

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

**Буяджи Василь Володимирович**



**УДК 539.184: 539.192**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ЗА РАХУНОК ЗІТКНЕНЬ  
В ЕЛЕКТРОН- ТА ІОН - АТОМНИХ СИСТЕМАХ:  
ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПІДХІД**

**01.04.05 – оптика, лазерна фізика**

**Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора фізико-математичних наук**

**ОДЕСА – 2021**

**Дисертацією є рукопис.**

**Робота виконана в Одеському державному екологічному університеті Міністерства освіти і науки України.**

**Науковий консультант: Свинаренко Андрій Андрійович,  
доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри вищої та прикладної математики  
Одеського державного екологічного університету.**

**Офіційні опоненти: Лопаткін Юрій Михайлович,  
доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри загальної та теоретичної фізики  
Сумського державного університету**

**Тюрін Олександр Валентинович,  
доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри фінансів, банківської справи та  
страхування Одеського національного університету  
ім. І.І. Мечникова**

**Малахов Олексій Володимирович,  
доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри суднової теплоенергетики  
Національного університету «Одеська морська  
академія»**

**Захист відбудеться “28” вересня 2021 р. о 14<sup>30</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д41.090.03 в Одеському державному екологічному університеті МОН України за адресою: 65016, м. Одеса, вул. Львівська, 15.**

**З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Одеського державного екологічного університету за адресою: 65016, м. Одеса, вул. Львівська, 15 та в мережі на сайті університету.**

**Автореферат розісланий “28” серпня 2021р.**

**т.в.о. Вченого секретаря  
спеціалізованої вченої ради Д 41.090.03,  
доктор фізико-математичних наук, професор**



**О.Ю. Хецеліус**

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Актуальність дослідження широкого кола високоенергетичних процесів збудження іонізації, зіткнень у комбінованих і навіть гібридних атомних системах (електронів, атомів, іонів і фотонