмін електронів поперечними фотонами,

*D*_L — подовжніми фотонами.

Згідно [2] (див. також [1,3]), при *D*=*D*_T вклад діаграми 2-го порядку у парціальну ширину атомного рівня α дорівнює:

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_{\alpha}^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_T(r_1 r_2) \psi_{\alpha}(r_2) \psi_s(r_1)$$
(2.49)

 $D_T(r_1r_2) = (1 - \alpha_1\alpha_2) \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} / r_{12},$

а при $D=D_L$:

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_{\alpha}^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_L(r_1 r_2) \psi_{\alpha}(r_2) \psi_s(r_1)$$
(2.50)
$$D_L(r_1 r_2) = [1 - (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} + \omega_{\alpha_s} [1 + (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \cos \omega_{\alpha_s} r_{12}.$$

Відповідно, вклад прямої поляризаційної діаграми A_d (рис.2.2) у уявну частину електронної енергії, згідно [2] (див. також [1,3]), у лінійному по *С* наближенні визначається вираженням:

$$\operatorname{Im} E_{ninv}(\alpha - s \mid A_{d}) = -C \frac{e^{2}}{4\pi} \iiint dr_{1} dr_{2} dr_{3} dr_{4} \sum \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{\alpha_{s}}} + \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha_{s}}}\right) \Psi_{\alpha}^{+}(r_{1}) \Psi_{m}^{+}(r_{2}) \Psi_{s}^{+}(r_{3}) \Psi_{n}^{+}(r_{4}) (1 - \alpha_{1}\alpha_{2}) / r_{12} \cdot \left(\left[(\alpha_{3}\alpha_{4} - (\alpha_{3}n_{34})(\alpha_{4}n_{34})) / r_{34} \cdot \sin[\omega_{\alpha_{n}}(r_{12} + r_{34}) + \omega_{\alpha_{n}} \cdot \cos[\omega_{\alpha_{n}}(r_{12} + r_{34})](1 + (\alpha_{3}n_{34})(\alpha_{4}n_{34}))] \Psi_{m}(r_{3}) \Psi_{\alpha}(r_{4}) \Psi_{n}(r_{2}) \Psi_{s}(r_{1}),$$

$$(2.51)$$

і далі представимо у вигляді суми:

$$\sum \langle \alpha m | W_1 | ns \rangle \langle sn | W_2 | m\alpha \rangle / (\omega_{mn} \pm \omega_{\alpha s})$$
(2.52)

з чотирма різними комбінаціями операторів W_1 і W_2 (див. детальні вирази для шуканих операторів в [2,6]). Для обчислення (2.51) або (2.52) наступна використовується процедура [104,105]. Інтеграл (2.51) апроксиміруєтся матричним елементом оператора поляризаційної взаємодії (2.42). Згідно [104,105], процедура мінімізації ФП (2.51) при умові:

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

зводиться до ланцюжки варіацій:

$$\delta\rho_c \longrightarrow \delta V_c \longrightarrow \delta \{f_{\alpha}, f_s, g_{\alpha}, g_s\} \longrightarrow \delta X, \qquad (2.53)$$
$$\delta Y \longrightarrow \delta Y_i \longrightarrow \delta Z_i \longrightarrow \delta I \longrightarrow \delta E,$$

де *f*, *g* — рішення рівняння Діраку з *V*_N+*V*_C (*V*_N – ядерний потенціал). Перша ланка (2.54) реалізується за допомогою вираження:

$$\delta V_C(r) = \frac{1}{r} \int_0^r dr' \, r'^2 \, \delta \rho_c(r') + \int_r^\infty dr' \, r' \, \delta \rho_c(r') + X \, \delta \rho_c(r) / \, \rho^{2/3}_c(r) \,, \qquad (2.54)$$

де останній доданок зв'язаний з врахуванням обмінних ефектів в наближенні Кона-Шема. Друга ланка реалізується шляхом визначення поправки першого порядку по δV_C к функціям f_{α} , f_s , g_{α} , g_s - рішенням рівняння Дірака з потенціалом V_N+V_C ., що представляє біспінор вигляду:

$$\Phi_{\mu m = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \mu_i m_i} < n_i \mu_i m_i | V | n \mu m > / (\varepsilon_{n_i \mu_i m_i} - \varepsilon)}$$
(2.55)

з енергетичним 1QP параметром *є* і компоненти якого задовольняють системі рівнянь типа Діраку (у кулонівських ед.) [104,105]:

$$G'/\alpha Z + (1-\mu)G/\alpha Zr + A_{+}F = \delta V_{C}f_{n_{i}\mu_{i}}, \qquad (2.56)$$
$$-F'/\alpha Z + (1+\mu_{i})F/\alpha Zr + A_{-}G = \delta V_{C}g_{n_{i}\mu_{i}},$$

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

Чисельна реалізація всього алгоритму детально викладена в [3,104,105,] і описувалася в багатьох публікаціях, зв'язаних з використанням КЕД підходу [2], тому нам відзначити лише ключові моменти алгоритму Глушкова-Маліновської. Вклад (2.51) визначається в результаті сумою радіальних інтегралів типа:

$$I = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 X(r_1) Y(r_2) Z(r_3) L(r_1 r_3) M(r_2 r_3), \qquad (2.57)$$

де використані наступні позначення [104,105]:

$$\{L_{1}, M_{1}\} = Z_{\lambda}^{(1)} r^{p}, \{L_{2}, M_{2}\} = Z_{\lambda}^{(2)} r^{q}, \qquad (2.58)$$

$$\{X, Y\} = \{f_{\alpha} f_{s} r^{t}; g_{\alpha} g_{s} r^{t}; f_{\alpha} g_{s} r^{u}; g_{\alpha} f_{s} r^{u}\}$$

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

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

f, g – радіальні частини двохкомпонентних функцій стану квазічастинки.

Варіації функцій *Y_i*, *Z_i* у вище приведених формулах знаходяться по їх диференціальних рівняннях:

$$y'_{1} = XL_{1}, \quad y'_{2} = YM_{1}, \quad y'_{3} == ZL_{1}M_{1},$$

$$y'_{4} = YM_{2}y_{3} + ZL_{1}M_{1}y_{2}, \quad y'_{5} = XL_{2}y_{3} + ZL_{1}M_{1}y_{1},$$

$$Z'_{2} = XL_{2}y_{4}, \quad Z'_{3} = YM_{2}y_{5},$$

$$I = \lim_{r \to \infty} \{Z_{1}(r) + Z_{2}(r) + Z_{3}(r)\}$$
(2.59)

Чисельна реалізація викладеного методу генерації оптимізованої одноквазічастинкового уявлення виконана в комплексі РС програм "Superatom-ИСАН" (див. [1-4,11,66,43-46,180] і заслання в цих роботах) і зводиться до вирішення мастерних систем диференціальних рівнянь (система звичайних диференціальних рівнянь Діраку для радіальних компонент, рівнянь Бесселя, рівнянь для інтегралів різних порядків ТЗ і так далі).

3 РОЗРАХУНОК ЕНЕРГІЇ, ЙМОВІРНОСТЕЙ І СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ ЗАБОРОНЕНИХ РАДІАЦІЙНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ ВАЖКИХ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ АТОМІВ ТА БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ

3.1 Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні Нg⁺

цьому підрозділі представлені результати розрахунку У енергій і ймовірностей, сил осциляторів E1 дипольних (для тесту) переходів $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2}), 5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ і електричного E2 квадрупольного переходу $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})$ - $5d^{10}6s$ (S_{1/2}) V однократно іонизованному атомі Hg⁺ [1, 5, 30]. Особливий інтерес до вивчення зазначених переходів пояснюється тим, що при зіткненні, наприклад, іонів гелію (інертних газів) з атомами і іонами елементів другої групи таблиці Менделєєва іони, які утворюються в результаті перезарядки, з великою ймовірністю виявляються в збуджених станах, що вкрай важливо для створення інверсної заселеності (лазерного ефекту). Наявні до теперішнього часу в літературі відомості про ймовірності радіаційних переходів явно недостатні, зокрема, вкрай цікавою і важливою є задача врахування релятивістських і кореляційних ефектів, оскільки аналізовані переходи відбуваються в зовнішніх оболонках в сильному полі атома з великим зарядом ядра (Z=80). Зазначені вище стани іона Hg⁺ в рамках КЕД ТЗ формалізму трактуються як одно-і трьох-QP стану електронів (6s) (вакансії 5d⁻¹) заповнених електронних оболонок 5d¹⁰6s². Взаємодія QP-остов над остовом описується потенціалом (2.38), фактично імітує ДФ потенціал самоузгодженого Ефекти поляризаційної взаємодії QP через полярізуємий остов і поля.

екраніровочної (антієкраніровочної у разі пари електрон-вакансія) взаємодії враховувалися в рамках методики, описаної в розділі 2. У таблицях 3.1, 3.2, 3.3 відповідно представлені результати теоретичного обчислення енергій і ймовірностей дипольних E1 (для тесту) переходів $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ і електричного E2 квадрупольного переходу $5d^96s^2(D_{5/2},D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ у Hg⁺ (ХФ- хартрі-фоковські дані, ДФ – діракфоковські дані, ДФ (експ.) – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, КЕД ТЗ – наш розрахунок) [1-5] і досить надійні експериментальні дані Moore (NBS, Washington) [2].

Таблиця 3.1 - Енергії переходів $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2}),$ $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2}),$ $5d^{9}6s^{2}(D_{5/2},D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в іоні Hg⁺ (в Ry): ХФхартрі-фоковські дані, ДФ – дірак - фоковські дані, ДФ (експ.) – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, КЕД ТЗ – наш розрахунок) [1,5,6,30,66]; експеримент - Moore (NBS, Washington) [2]

Метод	E _{6s}	7P _{1/2} -	7P _{3/2} -	7P _{1/2} -	7P _{3/2} -	D _{3/2} -	D _{5/2} -
		6S _{1/2}	6S _{1/2}	7S _{1/2}	7S _{1/2}	S _{1/2}	S _{1/2}
ΧΦ	-1.07	0.721	0.721	0.095	0.095	0.863	0.863
ДФ	-1.277	0.904	0.922	0.109	0.127	0.608	0.460
КЕД ТЗ	-1.377	0.986	1.019	0.114	0.147	0.462	0.325
Експ.	-1.378	0.987	1.020	0.115	0.148	0.461	0.324

Як видно з порівняння представлених у таблицях 3.1 і 3.2 даних, стандартні методи ХФ і ДФ в одноконфігураційному наближенні дають вкрай неточні дані по енергії і ймовірності Е2 переходу. Уточнення ДФ результату виходить при використанні експериментального значення енергії, що фактично означає

емпіричне врахування вкрай важливих з кількісної точки зору ефектів міжелектронних кореляцій. У рамках нашої теорії шукані ефекти поляризаційної

Таблиця 3.2 - Ймовірності E1 переходів $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})$ - $5d^{10}6s(S_{1/2}), 5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})$ - $5d^{10}7s(S_{1/2})$ в Hg^+ (в с⁻¹): ХФ- хартрі-фоковскіе дані, ДФ – дірак - фоковскіе дані, ДФ (експ.) – ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, КЕД ТЗ – наш розрахунок) [1,5,6,30,66]; експеримент - Moore (NBS, Washington) [2]

Метод	$7P_{3/2}-6S_{1/2}$	$7P_{1/2}$ - $6S_{1/2}$	$7P_{3/2}$ - $7S_{1/2}$	$7P_{1/2}$ - $7S_{1/2}$
ΧΦ	$4.75 \cdot 10^{6}$	$4.75 \cdot 10^{6}$	$3.65 \cdot 10^7$	$3.65 \cdot 10^7$
ДФ	$8.45 \cdot 10^7$	$1.67 \cdot 10^7$	$6.89 \cdot 10^7$	$4.71 \cdot 10^7$
Д $\Phi\left(E_{e\kappacn}\right)$	$1.17 \cdot 10^{8}$	$2.04 \cdot 10^7$	$1.10 \cdot 10^8$	$5.52 \cdot 10^7$
КЭД ТЗ	$1.49 \cdot 10^8$	$2.31 \cdot 10^7$	$1.41 \cdot 10^8$	$6.33 \cdot 10^7$
Експ.	$1.53 \cdot 10^{8}$	$2.35 \cdot 10^7$	$1.44 \cdot 10^8$	$6.37 \cdot 10^7$

Таблиця 3.3 - Ймовірності забороненого Е2 переходу 5d⁹6s²(D_{5/2},D_{3/2})-5d¹⁰6s (S_{1/2}) в Hg⁺ (в с⁻¹): ХФ- хартрі-фоковскіе дані, ДФ – дірак - фоковскіе ДФ (експ.) – ДФ дані з використанням дані. експериментальної енергії переходу, КЕД T3 розрахунок) [1,5,6,30,66]; _ наш експеримент - Moore (NBS, Washington) [2]

Метод	D _{3/2} - S _{1/2}	D _{5/2} - S _{1/2}		
ΧФ	1360	1360		
ДΦ	257.0	77.4		
ДФ (Е _{експ})	63.9	13.3		
КЭД ТЗ	54.53(0,2%)	11.84 (0,2%)		
Експ.				

53.5±2.0	11.6±0.4	-

взаємодії QP через полярізуємий остов (в багато конфігураційному наближенні цей ефект відповідає врахуванню віртуальних збуджень остова; квазічастинки "заморожені") і ефекти взаємного екранування QP (остов "заморожений", квазічастинки віртуально збуджуються) враховані досить повно, що призводить до прийнятної точності розрахунку. Поправка на врахування поляризації зовнішніми квазічастинками виявляється істотною, що змінює остова значення ймовірностей дипольних переходів на 15-30%. Також слід звернути увагу на практично нульове значення калібровочно - неінваріантного вкладу в імовірність переходу (0,2%; в табл.3.2 у дужках в рядку КЕД ТЗ), що на традиційній мові означає еквівалентність результатів розрахунків ймовірностей в схемах з оператором у формі довжини і швидкості (різні калібрування фотонного пропагатора) і є свідченням оптимального вибору нульового наближення T3 i ефективного врахування лосить повного багаточасткових кореляційних ефектів.

3.2 Енергії та ймовірності заборонених радіаційних переходів в іоні Ar⁺

Тут ми вивчимо спектр енергетичних рівнів та ймовірності заборонених E2 і M1 радіаційних переходів між рівнями низько лежачих конфігурацій $3s^23p^5$, $3s3p^63p^43d$, $3p^44s$ одноразово іонізованого атома аргону. Слід зазначити, що спектральна інформація по атомам інертних газів та їх іонів, зокрема, неону і аргону, вкрай важлива, наприклад, для діагностики лабораторної плазми [31,67-69]. Шукані атоми і іони присутні у плазмі токамака, стеллатора. Нарешті, атоми і іони аргону виявлені в астрофізичних об'єктах (туманності, зірки і т.д.) [70]. З теоретичної точки зору шукані атоми і іони відносяться до класу вкрай складних систем внаслідок високої чутливості розрахункових значень енергій і ймовірностей переходів до якості та повноті врахування як релятивістських, так і кореляційних ефектів [6,28,68,71], і в цьому сенсі є відмінним тестом для апробації будь-якого нового теоретичного підходу. З іншого боку, шукані системи і, зокрема, іон детально розглядалися на основі стандартних методів, зокрема, багато конфігураційного методу ДФ [6,7, 27,28,72,73].

Ми розглянули енергії та ймовірності переходів для 39 низько лежачих рівнів конфігурацій ArII: $3s^23p^5$, $3s3p^6$, $3p^43d$, $3p^44s$. Зазначені стани в рамках КЕД формалізму трактуються як одно-і трьох-QP стани електрона (4s,3d) TЗ (вакансії $3p^{-1}$) над остовом заповнених електронних оболонок $3s^23p^6$. Структура низько лежачих рівнів ArII включає два непарних рівня з повним моментом J = 1/2, J = 3/2 конфігурації $3s^2 3p^5$ і 37 збуджених рівнів з J = 1/2, J = 3/2конфігурацій 3s3p⁶, 3p⁴3d, 3p⁴4s. Серед зазначених рівнів збуджених станів тільки з рівнім з J ≤ 5/2 можливий Е1 радіаційний перехід в основний стан іона. З рівнів з J = 7/2 можливий M2 перехід в основний стан. З рівнів з J = 7/2, 9/2 (напр., конфігурації 3р⁴3d) можливі заборонені Е2 и М1 переходи на нижче лежачі рівні тієї ж самої парності. Секулярна матриця, як зазвичай, включала стани з одним і тим же повним моментом і однієї і тієї ж парністю. Взаємодія QP-остов описується потенціалом (2.38), фактично імітує ДФ потенціал самоузгодженого поля. Ефекти поляризаційної взаємодії QP через полярізуємий остов і екраніровочної (антіекраніровочної у разі пари електрон-вакансія) взаємодії враховувалися в рамках методики, описаної вище. У таблиці 3.4 наведені теоретичні значення енергій збудження (в см⁻¹) для деяких рівнів з J = 5/2, розраховані в різних наближеннях: багато конфігураційному методі ДФ (МКДФ) з урахуванням різного числа додатково накладених станів, МКДФ з урахуванням брейтовських поправок (МКДФ + Брейт), методі КЕД ТЗ (наш розрахунок), а також експериментальних і компілірованих даних Мартіна та ін. [2,7-9,72]. У таблиці 3.5 наведені енергії всіх розглянутих збуджених станів,

отримані на основі розрахунку методом МКДФ, МКДФ з урахуванням брейтовських поправок, КЕД ТЗ (наш розрахунок), а також експериментальні дані [2,7-9,72]. Аналіз наведених значень енергій рівнів показує, що врахування релятивістьских поправок, зокрема, брейтовських, і кореляційних вкладів є принципово важливим для забезпечення адекватної точності опису шуканих рівнів.

Таблица 3.4 - Значення енергій збудження (в см⁻¹) для рівнів з J = 5/2 в різних наближеннях: МКДФ з урахуванням різного числа додатково накладених станів, МКДФ + Брейт, КЕД ТЗ (наш розрахунок), а також експериментальні дані [2,7,8,72].

Рівень	МКДФ	МКДФ	МКД +	КЭД	Експеримент
		4 <i>l</i> (SD)	Брейт	Т3	
$3s3p^{6}{}^{2}S^{e}{}_{1/2}$	112307	110781	108772	108754	108721
$3s^23p^4(^{3}P)3d^4D^{e}_{1/2}$	137892	135584	133154	132965	132737
$3s^23p^4(^{3}P)4s {}^{4}P^{e}_{1/2}$	139843	138088	135756	135673	135601
$3s^23p^4(^{3}P)3d {}^{4}P^{e}_{1/2}$	157482	151676	148453	147441	147228
$3s^23p^4(^1D)3d^2S^{e}_{1/2}$	224697	196778	191602	185678	184093

В цілому наша теорія дає цілком прийнятний опис структури спектра, в більшості випадків більш точне, ніж альтернативні методи МКДФ. Однак, для деяких термів (наприклад, $3s^23p^4({}^1D)3d^2S^{e}{}_{1/2}$, $3s^23p^4({}^1S)3d^2D^{e}{}_{5/2}$, $3s^23p^4({}^1S)3d^2D^{e}{}_{3/2}$) похибка обчислення виявляється досить великою і значно перевершує стандартну спектроскопічну, що є свідченням вкрай сильної міжконфігураційної взаємодії в спектрі іона Ar + Мабуть, для адекватного опису зазначених термів потрібно значне розширення секулярної матриці для врахування також і високо лежачих конфігурацій. Ми вважаємо, що в спектрі шуканого іона має місце ефект так званих "Plunging" конфігурацій типу 3p4p4db та ін., енергія яких для нейтрального атома перевищує енергію іонізації і не грає визначальної ролі,
однак для іонів ці конфігурації обурюють дискретний спектр, істотно посилюючи взаємодію конфігурацій.

Таблиця 3.5 - Енергії збуджених станів (в см⁻¹), отримані на основі розрахунку методом МКДФ, МКДФ+Брейт, КЕД ТЗ (наш розрахунок) та експериментальні дані

Рівень	Експеримент	МКДФ	МКДФ+Брейт	КЕД ТЗ
	[2]	[7]	[72]	[8,9]
$3s^23p^5 {}^2P^{o}_{3/2}$	0000	0000	0000	0000
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}{}_{1/2}$	1431	1413	1449	1439
$3s3p^{6}{}^{2}S^{e}{}_{1/2}$	108721	123449	108772	108754
$3s^23p^4(^{3}P)3d^4D^{e}_{7/2}$	132327	144475	132196	132178
${}^{4}\text{D}^{e}_{5/2}$	132481	144643	132833	132535
${}^{4}D^{e}_{3/2}$	132630	144795	133153	132861
${}^{4}D^{e}{}_{1/2}$	132737	144900	133154	132965
$3s^23p^4(^{3}P)4s^4P^{e}_{5/2}$	134241	147383	134373	134294
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	135085	148196	135399	135162
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	135601	148698	135756	135673
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	138243	151619	138669	138408
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	139258	152599	139527	139312
$3s^23p^4(^3P)3d^4F^{e}_{9/2}$	142186	154802	142240	142257
${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	142717	155330	143332	142779
${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	143107	155720	144068	143165
${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	143371	155986	144381	143458
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	144709	159689	145957	145002
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	145668	160527	146791	145913
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	147228	160702	148453	147441
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	147503	161065	148789	147674

${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	147875	161311	148944	148112

Продовження таблиці 3.5

Рівень	Експеримент	МКДФ	МКДФ+Брейт	КЕД ТЗ
	[2]	[7]	[72]	[8,9]
$3s^23p^4(^1D)4s^2D^{e}_{3/2}$	148620	165964	149603	148874
${}^{2}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	148842	163702	149579	149068
$3s^23p^4(^{3}P)3d^2F^{e}_{7/2}$	149179	163392	150601	149315
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	150147	164408	151670	150308
$3s^23p^4(^{3}P)3d^2D^{e}_{3/2}$	150474	163385	151952	150613
${}^{2}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	151087	166359	152405	151227
$3s^23p^4(^1D)3d^2G^{e}_{9/2}$	154181	169153	154859	154322
${}^{2}G^{e}_{7/2}$	154204	169186	155336	154345
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	163299	179391	165449	164315
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{\mathrm{7/2}}$	163506	179574	165670	164520
$3s^23p^4(^1S)4s^2S^{e}_{1/2}$	167307	189099	168498	167519
$3s^23p^4(^1D)3d^2D^e_{5/2}$	172335	187790	177939	173024
² D ^e _{3/2}	172829	188322	177790	173516
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	174409	189056	180961	175230
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	174821	189324	182252	175639
$3s^23p^4(^1S)3d^2D^e_{5/2}$	179592	200919	184309	180878
${}^{2}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	179931	200974	184949	181225
$3s^23p^4(^1D)3d^2S^{e}_{1/2}$	184093	203765	191602	185678

У таблиці 3.6 представлені значення ймовірностей М1 заборонених переходів між рівнями низько лежачих конфігурацій в спектрі АгII, розраховані в рамках методів МКДФ + Брейт і КЕД ТЗ. Єдине наявне експериментальне значення ймовірності 5.32 (-2) М1 переходу $3s^23p^{52}P^{o}_{1/2}$ - $3s^23p^{52}P^{o}_{3/2}$ добре

узгоджується з отриманим нами значенням (похибка ~ 0,4%), в той час як похибка розрахунку методом МКДФ ~ 3%.

Таблиця 3.6 - Ймовірності М1 (с⁻¹) заборонених переходів в спектрі АгII, розраховані в рамках методів МКДФ + Брейт (А) і КЕД ТЗ (Б; наш розрахунок)

Початковий	Кінцевий	А	Б
стан	стан		
$3s^23p^{52}P^{0}_{1/2}$	$3s^23p^{52}P^{o}_{3/2}$	5.46(-2)	5.34(-2)
$3s^23p^4(^1D)3d^2G^{e}_{9/2}$	$3s^23p^4(^{3}P)3d^2F^{e}_{7/2}$	1.50(-2)	1.39(-2)
${}^{2}G^{e}_{7/2}$	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	4.28(-2)	4.12(-2)
$3s^23p^4(^3P)3d^4F^{e}_{9/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{~7/2}$	4.11(-2)	3.98(-2)
$3s^23p^4(^1D)3d^2F^{e}_{7/2}$	$3s^23p^4(^1D)3d^2G^{e}_{7/2}$	1.24(-2)	1.01(-2)
$3s^23p^4(^{3}P)3d^4F^{e}_{7/2}$	$3s^23p^4(^{3}P)3d^4D^{e}_{7/2}$	3.36(-2)	3.23(-2)
$3s^23p^4(^1D)3d^2G^{e}_{7/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	5.30(-2)	5.18(-2)
${}^{2}G^{e}_{9/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	6.87(-2)	6.69(-2)
${}^{2}\text{G}^{e}_{7/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	8.73(-2)	8.52(-2)
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	3.67(-2)	3.55(-2)
$3s^23p^4(^{3}P)3d^2F^{e}_{7/2}$	${}^{4}D^{e}{}_{5/2}$	2.48(-2)	2.32(-2)
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	1.05(-1)	0.92(-1)
$3s^23p^4(^1D)3d^2F^{e}_{7/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	4.89(-2)	4.71(-2)
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	⁴ D ^e _{5/2}	9.27(-2)	9.03(-2)
${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{~7/2}$	3.10(-1)	2.91(-1)

У таблиці 3.7 наведені значення ймовірностей Е2 заборонених переходів між рівнями низько лежачих конфігурацій в спектрі АгІІ, розраховані в рамках методів МКДФ + Брейт і КЕД ТЗ (при різних калібруваннях фотонного пропагатора: кулонівського і Бабушкіна, тобто формах довжини і швидкості для матричних елементів переходів). З наведених даних видно, що в методі МКДФ ступінь недотримання калібровочної інваріантності (похибка врахування кореляційних поправок) становить 10-48%, у той час як у нашій теорії величина калібровочно- неінваріантного вкладу на перевищує 1%.

Таблиця 3.7 - Ймовірності Е2 (с⁻¹) заборонених переходів в спектрі АгІІ, розраховані в рамках методів МКДФ+Брейт (А) и КЕД ТЗ (Б; наш розрахунок)

Початковий	Кінцевий	A	А	Б	Б
стан	стан	"довжина"	"швидкість"	"довжина"	"довжина"
$3s^23p^4(^1D)3d^2D^{e}_{5/2}$	$3s^23p^4(^1D)3d^2F^{e}_{7/2}$	4.13(-2)	3.62(-2)	3.13(-2)	3.14(-2)
$3s^23p^4(^{3}P)3d^2P^{e}_{3/2}$	$3s^23p^4(^{3}P)3d^4D^{e}_{7/2}$	1.11(-2)	1.39(-2)	0.96(-2)	0.97(-2)
$3s^23p^4(^1D)3d^2F^{e}_{5/2}$	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	6.68(-2)	5.26(-2)	6.34(-2)	6.35(-2)
$3s^23p^4(^{3}P)3d^4P^{e}_{3/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	5.87(-1)	4.67(-1)	4.93(-1)	4.94(-1)
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{5/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	5.52(-1)	4.44(-1)	4.62(-1)	4.61(-1)
$3s^23p^4(^1D)3d^2D^{e}_{3/2}$	$3s^23p^4(^1D)3d^2G^{e}_{7/2}$	1.79(+0)	1.44(+0)	1.35(+0)	1.30(+0)
² D ^e _{5/2}	$3s^23p^4(^{3}P)3d^2F^{e}_{7/2}$	7.28(+0)	6.95(+0)	6.55(+0)	6.53(+0)
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	1.19(+1)	1.04(+1)	0.92(+1)	0.89(+1)
$3s^23p^4(^1S)3d^2D^{e}_{5/2}$	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	4.44(+0)	5.20(+0)	3.58(+0)	3.56(+0)
² D ^e _{3/2}	${}^{2}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	7.47(-1)	8.83(-1)	6.72(-1)	6.75(-1)
$3s^23p^4(^1D)3d^2P^{e}_{3/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	4.24(-2)	4.98(-2)	3.78(-2)	3.72(-2)
$3s^23p^4(^1S)3d^2D^{e}_{5/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	1.01(+0)	1.09(+0)	0.85(+0)	0.82(+0)
${}^{2}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{4}\mathrm{F}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	9.66(-2)	7.68(-2)	7.78(-2)	7.74(-2)
² D ^e _{5/2}	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	6.75(-1)	9.18(-1)	5.64(-1)	5.61(-1)
${}^{2}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{4}\mathrm{D}^{\mathrm{e}}_{7/2}$	1.70(-2)	2.51(-2)	1.42(-2)	1.40(-2)

У таблиці 3.8 представлені значення енергій переходів і сили осциляторів для ряду дозволених Е1 переходів, розраховані на основі методів МКДФ + Брейт і КЕД ТЗ [9, 72], з метою аналізу повноти врахування кореляційних ефектів і порівняння з експериментальними даними. Для переходів $3s^23p^4(^3P)4s^2P-3s^23p^{52}P^{\circ}$, $3s^23p^4(^3P)3d^4F-3s^23p^{52}P^{\circ}$ наша теорія добре узгоджується з експериментальними, причому значно краще, ніж теорія МКДФ. При

цьому величина калібровочно- неінваріантного вкладу в значення сили осциляторів складає долі %. Водночас, для переходу $3s3p^{62}S-3s^23p^{52}P^{o}_{1/2}$ має місце суттєва відмінність як значення сили осцилятора, отриманого в методі МКДФ, так і нашого значення від експериментальної величини. У цьому випадку мова йде, очевидно, про недостатню точність експериментального вимірювання, у зв'язку з чим подальше експериментальне вивчення шуканих переходів представляється вкрай важливим і цікавим.

	Таблиця 3.8 -	Сили	осциляторів	для дозволених	к Е1 переходів,	, розраховані
на	основі методів	МКДФ	+ Брейт і КЕ	ЕД ТЗ [4,130] і є	експерименту [2]

Початковий	Кінцевий	Експ.	МКДФ+Брейт	КЕД ТЗ
стан	стан			
$3s3p^{62}S$	$3s^23p^{52}P^{o}_{1/2}$	$0.0086\pm$	0.0203	0.0106
	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}_{3/2}$	0.0004	0.0358	0.0185
$3s^{2}3p^{4}(^{3}P)4s^{2}P$	$3s^23p^{52}P^{o}$	0.22 ± 0.07	0.273	0.245
				0,242
$3s^23p^4(^{3}P)3d^{4}F$	$3s^23p^{52}P^{o}$	0.08 ± 0.02	-	0.093
				0.091

У таблиці 3.9 дано зведення значень ймовірностей E1 і M1 переходів, розрахованих в наближеннях МКДФ, МКДФ+Брейт и КЭД T3, і порівняння з наявними експериментальними даними [2,7-9,72]. Аналіз наведених результатів дозволяє зробити наступні висновки. По-перше, наша теорія, в силу більш повного врахування релятивістських і кореляційних поправок, забезпечує краще згоду з експериментом, ніж найбільш просунуті версії методу МКДФ. Подруге, як і в попередньому випадку іона ртуті, точність обчислення ймовірностей і сил заборонених M1,E2 переходів принципово визначається коректністю та повнотою врахування ефектів поляризаційної взаємодії QP через полярізуємий остов і ефектів взаємного екранування QP. По-третє, на відміну від розрахунку методом МКДФ, в якому величина калібровочно-неінваріантного вкладу досягає 12% і більше, в нашій теорії значення калібровочно-неінваріантного вкладу в імовірність переходу становить десяті частки %, що на традиційній мові означає еквівалентність результатів розрахунків ймовірностей в схемах з оператором переходу у формі довжини і швидкості.

Таблиця 3.9 - Ймовірності (с⁻¹) Е1 і М1 переходів, розраховані методами МКДФ (А), МКДФ+Брейт (Б; верхнє число - форма довжини; нижнє числоформа швидкості), КЕД ТЗ (В; верхнє число – форма довжини; нижнє число форма швидкості), та експериментальні дані [2,7-9,72]

Почат.стан	Кінц.стан	Тип	Експ.	A	Б	В
$3s^23p^4(^{3}P)4s^2P^{e}_{1/2}$	$3s^23p^5 {}^2P^{o}_{3/2}$	E1	9.5(+8) ≤50%)	9.9(+8)	9.7(+8)	9.50(+8)
					1.1(+9)	9.51(+8)
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}_{3/2}$	E1	2.3(+9) ≤50%)	2.3(+9)	2.3(+9)	2.24(+9)
					2.5(+9)	2.25(+9)
${}^{2}P^{e}_{1/2}$	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}{}_{1/2}$	E1	1.9(+9) ≤50%)	1.8(+9)	1.7(+9)	1.91(+9)
					1.9(+9)	1.92(+9)
${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}{}_{1/2}$	E1	4.5(+8) ≤50%)	3.8(+8)	3.8(+8)	4.35(+8)
					4.1(+8)	4.36(+8)
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}_{3/2}$	E1	3.8(+6) ≥50%)	1.3(+5)	1.7(+5)	2.98(+5)
					2.6(+5)	2.99(+5)
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{2}\mathrm{P}^{\mathrm{o}}_{3/2}$	E1	3.1(+7) ≥50%)	3.8(+7)	3.7(+7)	3.26(+7)
					4.1(+7)	3.27(+7)
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{1/2}$	${}^{2}P_{1/2}^{o}$	E1	7.3(+6) ≥50%)	1.4(+7)	1.3(+7)	8.41(+6)
					1.7(+7)	8.42(+6)
${}^{4}\mathrm{P}^{\mathrm{e}}_{3/2}$	${}^{2}P^{o}{}_{1/2}$	E1	5.9(+6) ≥50%)	3.2(+6)	3.3(+6)	5.58(+6)
					3.6(+6)	5.59(+6)

Продовження таблиці 3.9

Початковий	Кінцевий	Тип	Експ.	Α	Б	В
стан	стан					
$3s3p^{62}S^{e}_{1/2}$	${}^{2}P^{o}_{3/2}$	E1	$1.4(+8) \le 25\%)$	1.8(+8)	1.4(+8)	1.34(+8)
					1.2(+8)	1.34(+8)
$3s3p^{62}S^{e}_{1/2}$	${}^{2}P^{o}{}_{1/2}$	E1	6.7(+7)(≤25%)	8.6(+7)	7.8(+7)	6.88(+7)
					7.5(+7)	6.89(+7)
$3s^23p^5 {}^2P^{o}_{1/2}$	${}^{2}P^{o}_{3/2}$	M1	5.3(-2)(≤3%)	-	5.46(-2)	5.34(-2)
						5.34(-2)

3.3 Ймовірності радіаційних переходів в спектрах атомів EuI, YbI

У цьому підрозділі ми наведемо результати розрахунку енергій переходів і ймовірностей деяких переходів в спектрі атома (з групи лантанідів) EuI. У таблиці 3.10 наведені розглянуті нами переходи і наведені відповідні розраховані довжини хвиль.

Таблиця 3.10

Номер	Перехід	Довжина хвилі (в А)
1	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s6p {}^{8}P_{5/2}$	4661,88
2	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s6p {}^{8}P_{7/2}$	4627,22
3	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s6p {}^{8}P_{9/2}$	4592,03
4	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p {}^{8}P_{5/2}$	2743,28
5	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p {}^{8}P_{9/2}$	2738,57
6	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p {}^{8}P_{7/2}$	2731,37
7	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s8p {}^{8}P_{9/2}$	2471,14
8	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s8p {}^{8}P_{7/2}$	2461,78
9	$4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s8p {}^{8}P_{5/2}$	2560,50

У таблиці 3.11 представлені наші результати розрахунку (колонка F) сил осциляторів електричних дипольних переходів разом з наявними експериментальними даними (колонки E1, E2). Для порівняння в цій таблиці наведені також результати розрахунку в рамках кулонівського наближення (колонки A, B, C відповідають калібруванню фотонного пропагатора: кулонівського, Бабушкіна, Ландау) і багато конфігураційного методу ДФ (колонка D) [8,32-34].

Таблиця 3.11 - Сили осциляторів ряду переходів В спектрі атома EuI: експеримент - E1, E2; А,В,С – кулонівське наближення (відповідно Бабушкіна, калібрування фотонного пропагатора: Кулоновой, Ландау), - багато конфігураційний ДΦ, F – результати D метод нашого розрахунку

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

Аналіз отриманих даних дозволяє зробити висновок, що, по-перше, наша теорія знаходиться в досить хорошому злагоді з експериментом, значно кращому, ніж відомий багато конфігураційний метод ДФ, а також спрощене кулонівське

наближення. По-друге, як видно, в кулонівському наближенні дані розрахунку з використанням різних калібрувань фотонного пропагатора досить сильно відрізняються один від одного, в той час як у нашій теорії відмінність даних по силам осциляторів не перевищує 0,05% (для кулонівського калібрування і калібрування Бабушкіна). По-третє, розрахунок продемонстрував вкрай значний в кількісному відношенні вклад (до 30%), обумовлений ефектами міжелектронної кореляції (поляризаційної і екраніровочної взаємодій) як ефектами другого і вище порядків T3. Нарешті, наш аналіз показує, що експериментальні дані для переходів $4f^{7}(^{8}S)6s^{28}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p^{8}P_{9/2}$ і $4f^{7}(^{8}S)6s^{2} \ ^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p^{8}P_{7/2}$, очевидно, містять значну помилку, що в принципі пояснюється вкрай істотною складністю вивчення шуканого спектру.

У таблиці 3.12 представлені результати розрахунку сил осциляторів переходів збуджених станів в основний стан для атома лежачих низько 3 Үb І. Для порівняння наведені також результати розрахунку в кулонівському наближенні (колонка А), багато конфігураційному наближенні ДΦ (колонка D) i рамках нашої КЕД теорії (колонка F) [2, 8, 33, В 75,76]. Висновки, наступні 3 аналізу, принципі, аналогічні В Кулонівське вищенаведеним для EuI. наближення атома € досить грубим наближенням. Експериментальні мабуть, вимагають дані також, уточнення.

Таблиця 3.12 - Сили осциляторів ряду переходів в спектрі атома YbI: експеримент - Е; А– кулонівське наближення (калібрування фотонного пропагатора: кулонівське), D- багато конфігураційний метод ДФ, F – результати нашого розрахунку

Перехід	λ(Α)	А	D	F	Е
$4f^{14}6s^2 {}^{1}S_0 - 4f^{14}6s6p {}^{1}P_1$	3987,9	1,82	1,65	$1,36^{a}; 1,48^{b}$	1,2; 1,38;
					1,12;
$4f^{14}6s^{2} {}^{1}S_0 - 4f^{14}6s7p {}^{1}P_1$	2464,5	1,19	0,59	$0,33^{a}; 0,38^{b}$	0,22

Примітка. ^а – розрахунок з оптимізованим базисом; ^b – розрахунок з не оптимізованим базисом.

3.4 Ймовірності та сили заборонених радіаційних переходів в спектрі Zn - подібних багатозарядних іонів

У цьому підрозділі наведені результати розрахунку енергій, ймовірностей і сил осциляторів різних типів радіаційних переходів між рівнями конфігурацій $4s^2({}^{1}S_0)$, 4s4p (${}^{1,3}P_J^0$), 4s4d (${}^{1,3}D_J^0$) в спектрі іонів з зарядом ядра Z=32-92 ізоелектронних послідовності ZnI. Зазначені вище стани Zn-подібних іонів в рамках КЕД ТЗ формалізму трактуються як двох -QP стану електронів (nl,n'l') над остовом заповнених електронних оболонок $3p^63d^{10}$. Взаємодія QP-остов описується потенціалом (2.38), фактично імітує ДФ потенціал самоузгодженого поля. Ефекти поляризаційної взаємодії QP через полярізуємий остов і екраніровочної взаємодії враховувалися в рамках методики, описаної в розділі 2. У таблицях 3.13 представлені результати теоретичного обчислення енергій і сил осциляторів переходу $4s^2({}^{1}S_0)$ - 4s4p (${}^{1}P_{1}^{0}$) на основі різних теорій, зокрема, ХФ дані, ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, результати розрахунку методом емпіричного модельного потенціалу (MII), дані розрахунку в рамках КЕД ТЗ (наш розрахунок) [5,9,27, 77-80], а також наявні в літературі експериментальні дані [2].

Аналіз представлених у таблиці 3.13 результатів показує, що, як і вище, дані ХФ, ДФ розрахунків з використанням різних калібрувань фотонного пропагатора (оператор переходу у формі довжини і швидкості) відрізняються один від одного в середньому до 15%, в той час як у нашій теорії відмінність даних по силам осциляторів не перевищує 0,1% (для кулонівського калібрування і калібрування Бабушкіна). Зрозуміло, в розглянутих іонах істотну роль грає врахування ефектів міжелектронної кореляції (поляризаційної і екраніровочної взаємодій) як ефектів другого і вище порядків ТЗ. Таблиця 3.13 - Експериментальні (експ.) і теоретичні енергії (в атомних од.) і сили осциляторів для переходу $4s^2({}^{1}S_0)$ - $4s4p({}^{1}P_{}^{0})$ у спектрах різних Zn-подібних іонів: методи -ХФ, ДФ, ДФ з використанням експериментальної енергії переходу, МП, ТЗ (наш розрахунок) [5,9,27, 77-80].

Іон	Метод	ΔΕ	f_L	$f_{\scriptscriptstyle V}$
	ДФ	0.3351	1.89	1.98
	ΧΦ	0.2984	2.30	2.01
Ga^+	Д $\Phi_{ m eксn}$	0.3221	1.97	1.95
	МΠ	0.3076	1.68	1.73
	Т3	0.3220	1.862	1.861
	Експ.	0.3221	1.85 ± 0.15	1.85 ± 0.15
	ДФ	0.5247	1.87	1.86
As^{3+}	Т3	0.5142	1.575	1.574
	Експ.	0.5141	1.56 ± 0.23	1.56 ± 0.23
<i>Kr</i> ⁶⁺	ДФ	0.7960	1.75	1.71
	Т3	0.7845	1.462	1.463

Продовження таблиці 3.13

Іон	Метод	ΔΕ	f_L	$f_{\scriptscriptstyle V}$
Gd^{34+}	ДФ	4.6685	1.12	1.10
	T3	4.6294	1.01	0.99
Yb^{40+}	ДФ	6.2564	1.12	1.10
	ТЗ	5.1788	0.97	0.96
Au^{40+}	ДФ	9.6361	1.18	1.15
	T3	9,5256	1.02	1.01
Pb^{52+}	ДФ	11.1153	1.21	1.18
	T3	10.9715	1.13	1.13
	ДФ	17.8584	1.37	1.36
$U^{_{62+}}$	ΧΦ	17.6087	1.41	1.47
	T3	17.6285	1.33	1.33
	Експ.	-	1.31 ± 0.05	1.31 ± 0.05

В цілому, згода результатів, отриманих в рамках нашої теорії, з експериментом є досить хорошою. У таблиці 3.14 наведені результати нашого розрахунку ймовірностей заборонених М1 і Е2 переходів в спектрах іонів ізоелектронної серії ZnI (наш розрахунок): (а) $4s4p({}^{3}P_{2}^{0}) \rightarrow 4s4p({}^{3}P_{1}^{0})$; (b) $4s4p({}^{1}P_{1}^{0}) \rightarrow 4s4p({}^{3}P_{2}^{0})$.

Звертає на себе увагу, як і слід було очікувати, різке зростання величини ймовірності заборонених як Е2, так і М1 радіаційних переходів, із збільшенням заряду ядра іона Z.

Як видно з таблиці 3.14, шукане зростання становить більше 8 порядків при переході від Zn - подібного іона галію до іону урану.

У таблиці 3.15 наведені результати нашого розрахунку ймовірностей M2 переходу $4s4p({}^{3}P_{1}^{0}) \rightarrow 4s4d({}^{3}D_{1})$ в спектрах іонів ізоелектронної серії ZnI, а також результати альтернативного розрахунку методом ДФ [9, 77, 81].

Таблиця 3.14 - Ймовірності заборонених M1 і E2 переходів в спектрах іонів ізоелектронної серії ZnI (наш розрахунок): (а) $4s4p({}^{3}P_{2}^{0}) \rightarrow 4s4p({}^{3}P_{1}^{0})$; (b) $4s4p({}^{1}P_{1}^{0}) \rightarrow 4s4p({}^{3}P_{2}^{0})$

Перехід	M1 (a)	E2 (a)	M1 (b)	E2 (b)
Ga^+	0.009(1)	0.065(-3)	0.053(1)	0.39(0)
As^{3+}	0.051(1)	0.018(-2)	0.015(2)	0.022(1)
<i>Kr</i> ⁶⁺	0.072(1)	0.034(-2)	0.033(2)	0.041(1)
Cd^{18+}	0.048(4)	0.132(1)	0.055(4)	0.034(3)
Xe^{24+}	0.042(5)	0.025(3)	0.034(5)	0.232(3)
Gd^{34+}	0.081(6)	0.118(4)	0.047(6)	0.047(5)
Yb^{40+}	0.039(7)	0.399(5)	0.145(6)	0.026(6)
Au^{49+}	0.028(8)	0.104(6)	0.119(7)	0.029(7)
Pb^{52+}	0.047(8)	0.067(7)	0.215(7)	0.058(7)
U^{62+}	0.036(9)	0.059(8)	0.128(8)	0.101(8)

Таблиця 3.15 - Ймовірності M2 переходу $4s4p({}^{3}P_{1}^{0}) \rightarrow 4s4d({}^{3}D_{1})$ в спектрах іонів ізоелектронної серії ZnI: наш розрахунок (а); метод ДФ (б) [9, 77, 81]

Перехід	M2 (a)	М2 (б)
<i>Kr</i> ⁶⁺	0.60(-12)	-
Cd^{18+}	0.26(-10)	0.68(-10)
Xe^{24+}	0.57(-10)	0.12(-9)
Gd^{34+}	0.13(-9)	0.27(-9)
Yb^{40+}	0.21(-9)	0.43(-9)
Au^{49+}	0.38(-9)	0.91(-9)
Pb^{52+}	0.54(-9)	-
U^{62+}	0.12(-8)	0.29(-8)

На жаль, будь-які експериментальні дані по розглянутим забороненим переходам в Zn - подібних іонах відсутні, тому представлені нами дані набувають істотне значення і можуть бути вкрай корисні для традиційно важливих завдань діагностики плазми, розробки і створення короткохвильових лазерів на багатозарядних іонах, астрофізичних додатків і т.і. [2,6,28, 68-71].

4 РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГІЙ І СИЛ ОСЦИЛЯТОРІВ В Li-подібних багатозарядних іонів та лужних атомів

4.1 Енергії та сили осциляторів радіаційних переходів в спектрах Li - подібних багатозарядних іонів

У даному підрозділі представлені розраховані теоретичні значення сил осциляторів для переходів nlj_{1/2} – n'l'j' (n=2-20, l=0-5, j=1/2-5/2) в спектрах Liподібних багатозарядних іонів із зарядом ядра Z=4-70 (зокрема, вивчалися іони S¹³⁺, Ar¹⁵⁺, Ca¹⁷⁺, Fe²³⁺, Zn²⁷⁺, Kr³³⁺, Zr³⁷⁺, Mo³⁹⁺, Sn⁴⁷⁺, Ho⁶⁴⁺, Er⁶⁵⁺, Tm⁶⁶⁺, Yb⁶⁷⁺). Розрахунок виконаний на основі двох методів: квантового дефекту (КД) і теорії (ТЗ) з модельним потенціалом (МП) нульового наближення. На рис. 4.1 в якості ілюстрації представлено залежність релятивістського КД μ_{2s} для стану 2*s* _{1/2} від параметра 1/z (заряд ядра) для ізоелектронної послідовності LiI.



Рис. 4.1. Зміна квантових дефектів µ_{2s} уздовж ізоелектронного ряду літію: Сплошная лінія – релятивістський КД, штрихова — нерелятивістський КД (кола – «емпіричні» значення КД; хрестики – розрахункові ДФ

В таблиці 4.1 представлені теоретичні та експериментальні значення рівнів енергій – E_n (в см⁻¹) для Li- подібного іона Ca¹⁷⁺: теорія - ДФ-ПКД, GQDA і ОПМП – наст.р-та; експеримент – [194].

Таблиця 4.1 - Теоретичні та експериментальні значення рівнів енергій $-E_n$, (a.e.) іона Ca¹⁷⁺: теорія -ДФ-ПКД, КД (метод квантового дефекту), ТЗ-МП - теорія збурень з модельним потенціалом нульового наближення - наст.р-ту; експеримент

Рівень	ДФ-ПКД	НастКД	НастТЗ-МР	Exp.
				[194]
2s _{1/2}	42.56	42.540	42.524	42.523
3s _{1/2}	18.59	18.521	18.482	18.479
2p _{1/2}	41.23	41.216	41.201	41.200
2p _{3/2}	41.03	41.022	41.012	41.011
3p _{1/2}	18.23	18.216	18.201	18.201
3p _{3/2}	18.17	18.156	18.141	18.141
4p _{1/2}	10.22	10.205	10.183	10 174
4p _{3/2}	10.20	10.186	10.164	10.174
5p _{1/2}	6.531	6.518	6.472	6 462
5p _{3/2}	6.519	6.507	6.459	0.402
бр _{1/2}	4.530	4.525	4.518	4 513
6p _{3/2}	4.523	4.518	4.512	т.915
7p _{1/2}	3.325	3.323	3.318	3.316

7p _{3/2}	3.321	3.318	3.315	

Аналіз показує, що шукані енергетичні дані, отримані на основі різних методів, корелюють один з одним, однак у порівнянні з експериментом методи GQDA і ОПМП дають більш точні результати, ніж метод ДФ з використанням ПКД. У таблиці 4.2 та 4.3 наведені розраховані теоретичні значення сил осциляторів для переходів $2s_{1/2} - 2p_{1/2,3/2}$ в спектрі ряду Li-подібних багатозарядних іонів S¹³⁺, Ca¹⁷⁺, Fe²³⁺, Zn²⁷⁺, Zr³⁷⁺, Mo³⁹⁺, Sn⁴⁷⁺, Tm⁶⁶⁺, Yb⁶⁷⁺. Для порівняння тут же представлені ДФ дані Zilitis, дані ab initio R-матричних обчислень методом RMBP, а також експериментальні (компіляційні) дані Martin-Weiss.

Таблиця 4.2 - Сили осцилляторів переходів $2s_{1/2} - 2p_{1/2,3/2}$ в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів

Мет.	ДФ	RMBP	Наст.	Наст.	Exp.
			КД	ТЗ-МП	
Ион	$2s_{1/2}$ - $2p_{1/2}$				
S ¹³⁺	0.0299	0.0295	0.0295	0.0301	0.0299
Ca ¹⁷⁺	0.0234	0.0259	0.0256	0.0262	0.0261
Fe ²³⁺	0.0177	—	0.0172	0.0179	0.018
Zn ²⁷⁺	0.0153	_	0.0149	0.0156	-
Kr ³³⁺	-	_	0.0127	0.0132	0.050
Zr ³⁷⁺	0.0114	_	0.0113	0.0118	-
Mo ³⁹⁺	_		0.0102	0.0107	0.011
Sn ⁴⁷⁺	0.0092	—	0.0091	0.0095	-
Ho ⁶⁴⁺	_	_	0.0072	0.0075	_
Er ⁶⁵⁺	_	_	0.0073	0.0073	-

Tm ⁶⁶⁺	_	—	0.0068	0.0071	-
Yb ⁶⁷⁺	0.0067		0.0066	0.0069	-

Таблиця 4.3 - Сили осцилляторів переходів 2s_{1/2} – 2p_{3/2} в спектрах Liподібних багатозарядних іонів: експеримент – Exp.; теорія – ДФ, R-матричний методом – RMBP, наст.- КД і ТЗ-МП

Мет.	ДФ	RMBP	Наст.	Наст.	Exp.
			КД	ТЗ-МП	
Ион	$2s_{1/2}$ - $2p_{3/2}$				
S ¹³⁺	0.0643	0.0633	0.0622	0.0641	0.0639
Ca ¹⁷⁺	0.0542	0.0575	0.0556	0.0578	0.0577
Fe ²³⁺	0.0482	_	0.0468	0.0480	0.0482
Zn ²⁷⁺	0.0477	_	0.0466	0.0475	-
Kr ³³⁺	-	_	0.0491	0.0514	0.013
Zr ³⁷⁺	0.0543	_	0.0519	0.0540	-
Mo ³⁹⁺	_		0.0537	0.0556	0.056
Sn ⁴⁷⁺	0.0686	—	0.0661	0.0684	-
Ho ⁶⁴⁺	_	_	0.1109	0.1143	-
Er ⁶⁵⁺	_	_	0.1107	0.1142	-
Tm ⁶⁶⁺	_	—	0.1104	0.1140	-
Yb ⁶⁷⁺	0.1170	—	0.1132	0.1167	-

Аналіз даних таблиць показує, що в цілому між теоретичними (ДФ з емпіричною і компіляційною підгонкою, RMBP і нашими моделями) та експериментальними даними є, принаймні, якісна згода. Відзначимо, що наші дані знаходяться в кращій згоді з експериментальними результатами, наявними для деяких з розглянутих іонів, ніж ДФ і RMBP дані, що можна, мабуть,

пояснити використанням оптимізованого одноквазічастічного уявлення при побудові базисів орбіталей релятивістського ab initio методу МП і коректним, ефективним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів, зокрема, ефекту ПО. Як показує наша оцінка, величина калібрувально-неінваріантного вкладу (тобто різниця між значеннями сили осциляторів, обчисленими при виборі для оператора переходу форми «довжини» і «швидкості») становить у середньому 0.1-0.3% загальної величини, що означає практичну еквівалентність результатів, отриманих при використанні кулонового калібрування і калібрування Бабушкіна. У таблицях 4.4 і 4.5 наведені розраховані теоретичні значення сил осциляторів для переходів 2s_{1/2} – np_j (n=3-12, j=1/2) в спектрах Li-подібних багатозарядних іонів Ca¹⁷⁺, Zr³⁷⁺ а також аналогічні дані, отримані з використанням емпіричної версії ПКД і ДФ дані Zilitis, дані ab initio обчисленний методом RMBP (для Zr³⁷⁺ дані відсутні), а також експериментальні (компіляційні) дані Martin-Weiss. Очевидно, що точність обчислення величин сил осциляторів в ПКД із зростанням головного квантового числа зростає, в той час як точність результатів ДФ розрахунку зменшується. Для великих значень головного квантового числа метод GQDA дає практично ті ж результати, що й метод GMPP. Слід зазначити розумну згоду наших даних з експериментальними даними для ряду 2-3 переходів в спектрі Ca¹⁷⁺.

Для Li - подібного багатозарядного іона Zr^{37+} експериментальні дані відсутні, тому отримані теоретичні результати представляються вкрай важливими. У таблиці 4.6 наведені наші результати по силам сил осциляторів (усереднені по мультиплеті) для цілої серії переходів nl-n'l' (n, n'=2-6, l=1,2) в спектрі іона Ca¹⁷⁺. Таблиця 4.4 - Значення сил осциляторів для переходів $2s_{1/2} - np_{1/2}$ у спектрі Ca^{17+} (див. текст)

		-	-		-	-
Перехід	ПКД	ДФ	RMBP	Exp.	Наст.	Наст.
					КД	ТЗ-МР
$2s_{1/2} - 3p_{1/2}$	_	_	0.126	0.123	0.120	0.122
$2s_{1/2} - 3p_{3/2}$	_	_	0.246	0.241	0.237	0.243
$2s_{1/2}$ -4p_{1/2}	_	_	—	_	0.028	0.029
$2s_{1/2}$ $8p_{1/2}$	2.54 ^a	2.53 ^a	_	—	2.52 ^a	2.55 ^a
$2s_{1/2} - 9p_{1/2}$	1.74 ^a	1.73 ^a	_	—	1.75 ^a	1.78 ^a
$2s_{1/2}$ -10p _{1/2}	1.24 ^a	1.24 ^a	_	—	1.24 ^a	1.25 ^a
$2s_{1/2}$ 11p_{1/2}	0.919 ^a	0.916 ^a	—	_	0.91 ^a	0.92 ^a
$2s_{1/2}$ - $12p_{1/2}$	0.70^{a}	0.698 ^a	_	_	0.70^{a}	0.71 ^a
$2s_{1/2} - 13p_{1/2}$	0.546 ^a	0.54 ^a	—	—	0.55 ^a	0.55 ^a

Примітка. ^a (10⁻³*gf*); 2s_{1/2}-3p_{1/2} gf=0.121 (КЭД-ТВ).

Таблиця 4.5 - Значення сил осциляторів (10² gf) для переходу $2s_{1/2} - np_{1/2}$ у Zr³⁷⁺ (див. текст)

Переход	Gf	gf	gf	gf
	ПКД	ДФ	КД	ТЗ-МП
2s _{1/2} -3p _{1/2}	13.7	13.3	13.585	13.684
-4p _{1/2}	3.22	3.22	3.188	3.232
-6p _{1/2}	0.680	0.681	0.677	0.682
-8p _{1/2}	0.258	0.257	0.258	0.260
-10p _{1/2}	0.126	0.124	0.124	0.125
-16p _{1/2}	0.0291	0.0285	0.0284	0.0287

$-20p_{1/2}$	0.0147	0.0143	0.0144	0.0144
--------------	--------	--------	--------	--------

Таблиця 4.6 - Сили осциляторів разних переходів у спектрі Ca¹⁷⁺ (наші дані)

2р-	gf	3p-	gf	4p-	gf	5p-	gf
3d	$6.781 \cdot 10^{-1}$	3d	$2.219 \cdot 10^{-2}$	3d	$1.305 \cdot 10^{-2}$	3d	$2.378 \cdot 10^{-3}$
4d	$1.229 \cdot 10^{-1}$	4d	$5.874 \cdot 10^{-1}$	4d	$4.334 \cdot 10^{-2}$	4d	$3.012 \cdot 10^{-2}$
5d	$4.662 \cdot 10^{-2}$	5d	$1.265 \cdot 10^{-1}$	5d	$4.558 \cdot 10^{-1}$	5d	$2.172 \cdot 10^{-1}$
6d	$2.128 \cdot 10^{-2}$	6d	$5.620 \cdot 10^{-2}$	6d	$1.502 \cdot 10^{-1}$	6d	$6.653 \cdot 10^{-1}$

У таблиці 4.7 аналогічні наші результати по силам осциляторів (усереднені по мультиплеті) наведені для цілої серії переходів nl - n'l' (n,n'=2-5, l=1,2) в спектрі Li- подібного многозарядного іона Fe²³⁺, який представляє величезний інтерес для астрофізичних додатків.

Таблиця 4.7 - Значення сил осциляторів разних переходів у спектрі Fe²³⁺ (наші дані)

3s-	gf	4s-	gf	2p-	gf	3p-	gf	4p-	gf
2p	$1.092 \cdot 10^{-2}$	2p	1.930·10 ⁻³	3d	6.488·10 ⁻¹	3d	$1.588 \cdot 10^{-2}$	3d	$6.682 \cdot 10^{-3}$
3p	$2.782 \cdot 10^{-2}$	3p	$2.895 \cdot 10^{-2}$	4d	1.185.10-1	4d	$4.668 \cdot 10^{-1}$	4d	$6.564 \cdot 10^{-2}$
4p	3.556·10 ⁻¹	4p	1.942.10-1	5d	$4.430 \cdot 10^{-2}$	5d	$1.002 \cdot 10^{-1}$	5d	$4.322 \cdot 10^{-1}$
5p	1.324.10-1	5p	8.963·10 ⁻²	6d	$2.018 \cdot 10^{-2}$	6d	$4.416 \cdot 10^{-2}$	6d	$1.172 \cdot 10^{-1}$

Аналіз наведених у таблицях 4.6 та 4.7 даних вказує на вкрай складний і нерегулярний характер зміни значень сил осциляторів залежно від розглянутого іона ізоелектронного послідовності, а також типу радіаційного переходу.

4.2 Розрахунок сил осциляторів у *Rb*-, *Cs*-подібних іонах

Rb-, *Cs* – подібні іони вивчені в значно меншому ступені, ніж наприклад, *Na-* і *K-* подібні іони. Для *Rb-* подібних іонів дані за рівнями енергії і CO маються в основному для перших членів серії, зокрема, для іонів *Rb1*, *SrII*, *Y III*, *ZrIV*, *NbV*, *MoVI*, причому, якщо, для перших трьох інформація досить детальна (наводяться значення сил осциляторів = CO для переходів n1-n'l' n,n' = 4-7, l,l' = 0-4), то для трьох інших вона мінімальна і стосується в основному лише деяких окремих взятих переходів (див. [132,196] і посилання в них).

Дані по СО для *Cs* подібних іонів представлені в літературі лише для іонів: *Cs1*, *Ball*, *Lalll*, *CeIV*, *PrV* (див. [132,196]), причому якщо для перших двох інформація досить докладна і стосується цілого ряду різних переходів, то для інших вона вельми фрагментарна і відноситься лише до деяких окремо взятих переходів.

До числа найбільш повних даних по вивченню *Rb-*, *Cs-* подібних іонів відносяться результати розрахунку CO згаданих іонів в нерелятивістському наближенні кулонівського екранованого потенціалу (ПКЕП) і в рамках модельного енергетичного підходу (МЕП). Відзначимо, що раніше на прикладі розрахунку нейтральних атомів лужних елементів була показана суттєва роль ефекту поляризації остова, особливо з переходом від атома *Li* (для резонансного переходу поляризації остову зменшує значення *gf* приблизно на 1%) до атома *Cs* (тут для резонансного переходу внесок ПО в величину *gf* становить 16% [132,195]). У даній роботі розглядалися Rb-подібні іони з z = 41-50 і розраховувалися CO переходів $5s^2S-5p^2P$, $6s^2S-6p^2P$, $5p^2P-5d^2D$, $5p^2P-4d^2D$ і *Cs*подобні іони з z = 57-62 і відповідно розраховувалися для CO для переходів: ns^2S $n'p^2P$ (n=6,7,8:n'=6,7), $np^2P-n'd^2D$ (n=6,8; n'=5-8). Результати розрахунку та екстраполяції СО зазначених переходів для шуканих *Rb-*, *Cs-* подібних іонів наведені в таблицях 4.8 і 4.9. Там же дані значення СО відповідних переходів, розраховані в наближеннях ПКЕП і МЕП, для Rb-подібних іонів *NbV*, *MoV1* і *Cs-*подібних іонів *LaIII* і *CrIV*. Як видно з таблиці, розраховані в цій роботі значення СО для ряду іонів добре узгоджуються з результатами, отриманими в напів-емпіричному наближенні ПКЕП. Для високозарядних членів приводяться дані отримані, по всій видимості, вперше.

Як показав аналіз отриманих даних, урахування ефекту поляризації остову зовнішнім електронам виявився досить суттєвим; з його урахуванням значення CO *gf* зменшилися для більшості переходів на 10-20% як для *Rb*, так і для *Cs* – подібних іонів.

		Nb V	MoVi			TcVII	RuVII I	RhIX	PdX
	ПКЭП МЭП Наст.		ПКЭП МЭП Наст.			Наст.	Наст.	Наст.	Наст.
$5s^2S-5p^2P$	1.12	1.16 1,13	1.34	1.35	1,31	1.38	1.47	1.54	1.60
$\frac{6s^2S}{6p^2P}$		1.55 1,52		1.56	1,51	1.55	1.59	1.66	1.72
$5s^2S - 6p^2P$		0.31*0,28*		0.24*	0,22*	0.17*	0.15*	0.13*	0.11*
$\frac{5p^2P}{5d^2D}$	1.20	1.22 1,21	1.23	1.24	1,22	1.24	1.27	1.31	1.35
$\frac{5p^2P}{4d^2D}$	0.11	0.106 0,109	0.10	0.098	0,095	0.085	0.075	0.066	0.058

Таблиця 4.8 - Сили осциляторів дипольних переходів у *Rb*-подібних іонах

Примітка. (0.31* =0.31·10⁻³).

	LaIII		Ce IV			PrV	NdVI	PmVII	SmVIII
	ПКЭП МЭП Наст		ПКЭП МЭП Наст			Наст	Наст	Наст	Наст
$\frac{6s^2S}{6p^2P}$	1.23	1.24 1,22	1.27	1.28	1,26	1.32	1.37	1.45	1.34
$7s^2S-6p^2P$	0.20	0.19 0,18	0.20	0.2	0,19	0.21	0.23	0.25	0.26
$7s^2S-7p^2P$	1.67	1.68 1,66		1.7	1,69	1.72	1.77	1.81	1.86
$\frac{8s^2S}{7p^2P}$		0.33 0,31		0.33	0,309	0,303	0,298	0,294	0.290
$8p^2P$ - $8d^2D$	1.62	1.6 1,58		1.92	1,90	2.27	2.61	2.88	3.13
$\frac{6p^2P}{6d^2D}$	1.12	1.1 1,09		1.25	1,23	1,51	1,84	2,10	2,37

Таблиця 4.9 - Сили осциляторів дипольних переходів у Cs-подібних іонах

4.3 Розрахунок сил осциляторів у Fr - подібних іонах

Fr – подібні іони відносяться до числа практично зовсім невивчених як теоретично, так і експериментально іонів. Експериментальні дані до теперішнього часу тут зовсім відсутні, а єдине більш менш повне теоретичне дослідження - розрахунок в рамках нерелятівістского наближення ПКЕП СО для ряду переходів в іоні *Rall*. Тут проведений розрахунок СО для ряду дипольних переходів в іонах із зарядом ядра z = 88-92. Результати розрахунків та

екстраполяції CO переходів: 7s ²S-7p ²P, 7p ²P – 8s ²S, 8s ²S – 8p ²P, 7p²P-6d²D, $7p^{2}P-7d^{2}D$, $8p^{2}P-7d^{2}D$ наведені в таблиці 4.10.

Таблиця 4.10- Сили осциляторів дипольних переходів у *Fr*-подібних іонах.

		Іон								
_ ·		RaII								
Перехід	пкэп	МЭП	Наст.	AcIII	ThIV	PrV	UVI			
	inton		р-та							
$7s^2S_{1/2}-7p^2P_{13/22}$	1,266	1,27	1,25	1,37	1,46	1,58	1,67			
$7p^2 P_{13/22} - 8s^2 S_{1/2}$	0,239	0,24	0,21	0,22	0,25	0,27	0,29			
$8s^2S_{1/2}-8p^2P_{13/22}$	1,746	1,75	1,69	1,82	1,91	1,97	2,08			
$7p^2 P_{13/22}$ -6 $d^2 D_{35/22}$	0,128	0,128	0,122	0,123	0,125	0,126	0,127			
$7p^{2}P_{13/22}$ -7 $d^{2}D_{35/22}$	0,868	0,87	0,85	1,03	1,23	1,41	1,57			
$8p^{2}P_{13/22}-7d^{2}D_{35/22}$	0,236	0,24	0,21	0,27	0,34	0,40	0,47			

Експериментальних даних і результатів будь-яких прецизійних розрахунків по СО для Fr- подібних іонів, по всій видимості, немає, що оцінку точності розрахунку ускладнює шуканих характеристик ДЛЯ високорозрядних членів. Як показує аналіз, для більшості членів з розглянутих переходів роль ефекту поляризації остову зовнішнім електроном виявляється достатньо суттєвою (зменшення величини gf становить до 15%). Зауважимо також, що для Fr- подібних іонів, як і, наприклад, для Na-подібних іонів, можуть мати місце відомі складності як в постановці експерименту та інтерпретації експериментальних результатів, так і в порівнянні розрахункових і експериментальних значень сил осциляторів (див. [132]), де сказане аналізується детально для іонів ізоелектронного серії *Na1*, а також іонів серії *A11*.

4.4 Розрахунок рівнів енергій та сил осциляторів у Ga-подібних іонів

Ga- подібні іони мають однотипну конфігурацію зовнішніх електронів, як і Al- подібні, і для них завдання розрахунку низьколежачих збуджених термів і сил осциляторів переходів між ними зводилося до одноквазічастічної, зокрема, розглядався рух зовнішнього *nlj* электрона над *zn*-подібним остовом заповнених електронних оболонок: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^2$. Коректний розгляд *Ga*-подібної системи передбачає, взагалі кажучи, рішення трьох квазічастичної задачі про рух зовнішних 3-х електронів в полі остова, утвореного К, L, М підоболонками. Таблиця 4.11 містить результати розрахунку енергій рівнів (в 10 см⁻¹) низько лежачих конфігурацій 4s²4p ²P_{1/2,3/2}, 4d ²D_{3/2,5/2}, 5s ²S_{1/2}, 5p ²P_{1/2,3/2} Ga - подібних іонів із зарядом ядра z = 31-36. Для ряду іонів є експериментальні дані, які також наведено в таблиці. В області великих z (z>35) експериментальні дані відсутні, і оцінка якості розрахунку утруднена. Зі зміною z в Ga-подібних спектрах важливу роль, мабуть, можуть грати так звані "Plunging" конфігурації типу 4s4pnd енергія яких на початку серії перевищує енергію іонізації, однак зі зростанням z вони опускаються в дискретний спектр, викликаючи взаємодію конфігурацій, яке може приводити до значної зміни положення рівнів енергії. У таблиці 4.12 представлені деякі з результатів розрахунку СО переходів в Ga подібних спектрах, зокрема, значення CO дипольних переходів $4p^2P - 5s^2S$, $4p^2P$ $-4d^2D$ в атомі Gal, отриманих на основі розрахунків в рамках різних методів: b, с, d- релятивістським методом XФ з урахуванням ефекту поляризації остову в хвильових функціях початкового і кінцевого станів електрона; е – теж саме, але з урахуванням поляризації остову в матричному елементі переходу [195]; *f* - результати розрахунку на основі МЕП і методу емпіричного модельного потенціалу, *g* - результати цієї роботи з урахуванням ефекту поляризації остова; *a* - експериментальні значення (див. також [132]).

Таблиця 4.11 – Енергії рівнів *Ga*-подібних іонів, розрахованні від енергії остова

Іон	$4s^24p\ ^2P_{1/2}$	$4s4p {}^{2}P_{3/2}$	$4s^24d\ ^2D_{3/2}$	$4s^24d\ ^2D_{5/2}$
Ga*I	4839	4756	1361	1360
Gell	12852	12675	4768	4751
AsIII	34283	33705	23801	23753
SeIV	74139	73288	60822	60762
BrV	134128	133519	115330	115267
Kr*VI	206965	206154	184753	184661

Примітка. Для іонів, відзначених *, наведені енергії співпадають з експериментальними.

Таблиця 4.12 - Сили осциляторів в Gal

Перехід	J-J'	А	b	с	d	Е	f	g
$4p^2P-5s^2S$	$\frac{3}{2}\frac{1}{2}$	0.128	0.143	0.148	0.151	0.139	0.108	0,113
	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	0.30			0.48	0.34	0.29	0.29
$4p^2P-4d^2D$	$\frac{3}{2}\frac{3}{2}$	0.036			0.049	0.035	0.046	0.041
	$\frac{3}{2}\frac{5}{2}$	0.27			0.44	0.32	0.31	0.31

Як видно з таблиці 4.12, вклад поляризаційної поправки виявляється дуже суттєвим (див. колонки *e* і *g*). Різниця між значеннями *gf* в *e* і *g* колонках

пояснюється, по-перше, відмінністю методик урахування поляризації остову (застосована тут процедура є більш послідовною і коректною), по-друге, використаний в розрахунках базис хвильових функцій генерується в першому випадку релятивістським гамильтоніаном Хартрі-Фока, а в другому релятивістським гамильтоніаном Дірака з ефективним потенціалом *V_c*.

Аналіз інших наведених значень gf (колонки b, c, d) показує, що розрахунок без урахування поляризації остова, принаймні, для 4-4 переходів, а також 4-5 переходів не дають прийнятних з погляду точності результатів. Загальний аналіз всіх результатів показує, що в одних випадках для даних іонів є гарна згода з експериментом, в інших випадках вона відсутня. Слід пам'ятати, що використаний метод з успіхом застосовувався (див. вище) в розрахунках іонів ізоелектронних серій атомів лужних елементів. Для більш складних систем, зокрема, із зовнішньою конфігурацією електронів коректні дані виходили в основному для високозарядних членів серії (див. [195]), в той час як поблизу нейтрального кінця серії можуть мати місце відомі аномалії, внаслідок чого при аналізі розрахункових даних потрібно відома обережність. З цієї точки зору кореляції Ga- подібні іони відносяться до числа складних. Саме з цієї причини вони, практично, не розраховувалися досі в рамках традиційних апріорних підходів. Використане в роботі одноелектронне наближення, хоча і коригувалося на випадок урахування поляризаційних ефектів, тим не менш, не може повною мірою врахувати складні, включаючи багаточастинкові, кореляційні ефекти. Більш адекватним тут є використання трехквазічастичного наближення. У кожному разі, слід підкреслити, що отримані в розрахунку дані цілком прийнятні і можуть бути корисно використані в цілому ряді програм, насамперед, астрофізичних.

ВИСНОВКИ

1. Вперше побудована послідовна, калібровочно- інваріантна релятивістська теорія заборонених радіаційних переходів в спектрах важких атомних систем і багатозарядних іонів (істотно релятивістські системи), що базується на формалізмі КЕД ТЗ (S-матричний формалізм Гелл-Мана і Лоу- енергетичний підхід) з використанням оптимізованого одноквазічасткового 1 - QP уявлення для хвильових функцій і прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів як ефектів другого і вище порядків ТЗ.

2. Вперше в теорії заборонених радіаційних переходів в спектрах атомів та іонів імплементована схема прецизійного врахування ефектів поляризаційної взаємодії зовнішніх QP через остов заповнених електронних оболонок та екранування QP, яка заснована на використанні ефективних потенціалів.

3. Апробація нової теорії з користуванням калібровочно- інваріантного 1-QP уявлення та урахуванням суттєвого (до 30%) внеску за рахунок поляризації остова в розрахунках енергій, ймовірностей, сил осциляторів дипольних Е1 (для $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2}), 5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2}),$ переходів тесту) електричного E2 квадрупольного переходу 5d⁹6s²(D_{5/2},D_{3/2})- 5d¹⁰6s (S_{1/2}) V однократно іонізованому атомі Hg⁺ і переходів між рівнями конфігурацій $3s^{2}3p^{5}$, $3s3p^{6}$, $3p^{4}3d$, $3p^{4}4s$ y однократно іонізованому атомі Ar⁺ (два рівня з J=1/2, J=3/2 конфігурації $3s^23p^5$ і 37 збуджених рівнів з J=1/2, J=3/2 конфігурацій 3s3p⁶, 3p⁴3d, 3p⁴4s; з рівня J≤5/2 - Е1 перехід, з рівнів з J=7/2 - М2 перехід в основний стан; з рівнів з J=7/2, 9/2 конфігурації $3p^43d$ і ін. - E2 і M1 переходи нижче лежачі рівні тієї ж парності) її ефективність і прийнятну точність. Показано, що в рамках запропонованої теорії калібровочно- неінваріантний внесок у радіаційну ширину атомного рівня ΔE_{niny} , на відміну від стандартних

теорій Хартрі-Фока і Дірака-Фока: ΔE_{ninv} ~10-40%, виявляється практично нульовим (десяті частки %).

4. вивчення спектрів важких атомів лантаноїдів EuI, YbI і Проведено виконаний розрахунок енергій і ймовірностей радіаційних переходів типу $4f^{7}(^{8}S)6s^{2} {}^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6snp {}^{8}P_{5/2, 7/2, 9/2}$ (n=6-8) в спектрі Eul і $4f^{14}6s^{2} {}^{1}S_{0}$ - $4f^{14}6snp$ ¹P₁ (n=6,7) в YbI. Порівняння розвиненою теорії ($\Delta E_{ninv} < 1\%$) з альтернативними теоріями, зокрема, кулонівським наближенням (при різних калібруваннях фотонного пропагатора $\Delta E_{ninv} \sim до 50\%$) і багатоконфігураційною теорією ДФ (ΔE_{ninv} ~до 15%) показує, що обчислені сили осциляторів gf істотно краще узгоджуються з експериментом, при цьому вкрай значний внесок, ефектами 30%). обумовлений кореляційними (до Зазначено. шо $4f^{7}(^{8}S)6s^{28}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p^{8}P_{9/2},$ переходів енергії експериментальні $4f^{7}(^{8}S)6s^{28}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s7p^{8}P_{7/2}$ і gf для $4f^{7}(^{8}S)6s^{2} \ ^{8}S_{7/2} \rightarrow 4f^{7}(^{8}S)6s8p \ ^{8}P_{9/2}$ в EuI тримають помилку, що в принципі пояснюється вкрай високою складністю шуканого спектра.

5. Наведені результати розрахунку енергій, ймовірностей А, сил різних типів радіаційних переходів між рівнями конфігурацій осциляторів $4s^{2}(^{1}S_{0})$, 4s4p ($^{1,3}P_{J}^{0}$), 4s4d ($^{1,3}D_{J}^{0}$) в спектрі Zn-подібних іонів з зарядом ядра Z~32-92. Показано, що альтернативні дані за ймовірностями переходів в XФ і ДФ теоріях з використанням різних калібрувань фотонного пропагатора (оператор переходу у формі довжини і швидкості) відрізняються один від одного в середньому до 15%, в той час як у нашій теорії відмінність даних не перевищує 0,1%. С збільшенням Z має місце різке зростання величини А заборонених Е2, М1 переходів, зокрема, більше 8 порядків величини при переході від Ga^+ до U^{62+} . Значна частина результатів отримана вперше.

6. Наведені результати розрахунку енергій Е і ймовірностей А радіаційних переходів між рівнями конфігурацій в спектрах Li-,Rb,-Cs-,Fr-,Ga-подібних іонів. Порівняння отриманих в даній роботі результатів з альтернативними ДФ та ін.

теоретичними даними для Е, А ряду переходів показує найкращу згоду нашіх даних, які основані на розрахунку методом модельного потенціалу в рамках релятивістського енергетичного підходу та ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення. Розраховані залежності сил осциляторів від Z виявляють певні нерегулярності у всіх залежностях, пов'язані зі зміною ступеня взаємодії різних конфігурацій в шуканих спектрах, і сильну залежність величин сил осциляторів від ступеня врахування кореляційних і релятивістських ефектів. Переважна частина даних з прийнятною точністю отримана вперше і вкрай важлива для вирішення завдань діагностики плазми, розробки короткохвильових лазерів на багатозарядних іонах, астрофізичних додатків і т.і.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем/ Глушков Александр Васильевич.- Одесса: Астропринт, 2008.- 900С.
- Glushkov A.V., Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge noninvariant contributions/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//Phys. Lett.A.-1992.-Vol.170(1).-P.33-38.
- Глушков А.В. Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем/ Глушков Александр Васильевич.-Одесса: Астропринт.-2006.-400С.
- Glushkov A.V., Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Florko T.A., Sukharev D.E., Gurnitskaya E.P., Lovett L.// Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.- P.507-522.
- 5. Grant I.P., Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules/ Grant I.P.-Oxford, 2008.-650P.
- Ivanova E.P., Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling/ Ivanova E.P., Grant I.P.//J.Phys.B.-1998.-Vol.31.-P.2871-2883.
- Froese Fischer C., Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences/ Froese Fischer C., Tachiev G.//Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2004.-Vol.87.-P.1–184.
- 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.//Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2006.-Vol.92.-P.607–812.

- Safronova U.I., Relativistic many-body calculations of multipole (E1, M1, E2, M2, E3, and M3) transition wavelengths and rates between 31-1 41' excited and ground states in nickel-like ions/ Safronova U.I., Safronova A.S., Hamasha, S.M., Beiersdorfer P.//Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2006.-Vol.92.-P.47–104.
- Глушков А.В., Расчет спектров Ne-, F-подобных ионов методом релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением / Глушков А.В., Иванова Е.П.//В кн.: Спектроскопия многозарядных ионов. Под ред. Сафроновой У.И.-М.:Наука.-1986.-С.5-95.
- 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
- Burkhalter P., Cohen L., Cowan R., Feldman U., Observation of the dielectronic satellite spectra of Na-like ions in laser-produced plasma// J.Opt.Soc.Am.-1979.-Vol.69,N8.-P.1133-1140; Berry H., Desesquelles J., Cheng K.T., Schektman R. Dielectronic satellite spectrum of neon-like ions from beam-foil experiment//Phys.Rev.a.-1978.-Vol.18,N2.-P.546-551; Burkhalter P., Schneider R., Dozier C.M., Cowan R., Dielectronic satellite spectra of Na-like ions in laserproduced plasma// Phys.Rev.A.-1978.-Vol.18-P.718-725.
- Safronova U.I., Relativistic many-body calculations of electric dipole lifetimes, transition rates,oscillator strengths for 21⁻¹31' states in Ne-like ions /Safronova U.I., Cowan T.,Safronova M.S.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2005.-Vol.38.-P.2741-2763.
- 14. Хецелиус О.Ю. Сверхтонкая структура атомных спектров/ Хецелиус Ольга Юрьевна.-Одесса: Экология.-2006.-220С.
- 15. Окс Е.А. Спектроскопия плазмы с квазимонохроматическими электрическими полями/ Окс Евгений Александрович.-М.:Энергоатомиздат.-1990.-240С.
- 16. Jupen W. Transitions in Al-like, Mg-like, Ne-like Kr, Mo, observed in JET Tokamak/ Jupen W., Denne B., Martinson I.//Phys.Scripta.-1990-Vol.41.-P.669-674.
- Photonic, Electronic, Atomic Collisions. Eds. Aumar F. and Winter H.-Singapore: World Sci.-2007. - 650P.

- Ахиезер А.И. Квантовая электродинамика/ Ахиезер Александр Ильич, Берестецкий Владимир Борисович.- М.: Физматгиз, 1981.-452С.
- Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П., Квантовая электродинамика/ Берестецкий Владимир Борисович, Лифшиц Евгений Михайлович, Питаевский Лев Петрович.-М.:Наука,1989.-720С.
- Браун М.А. Релятивистская теория атома/ Браун Михаил Александрович, Гурчумелия Александр Давидович, Сафронова Ульяна Ивановна.- М.: Наука, 1984.- 268С.
- 21. Durand P., Ab initio quantum chemistry methods/ Durand P., Malrieu J.-N-Y.: Wiley, 1987.
- 22. Wilson S., Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry/ Wilson Steven.- Chichester: Wiley, 2003.-680P.
- 23. Botham C. Relativistic effects in atoms and molecules/ Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G.-Vancouver: Elseiver,1981.- 545p.
- 24. Собельман И. Введение в теорию атомных спектров/Собельман И.- М.: Наука, 1977.-334С.
- 25. Аглицкий Е.В. Спектроскопия автоионизационных состояний атомных систем/ Аглицкий Ефим Валентинович, Сафронова Ульяна Ивановна.- М.: Энергоатомиздат,1985.-160С.
- 26. Дмитриев Ю.Ю. Релятивистские эффекты в спектрах атомных систем/ Дмитриев Юрий Юрьевич, Климчицкая Галина Леонидовна, Лабзовский Леонтий Нахимович. -М: Энергоатомиздат, 1984.-230С.
- Dorofeev D., Method of quantum defect Green's function for calculating dynamic polarizability/ Dorofeev D., Zon B., Kretinin I., Chernov V.//Opt.Spectr.-2005-Vol.99.-P.540-548.
- Safronova M.S., Relativistic many-body theory calculation of the Stark-induced amplitude of the 6p-7p transition in thalium/ Safronova M.S., Johnson W.R., Safronova U.I., Cowan T.//Phys.Rev.A.-2006.-Vol.74.-P.022504 (8p.).

- 29. Slater J.C., Consistent Field Method for Molecules and Solids: Quantum Theory of Molecules and Solids/Slater J.C.-N-Y.: McGraw-Hill, 1974.-Vol.4.-P.1-780.
- 30. Glushkov A.V., Electron-β-Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β-Decay parameters/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L.// Advances in the Theory of Atoms, Molecular Systems and Condensed Matter (Berlin, Springer).-2009.-Vol.19.-P.301-328.
- 31. Safronova U.I., Third-order relativistic many-body calculations of energies, transition rates, hyperfine constants, and blackbody radiation shift in ¹⁷¹Yb⁺/Safronova U.I., Safronova M.S. //Phys. Rev. A.-2009.-Vol.79.-P.022512
- Bieron J., Lifetime and hyperfine structure of ³D₂ state of radium/ Bieron J, Froese-Fischer C., Fritzsche S., Pachucki K.,Lifetime //J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2004.-Vol.37.-P.L305-311.
- 33. 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.
- Khetselius O.Yu., Relativistic Perturbation Theory Calculation of the Hyperfine Structure Parameters for Some Heavy-Element Isotopes/ Khetselius O.Yu.//Internat. Journal of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109,N14.-P. 3330-3335.
- Indelicato P. Relativistic effects in few-electron heavy atoms. Ab initio evaluation of levels energy and transition probabilities/ Indelicato P.//Phys.Scripta T-1996.-Vol.65.-P.57-62.
- 36. Glushkov A.V. Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross-sections and strengths: Ne-like ions / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., Prepelitsa G.P.// Int. Journ.Quant.Chem.-2005.-Vol.104, N4 .-P. 562-569.
- 37. Volz U., Precision lifetime measurements on alkali atoms on helium by beam-gaslaser spectroscopy/ Volz U., Schmoranzer H. //Phys.Scr.-1996.-Vol.65,N1.-P.48-56.
- 38. Seely J.,Laser-Produced Spectra and QED Effects for Fe-,Co-,Cu-like ions of Pb,Bi,Th,U/Seely J., Ekberg J., Brown C.//Phys.Rev.Lett.-1996.-Vol.57-P.2924-26.

- 39. Klaft I., Precision laser spectroscopy of ground state hyperfine splitting of H-like ²⁰⁹Bi⁸²⁺/Klaft I., Borneis S., Engel T., Fricke B., Grieser R., Huber G., Kuhl T., Marx D., Neumann R., Schroder S., Seelig P., Volker L //Phys.Rev.Lett.-1994.-Vol.73.-P.2425-2427.
- 40. Okada S., Precision spectroscopy of Kaonic Helium 3d → 2p X-rays/ Okada S., Beer G., Bhang H. etal//Nucl.Phys.A.-2007.-Vol.790.-P.663-666.
- Mandelstam S.L., X-ray spectra of Ne-like Ba, La, Ce and Pr ions/ Mandelstam S.L., Aglitsky E.V., Antsiferov P.S., Panin A.M.// Canad. Journ.of Phys.1984.-Vol.62,N10.-P.1923-1930
- Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/ Летохов Владилен Степанович.-М.: Наука.-1983.-408С.; Laser Specktroskopie.-Berlin: Akad.-Verlag,1977.-330P.
- 43. Иванов Л.Н. Селективная ионизация атомов в электрическом и лазерном полях/ Иванов Л.Н., Летохов В.С.//Квантовая Электроника.-1975.-Т.2.-С.585-590.
- 44. Глушков А.В. КЭД теория сдвига и деформации радиационных атомных линий в поле лазерного излучения/ Глушков А.В., Иванов Л.Н.//Труды 3 сем. по Атом. Спектр. – Черноголовка: ФИХФ АН СССР, 1992. –С.113-114; Препринт Института Спектроскопии АН СССР №АЅ-3, Москва-Троицк, 1991.
- 45. Ivanova E.P. Modern Trends in Spectroscopy of multi-charged Ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V. // Physics Rep.-1988.-Vol.166,N6.-P.315-390.
- Ivanov L.N. Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Nalike spectra/ Ivanov L.N.,Ivanova E.P.// Atom.Data Nucl .Data Tab.-1979.-Vol.24.-P.95-121.
- 47. 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.
- 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.

- 49. 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.
- 50. Ivanova E.P., Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence/ Ivanova E.P., Gulov A.V.// Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.-1991.-Vol.49.-P.1-64.
- 51. Ivanova E.P., Calculation of Na-like spectra–satellites to 2-3 transitions in Ne-like ions/Ivanova E.P.,Gogava A.//В кн.: Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов. Под ред. Сафроновой У.И.-М.: Наука.-1988.-С.212-256.
- 52. Видолова-Ангелова Е., Природа узких и аномально узких резонансов в атомах редкоземельных элементов и их отрицательных ионах/ Видолова-Ангелова Е., Иванов Л.Н., Иванова Е.П., Летохов В.С.//Изв.АН СССР. Сер.Физ.-1981.-T.45,N12.-C.2300-2304.
- Vidolova-Angelova E., Autoionization decay of excited Rydberg Tm states/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N.//J. Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1988.-Vol.21.-P.3877-3890.
- 54. Vidolova-Angelova E., Relativistic perturbation method for investigating the radiation decay of highly excited many electron atoms: Tm atom/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., Ivanova E.P., Angelov D.A.// J.Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.-1986.-Vol.19.-P.2053-2069.
- 55. 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.
- 56.Aglitskii E.V., Theoretical and Experimental investigation of satellite structure of $1s_{1s^{2}}s_{0} 1s_{3p}P_{1}$ line in He-like ions/ Aglitskii E.V., Panin A.S., Safronova U.I. etal// Journ.de Phys. –1988.-Vol.49, N3.-C1-267-C1-269.
- Semenov R.I. Semiempirical calculation of atomic Characteristics of the 2p53d,4d, 2p5ns (n=3–10) Configurations of Ne/ Semenov R.I., Kapel'kina E.L., Tsygankova G.A., Tsygankov M.A.//Optics and Spectroscopy.-2005.-Vol.99,N4.-P.536-539.
- 58. Беков Г.И. Лазерная спектроскопия узких двукратно возбужденных автоионизационных состояний атома иттербия/ Беков Г.И., Видолова-Ангелова Е., Иванов Л.Н., Летохов В.С., Мишин В. // ЖЭТФ.- 1981.-Т.80,N3.-С.866-878.
- Band I.M., Dirac-Fock internal conversion coefficients/ Band I.M., Trzhaskovskaya M.B., Nestor Jr. C.W., Tikkanen P., Raman S. //<u>Atomic Data and</u> <u>Nuclear Data Tables</u>.-2002.-Vol.81.-P.1-334.
- 60. Froese-Fischer C., Calculation of negative ions in multiconfiguration Hartree-Fock approximation:Ca, Sr / Froese-Fischer C.// Phys.Rev.A.-1989.-Vol.39.- P.963-970.
- 61. Weiss A., Hartree-Fock line strengths for lithium, sodium and copper isoelectronic sequences/ Weiss A.//J.Quant.Spectr. Radiat.Transfer.-1977.-Vol.18.- P.481-491.
- 62. 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 (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.-P.541-558.
- Берка Ф. Атомы в астрофизике/Под ред. Берка Ф., Эйснера И., Хаммера Д., Персиваль И.- М.: Мир.-1986.-340С.
- 64. Глушков А.В. Атом в электромагнитном поле/ Глушков Александр Васильевич.-Киев:КНТ, 2006.-400С.
- 65. Радциг А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике/ Радциг А.А., Смирнов Б.М.- М.: Энергоиздат, 1986.- 240С.
- 66. Ivanova E.P., High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. //Phys.Scripta –1985.-Vol.32,N4.-P.512-524.
- Gaigalas G., Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations for hyperfinestructure parameters and scalar-pseudoscalar interaction constant of ¹³³Cs/ Gaigalas G.,Gaidamauskas E.,Jonsson P.//Journ.of Physics CS.-2008-Vol.130.-P.012008(6p).

- Sahoo B. Magnetic dipole hyperfine interactions in ¹³⁷Ba⁺ and accuracies of neutral weak interaction matrix elements/Sahoo B.,Gopakumar G.,Chaudhuri R.,Das B., Merlitz H.,Mahapatra U., Makherjee D.//Phys.Rev.A-2003.-Vol.68.-P.040501 (8p).
- Khetselius O.Yu., Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products/ Khetselius O.Yu. //Phys. Scripta.T.-2009.-Vol.135.-P. 305090 (8p.).
- Scott N.S., 2DRMP: A suite of two-dimensional R-matrix propagation codes/ Scott N.S., Scott M.P., Burke P.G., Stitt T., Faro-Maza V., Denis C., Maniopoulou A.//Comp. Phys. Commun.-2009.-Vol.180.-P.2424–2449.
- Johnson W.R., Combined effect of coherent Z exchange and the hyperfine interaction in the atomic parity-non-conserving interaction/ Johnson W.R., Safronova M.S., Safronova U.I.//Phys. Rev. A.-2003.-Vol.67.-P.062106 (10p).
- 72. Glukhov I., Thermal photoionization of Rydberg states in He &alkali-metal atoms/ Glukhov I., Ovsiannikov V.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2009.-Vol.42.-P.075001.
- Jamieson M.J. Variational calculation of the dynamic polarizabilities of rare-earth metal atoms/ Jamieson M.J., Drake G.W.F., Dalgarno A.//Phys.Rev. A.-1995.-Vol.51.-P.3358-3370.
- Cohen J. Capture of antiprotons by some radioactive atoms and ions/ Cohen J. // Phys.Rev.A.-2004.-Vol.69.-P.022501-1-022501-10.
- Mikhailenko V.I., Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external electric field/ Mikhailenko V.I., Kuznetsova A.A.// Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2009.-N4.-P.12-17.
- Tomaselli M., Hyperfine splitting of hydrogenlike thallium/ Tomaselli M, Kuhl T., Nortershauser W., Borneis S., Dax A., Marx D, Wang H, Fritzsche S. //Phys.Rev. A.-2002.-Vol.65.-P.022502 1-9.
- 77. Коточигова С.А., Идентификация ВУФ спектров поглощения EuI 1. Расчет состояний 4f⁷5d(⁹D)np/Коточигова С.А.//Опт.Спектр.-1983.-Vol.55.-P.422-428.
- Андерсон Е.К., Расчет параметров некоторых E1,E2,E3,M1,M2 переходов в изоэлектронной последовательности Zn/ Андерсон Е.К., Андерсон Е.М.// Опт. Спектр.-1983.-Vol.54.-P.955-960.

- 79. Kunisz M.D., Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths/ Kunisz M.D.// Acta Phys.Polon.-1982.-Vol.a62.-P.285-296.
- 80.Островский В.Н., Радиационные переходы во внешних оболочках иона Hg⁺/ Островский В.Н., Шейнерман С.А.//Опт. Спектр.-1989.-Vol.67.-P.16-22.
- 81.Ivanova E.P., The possibility of X-ray lasers based on inner-shell transitions of Nelike ions/ Ivanova E.P., Zinoviev N.A. // Phys. Lett.A.–2000– V.274 – P.239-246.
- Glushkov A.V. DC Strong-Field Stark-Effect: consistent quantum-me-chanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N. // J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1993.-Vol.26, N16.-P.L379-L386.
- Blushkov A.V. Cooperative laser- electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multicharged ion in laser field/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Chernyakova Y.G., Svinarenko A.A.//Int.Journ. Quant. Chem.-2004.-Vol.99.-P.889-898.
- 84. Глушков А.В., Отрицательные ионы инертных газов/ Глушков А.В.//Письма в ЖЭТФ.-1992.-Т.55.-С.104-107; JETP Lett.-1992.-Vol.55.-P.97-100.
- 85. Tiwary S.N., The effects of correlation, relativity, quantum electrodynamics, nuclear size and parity non-conservation in alkali atoms and alkali-like ions/Tiwary S.N.// Riv.del Nuovo Cimento.-1995.-Vol.18,N9.-P.1-26.
- 86.Koshelev K.V. The interelectron interaction corrections to the hyperfine structure of the 2p_{3/2} state in Li-like, B-like and N-like Bi ions/ Koshelev K.V., Labzowsky L.N., Tupitsyn I.I.//J.Phys.B.-2004.-Vol.37.-P.843-851.
- 87. Bieron J. Degree of accuracy in determining the nuclear electric quadrupole moment of radium/Bieron J., Pyykkő P.//Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.032502.
- 88.Bieron J. Nuclear quadrupole moment of ²⁰¹Hg/ Bieron J., Pyykkő P., Jonsson P.//Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.012502.
- 89. Glushkov A.V. QED calculation of heavy multicharged ions with account for the correlation, radiative and nuclear effects/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.// Recent Advances in Theory of Physical and Chemical Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.285-300.

- 90.Piecuch P., Method of Moments of Coupled Cluster Equations Employing Multi-Reference Perturbation Theory Wavefunctions: General Formalism, Diagrammatic Formulation, Implementation /Piecuch P., Wloch M., Gour J., Dean D., Hjorth-Jensen M., Papenbrock T.// Nuclei and Mesoscopic Physics, AIP vol. 995, ed. by V. Zelevinsky (American Institute of Physics, Melville).- N-Y.-2005.-P.28-84.
- 91. Derevianko A. Dressing lines and vertices in calculations of matrix elements with the coupled-cluster method and determination of Cs atomic properties/ Derevianko A., Porsev S.G.// Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.032509-1-10
- 92. Basar Gu. Hyperfine structure investigations of MnI: Experimental and theoretical studies of the hyperfine structure in the even configurations/ Basar Gu., Basar Go., Acar G., Ozturk I.K., Kroger S.// Phys.Scripta.-2003.-Vol.67.-P.476-484.
- 93. Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Nonlinear Effects. Autoionization Resonances in Tm / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Borik S.A., Shpinareva I.M., Antonenko T. // Journ. of Techn. Phys.- 1997.-Vol.38,N2.- P.211-214.
- 94. Grance M. Revised energy levels for neutral atoms and ions/ Grance M. // Atomic Data.-1973.-Vol.5.-P.185-220.
- 95. Luc-Koenig E. Eigenchannel R-matrix study of two-photon processes including above-threshold ionization in Mg/ Luc-Koenig E., Lyras A., Lecomte J.-M., Aymar M. //J.Phys.B:At. Mol. Opt. Phys.-1997.-Vol.30.-P.5213-5232.
- 96. Johnson W.R., Relativistic random-phase approximation/ Johnson W.R.,Lin C.D.,Cheng K.T.// Phys.Scr.-1980.-Vol.21,N3.-P.409-422.
- 97. Johnson W. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines/ Johnson W., Sapistein J., Blundell S.// Phys.Rev.A.-1988.-Vol.37.-P.307-315.
- 98. Indelicato P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method/ Indelicato P., Desclaux J.P.// Phys.Scripta.-1993.-Vol.46.-P.110-115.
- 99.Koc K., Multi-reference relativistic configuration interaction calculations for 2s²2p²P_{3/2}-²P_{1/2} M1 and E2 transitions in boron isoelectronic sequence/ Koc K.// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.L.93-98.

- 100. Рудзикас З.Б., Теоретические спектры излучения многозарядных ионов в плазме / Рудзикас З.Б., Киселюс Р.С., Купляускене А.В.// В кн.: Спектроскопия многозарядных ионов.Под ред. Сафроновой У.И.:-М.: Наука, 1991.-С.52-75.
- 101. Глушков А.В. Релятивистский расчет спектроскопических характеристик Cl-, Ar-, К-подобных многозарядных ионов/Глушков А.В., Малиновская С.В., Филатов В.В.// Многочастичные эффекты в атомах. Под ред. Сафроновой У.И.-М.:Наука,1988.-С.73-189.
- 102. Dietz K., Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics/ Dietz K., Heβ B.A.// Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.-P.682-688
- 103. Glushkov A.V. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions / Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.// New Projects and New Lines of research in Nuclear physics.Eds. Fazio G. and Hanappe F.,pp.142-154, Singapore, World Sci. (2003).
- 104. Glushkov A.V., Spectroscopy of Neutral and Highly-ionized Atoms: Calculation of the Oscillator Strengths for Na- and Fr-like Ions/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Ambrosov S.V.// Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas.-Meudon: Publ.de l'Observatoire de Paris.- 1996.- P.96-97.
- 105. Malinovskaya S.V. S-matrix formalism in calculation of oscillator strengths, radiation and autoionization widths for complex atoms and multicharged ions/ Malinovskaya S.V.// Uzhgorod Univ.Sci.Her.Ser.Phys.-2000.-Vol.8,N2.-C.387-391.
- 106. Глушков А.В. Теоретическое определение спектров К-подобных многозарядных ионов/А.Глушков,С.Малиновская//Изв.вузов.Сер.Физ-1992-N11.-C.3-9
- 107. Glushkov A.V. Cooperative laser nuclear processes: border lines effects/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V.// In: New projects and new lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Sci.-2003.-P.242-268.

- 108. Zelentsova T.N., Thermal photoionization of the Rydberg atoms by the blackbody radiation: New relativistic approach/ Zelentsova T.N., Perelygina T.B.//Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2009.-N4.-P.5-11.
- 109. Аглицкий Е.В., Жерихин А.Н., Крюков И.Г., Чекалин С.В. Особенности рентгеновских спектров плазмы, создаваемой субнаносекундынм лазерным импульсом// ЖЭТФ.-1977.-Т.73, №4(10).-С.1344-1351
- 110. Gidopoulos N., Fundamentals of Electron Density, Density Matrix and Density Functional Theory in Atoms, Molecules and Solid State. Ser.: <u>Progress in Theor.</u> <u>Chem. and Phys.</u>/Gidopoulos N.,Wilson S. (eds.).-2004.-Vol.14.-P.1-244.
- 111. Kohn W. Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas/ Kohn W., Sham S.//Phys. Rev.A.-1965.-Vol.137.-P.1697-1710.
- 112. Lagowscki J.B. Analysis of local and gradient- correction correlation energy functionals using electron removal energies/ Lagowscki J.B., Vosko S.H. // J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.-1988.-Vol.21,N1-P.203-208.
- 113. Vosko S.H. Prediction of stable Sr, Ba, Ra from density-functional theory/ Vosko S.H., Lagowscki J., Mayer I.L. // Phys. Rev.A.- 1989.-Vol.39.-P.446-449.
- 114. Kobayashi K.Bond-energy calculations of Cu , Ag, CuAg with generalized gradient approximation/ Kobayashi K., Kurita N., Kumahora H., Kuzatami T.// Phys.Rev.A.-1991.-Vol.43.-P.5810-5813.
- 115. Guo Y. Effect of correlation correction on ionization potential and electron affinity in atoms/ Guo Y., Whitehead M.A.// Phys.Rev.A-1989.-Vol.39,N1.-P.28-34.
- 116. Klapish M. A Program for atomic wavefunction computations by the parametric potential method / Klapish M. A.//Comp.Phys.Commun.-1971.-Vol.2.-P.239-260.
- Laughlin C. Model potential method/ Laughlin C., Victor G.A. //Adv. Atom. Mol. Phys.-1988- Vol.25.- P.163-194.
- 118. Clementi E., Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, Z<54/ Clementi E., Roetti C.//Atomic Data Nuclear Data Tables.-1974.-Vol.14.-P.177-478.

- 119. Глушков А.В. Релятивистский поляризационный потенциал многоэлектронного атома/ Глушков Александр Васильевич// Изв.вузов.Сер.Физика.-1992.- N9.-C.3-8.
- 120. Дрикер М.Н., Релятивистский распад атомных состояний. Энергетический подход/ Дрикер М.Н., Иванов Л.Н.// Опт.Спектр.-1980.-Т.49,№2.-С.209-216.
- 121. Глушков А.В., Иванов Л.Н., Иванова Е.П., Радиационный распад атомных состояний. Обобщенный энергетический подход/ Глушков Александр Васильевич, Иванов Леонид Николаевич, Иванова Елена Петровна //В кн.: Автоионизационные явления в атомах- М.: Изд-во МГУ.-1986.-С.58-160.
- 122. Glushkov A.V. Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi-model nuclear potential/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., Sukharev D.E., Loboda A.V., Lovett L.//Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.- Vol.109.-N8.-P.1417-1424.
- 123. Froese Fischer C., Calculation of negative ions in the multiconfiguration Hartree-Fock approximation : Ca , Sr / Froese Fischer Charlotee// Phys.Rev.A.-1989.-Vol.39,N3.- P.963-970.
- 124. Aashamar K., Oscillator strengths in the aluminum sequence/K.Aashamar, T.M.Luke, J.D.Talman//Phys.Scripta-1984.- Vol.30,N1- P.121-134.
- 125. Trabert E., M1/E2 decay rates in CoXI, NiXII, CuXIII measured at heavy-ion storage ring/ E.Trabert, G.Saathoff, A.Wolf//J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.-2004.-Vol.37.-P.945-952
- 126. Migdalek J., Theoretical oscillator strengths: Transitions in principal, diffuse spectral series in Zn, Hg spectra/ Migdalek J.//Can.J.Phys.-1976.-Vol.54.-P.130-136
- Dzuba V. Fine structure of negative ions of alkaline–earth metal atoms/Dzuba
 V., Flambaum V.,Gribakin G., Sushkov D.//Phys.Rev.A-1991.-Vol.44.-P.2823-2829.

- 128. 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.
- 129. Curtis L.,Fine structure intervals for the lowest terms in the Cu, Zn, Ga, Br isoelectronic sequence for Z<92/ Curtis L.//Phys.Rev.A.–1987.-Vol.35.-P.2089-2094.
- Saha B. M1, E2 transitions in ArII/ B.Saha, S.Fritzsche// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2005.-Vol.38.-P.1161-1172.
- Hibbert A., Dirac-Fock calculation of spectra and transition probabilities in Cllike ions/A.Hibbert, J.E.Hansen// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1994.-Vol.27.-P.3325-3332.
- 132. Глушков А.В., Релятивистский расчет и экстраполяция сил осцилляторов в Fr-подобных ионах методом модельного потенциала / Глушков А.В.// Опт. Спектр.-1991.-Т.70,N5.-С.952-955.
- 133. Глушков А.В. Полуэмпирический расчет сил осцилляторов в многозарядных ионах с одним электроном над замкнутым остовом/ Глушков А.В.// Опт. Спектр.-1992.-Т.72,N3.-С.542-547.
- 134. 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., Khetselius O.Yu, Loboda A.V., Chernyakova Y.G., Svinarenko A.A.// Nucl. Phys.A.-2004.-Vol. 734.-P.21-28.
- 135. Chernyakova Y.G., Sensing tokamak plasma parameters by means high resolution x-ray spectroscopy method: New scheme/ Chernyakova Yu.G., Ignatenko V.M., Vitavetskaya L.A.// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2004.-N2.-P.20-24.
- 136. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions/ Glushkov A.V.// Low Energy Antiproton Phys., AIP Serie.-2005.-Vol.796.-P.206-210.
- 137. Mischenko E.V. Quantum measure of frequency and sensing the collisional shift and broadening of Rb hyperfine lines in medium of helium gas/ Mischenko E.V.//Photoelectronics.-2009.-N18.-C.91-96.

- 138. Glushkov A.V. Relativistic quantum chemistry of heavy elements: Interatomic potentials and lines shift for systems "Alkali element-Inert gas"/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Mischenko E.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.// Theory and Applications of Comput. Chem. (AIP).-2009.-Vol. 1102.-P.172-175.
- 139. Glushkov A.V. Diagnostics of collisionally pumped plasma and search of optimal plasma parameters of X-ray lasing: Calculation of electron-collision strengths and rate coefficients for Ne-like plasma/ Glushkov A.V.,Malinovskaya S.V., Loboda A.V., Korchevsky D.A., Gurnitskaya E.P.//J.Phys.CS.-2005.-Vol.11-P.188-198.
- 140. Glushkov A.V. Manifestation of the new laser-electron nuclear spectral effects in thermalized plasma: QED theory of cooperative laser-electron- nuclear processes/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Prepelitsa G.P., Ignatenko A.V.// J.Phys.CS.-2005.-Vol.11.-P.199-206.
- 141. Florko T.A., Laser photoemission analysis of the fractal parameters for aerosol environment: New data processing system/ Florko T.A., Bunyakova Yu.Ya., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P. // Photoelectronics.-2006 .-N15.-P.48-50.
- 142. Cowan D., Methods of atomic structure calculations/Cowan D.-N.Y.:Acad.,1974.-280P.; Cowan Code, adapted by A.Kramida.-Troitsk: ISAN, version 1993.
- 143. Glushkov A.V. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei during μ⁻ capture/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S., Dubrovskaya Y., Vitavetskaya L.// Recent Advances in Theory of Physical and Chemical Systems (Berlin, Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-324.
- 144. Parpia F.A., Generalized relativistic atomic structure package: GRASP/Parpia F.A., Froese-Fischer C., Grant I.//Comp.Phys.Commun.-1996.-Vol.94.-P.249-270/
- 145. Quiney H., Partial-wave mass renormalization in atomic QED calculation/ Quiney H., Grant I.// Phys.Scripta T.-1993.-Vol.46.-P.132-138
- 146. 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.

- 147. Bell, K.L., BERTHA: 4-Component Relativistic Molecular Quantum Mechanics/ Bell K.L., Berrington K., Crothers D., Hibbert A., Taylor K.T.//Supercomputing, Collision Processes, and Application, Series: Physics of Atoms and Molecules (Berlin, Springer).-2002.-P.213–224.
- 148. Reiher M., New Algorithms of Quantum Chemistry /Reiher M., Heβ B.// Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, ed. by J.Grotendorst, John von Neumann Inst. for Computing, Julich, NIC Ser.-2000.-Vol 3.-P.479–505.
- 149. Jensen H., DIRAC Code, a relativistic ab initio electronic structure program/ Jensen H., Saue T., Visscher L. with contr. by Bakken V., Eliav E., Enevoldsen T., Fleig T., Fossgaard O., Helgaker T., Laerdahl J., Larsen C., Norman P., Olsen J., Pernpointner M., Pedersen J., Ruud K., Salek P., van Stralen J., Thyssen J., Visser O., Winther T.//Release DIRAC04.0.-2004; (<u>http://dirac.chem.sdu.dk</u>).
- Martin W., NIST Spectra Database, version 2.0 / Martin C.//NIST.-Washington.-2004; (<u>http://physics.nist.gov.asd</u>); Moore C., NBS Spectra Database /Moore C.// NBS.-Washington.-1987.
- 151. Рагозин Е.Н., Собельман И.И., Лазерные источники в мягкой рентгеновской области спектра// Усп.Физ.наук.-2005.-Т.175.-С.1139-1141
- 152. Florko T.A., Sensing forbidden transitions in spectra of some heavy atoms and multicharged ions: new theoretical scheme/ Florko T.A., Loboda A.V., Svinarenko A.A.// Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2009.-N3.-P.21-26.
- 153. Glushkov A.V., Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas/ Glushkov A.V.,Florko T.A., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Mischenko E.V., Svinarenko A.A.//Internat. Journal of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109.-P.3325-3329.
- 154. Khetselius O.Yu., Collisional Shift of the Tl Hyperfine Lines in Atmosphere of Inert Gases/ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V., Mischenko E.V., Florko T.A., Sukharev D.E.// Spectral Line Shapes (AIP).-2008.-Vol. 15.-P.231-233.

- 155. Glushkov A.V., Sensing of nuclei available in little quantities by means of laser spectroscopy of hyperfine structure for isotopes: new theoretical scheme (U,Hg) / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Florko T.A.// Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2007.-N3.-P.8-12.
- 156. Tjurin A.V., Estimating of X-ray spectra for kaonic atoms as tool for sensing the nuclear structure/ Tjurin A.V., Khetselius O.Yu., Sukharev D.E., Florko T.A./ Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2009.-N1.-P.30-35.
- 157. Florko T.A., Bremsstrahlung and X-ray spectra for kaonic and pionic hydrogen and nitrogen/ Florko T.A., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Sukharev D.E.// Photoelectronics.-2009 .-N18.-P.73-78.
- 158. Florko T.A., Theoretical determination of oscillator strengths of some transitions in the rare-earth atom of Eu/ Florko T.A.//Photoelectronics.-2007.-N16.-P.98-101.
- 159. Gurnitskaya E.P., Dipole transitions of the rare earth atoms in inert medium in a weak electromagnetic field and quasimolecular terms/ Gurnitskaya E.P., Polischuk V.N., Florko T.A., Seredenko S.S.//Photoelectronics.-2007.-N16.-P.26-28.
- 160. Florko T.A., Spectroscopy of the pionic and kaonic atoms: energy shifts and widths for different nuclear models / Florko T.A., Sukharev D.E., Serga I.N.// Proc. of the XXVI International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC-XXVI).-Kalamazoo (Michigan, USA).-2009.-P. Mo058.
- 161. Florko T.A., Density functional theory approach to atomic autoionization in an external electric field: new numerical relativistic scheme/ Florko T.A., Nikola L.V., Mudraya N.V.// Proc. of the International Conference on Mathematical Modeling and Computational Physics.-UINR-Dubna (Russia).-2009.- P.63-65.
- 162. Florko T.A., Quantization of states of the Dirac-Fock-Slater equation and electroweak interaction effects/ Florko T.A., Dubrovskaya Yu.V.// Proc. of International conference "Geometry in Odessa-2009".-Odessa (Ukraine).-2009.-P.87.
- 163. Khetselius O.Yu., New optimal laser photoionization schemes for separating and sensing isotopes and nuclear reactions products / Khetselius O.Yu., Svinarenko

A.A., Florko T.A.// Proc. of 41st European Conf. of European Group on Atomic Systems (EGAS-41).-Gdansk (Poland).-2009.-P.CP-51.

- 164. Florko T.A., Spectra of atomic systems in QED perturbation theory with optimized Dirac-Fock zeroth approximation / Florko T.A.// Тези допов. Український Математичний Конгрес – 2009 (до 100-річчя від дня народження М.М. Боголюбова).- Ін-т математики НАН України.- Київ (Україна).-2009.-PE.12.
- 165. Glushkov A.V., Photon-plasmon and multiphoton radiative transitions in positronium and diagnostics of the astrophysical plasma/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Florko T.A.// Proc. of the International Conference "Nuclear Physics in Astrophysics-IV" (NPA-IV).-Laboratori Nazionali del Gran Sasso (Assergi, Italy).-2009.-P.132.
- 166. Khetselius O.Yu., New optimal laser photoionization schemes for separating and sensing isotopes and nuclear reactions products / Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Florko T.A., Serga I.N.// Proc. of the 18th International Mass Spectrometry Conference.- Bremen (Germany).-2009.- P.PWA104.
- 167. Khetselius O.Yu., Green's Function of the Dirac Equation with Complex Energy and Central Non-singular Fermi-Model Potential/ Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Florko T.A., Serga I.N.// Proc. of International Workshop Progress in Nonequilibrium Green's Functions IV.- Glasgow (Scotland, UK).-2009.-P.31.
- 168. Florko T.A., Green's function of the Dirac equation with complex energy and central non-singular Fermi-model nuclear potential / Florko T.A., Svinarenko A.A., Glushkov A.V.//Proc. of the QTRF5 - Quantum Theory: Reconsideration of Foundations-5.- Vaxjo (Sweden).-2009.-P.42.
- 169. Lovett L., DFT to Treating Atomic Parity Non-conservation Effect in Heavy Atoms: To Precise Theory/ Lovett L., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Serga I.N.// Proc. of the 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.-Lyon (France).-2009.-P.95.

- 170. Khetselius O.Yu., New optimal laser photoionization schemes for separating and sensing isotopes and nuclear reactions products/ Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Florko T.A., Serga I.N.// Proc. of Internat.Conf. on Field Laser Applications in Industry and Research (FLAIR 2009).- Grainau (Germany).-2009.- P.84.
- 171. Khetselius O.Yu., Generalized multiconfiguration model of decay of the multipole giant resonances/ Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N., Florko N.A.//Proc. of 9th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics.- Bonn (Germany).-2009.-P.41.
- 172. Florko T.A., Search of the optimal plasma parameters for X-ray lasing on the basis of modeling the elementary processes in a collisionally pumped plasma/ Florko T.A., Loboda A.V.// Proc. of VIII International Conference on Atomic and Molecular Pulsed Lasers (AMPL-2009).- Tomsk (Russia).-2009.-P.D-08.
- 173. Glushkov A.V., Spectroscopy of hadronic atoms and superheavy ions: Spectra, energy shifts and widths, hyperfine structure for different nuclear models/ Glushkov A.V.,Florko T.A., Khetselius O.Yu.,Gurnitskaya E.P.,Vitavetskaya L.A., Sukharev D.E.// Proc. of International Conference on Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy (NPAE-08).-Kiev (Ukraine).-2008.-P.108.
- 174. Khetselius O.Yu., Collisional shift of the Tl hyperfine lines in atmosphere of inert gases/ Khetselius O.Yu., Florko T.A., Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V., Mischenko E.V.//Proc. of 19th Internat. Conf. on Spectral Line Shapes.-University of Valladolid (Spain).-2008.-P.P42.
- 175. Glushkov A.V., Energy approach to QED theory of calculating the electroncollision strengths and rate emission coefficients/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Sukharev D., Florko T.A.//Proc. of IXth European conf. on Atomic and Molecular Physics and Annual Meeting of European Group on Atomic Spectroscopy (ECAMP-IX + EGAS).-Crete (Greece).-2007.-P.Tu1-45
- 176. Florko T.A., Auger effect in atoms and solids: calculation of the radiative and Auger decay characteristics in atoms and solids / Florko T.A., Ambrosov S.V., Glushkov A.V., Nikola L.V. //Proc. of IXth European conf. on Atomic and

Molecular Physics and Annual Meeting of European Group on Atomic Spectroscopy (ECAMP-IX + EGAS).-Crete (Greece).-2007.-Th2-74

- 177. Khetselius O.Yu., Theoretical determination of probabilities for E2, M1 transitions in complex atoms/ Khetselius O.Yu., Glushkov A. V., Florko T.A./ Proc. of 9th Workshop "Quantum Systems in Chemistry and Physics".-Grenoble (France).-2004.-P.124.
- 178. Florko T.A., New QED approach to calculating probabilities for forbidden atomic transitions/ Florko T.A., Glushkov A. V., Khetselius O.Yu./Proc.8th European Workshop "Quantum Systems in Chemistry and Physics".-Spetses (Greece).-2003-P.117.
- Nahar S.N., <u>Allowed and forbidden transition parameters for Fe XXII</u> //Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2009.-Vol.108.-P.1-32.
- 180. Glushkov A.V. Programs Complex "Superatom": Pgm RelSpec/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Svinarenko A.A., Loboda A.// Preprint I.Mechnikov Odessa Nat. Univ. Inst.of Physics: Ph-L-5.-Odessa-2003.
- 181. Florko T.A., Tables of the transitions energies and probabilities, oscillator strengths for Zn-like (Z=32-92) and Ne-like (Z=20-94)/ Florko T.A., Svinarenko A.A. // e-Preprint of OSENU. Mathematics Department: M-E1.-Odessa: 2005.- 32P.
- 182. Khetselius O.Yu., Sensing hyperfine-structure parameters, scalar-pseudoscalar interaction constant and parity non- conservation effect in some isotopes: new approach/ Khetselius O.Yu., Lopatkin Yu.M., Dubrovskaya Yu.V., Svinarenko A.A.// Sensor Electronics and Microsyst. Techn.-2010.-N2.-P.5-10.
- 183. Kruglyak Yu.A., Korchevsky D.A., Chernyakova Yu.G., Florko T.A., Relativistic Dirac-Fock model approach to studying Fe plasma emission spectra in a low inductive vacuum spark//Photoelectronics (Ukraine-Italy).-2012.-N21.-P.60-62.
- 184. Florko T.A., Ambrosov S.V., Svinarenko A.A., Tkach T.B., Collisional shift of the heavy atoms hyperfine lines in an atmosphere of the inert gas// Journal of Physics: C Ser. (IOP, London, UK).-2012.- Vol.397.-P.012037 (5p.)

- 185. Glushkov A.V., Spectroscopy of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Energy and spectral parameters// Journal of Physics: C Ser. (IOP, London, UK).-2012.-Vol.397.-P.012011 (5p.)
- 186. Khetselius O.Yu., Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect// Journal of Physics: C Ser. (IOP, London, UK).-2012.- Vol.397.-P.012012 (6p.)
- 187. Loboda A.V., Tkach T.B., Generalized anergy approach in an electroncollisional spectroscopy of multicharged ions in plasma in the Debye approximation // Journal of Physics: C Ser. (IOP, London, UK).-2012.- Vol.397.-P.012027 (6p.)
- 188. Glushkov A.V., Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions// Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2012-Vol.26.-P.207-227.
- 189. Glushkov A.V., Advanced Relativistic Energy Approach to Radiative Decay Processes in Multielectron Atoms and Multicharged Ions// Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2013-Vol.26.-P.231-254.
- 190. Khetselius O.Yu., Relativistic energy approach to cooperative electron-gammanuclear processes: NEET Effect// Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. K.Nishikawa, J. Maruani, E.Brandas, G. Delgado-Barrio, P.Piecuch (Berlin, Springer).-2012-Vol.26.-P.217-230.
- 191. Khetselius O.Yu., Florko T.A., Svinarenko A.A., Tkach T.B., Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas//Physica Scripta (IOP, London).-2013.- Vol.T153-P.01437 (5p.).

- 192. Glushkov A.V., Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field//Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Frontiers in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. M.Hotokka, J.Maruani, E. Brändas, G.Delgado-Barrio (Berlin, Springer).-2013.-Vol.28.-Part2.-Chapter9.-P.161-178.
- 193. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Theoretical spectroscopy of autoionization resonances in spectra of lanthanides atoms//Physica Scripta (IOP, London).-2013.-Vol.T153-P.01429 (6p.)
- 194. Tkach T.B., Optimized relativistic model potential method and quantum defect approximation in theory of radiative transitions in spectra of multicharged ions/ Tkach T.B.// Photoelectronics.- 2012.-Vol.21.-P.14-17
- 195. Глушков А.В., Малиновская С.В., Тарченко А.В. Простой полуэмпирический метод расчета сил осцилляторов в многозарядных ионах с одним электроном над замкнутым остовом// Журн. Прикл. Спектроскопии.-1991.- Т.54, N1.- С. 131-134.
- 196. Глушков А.В., Малиновская С.В., Филатов В.В. Релятивистский расчет спектроскопических характеристик СІ-, Аг- К- подобных многозарядных ионов// Многочастичные эффекты в атомах. Под ред. Сафроновой У.И.-М.:Наука.-1988.-С.73-88.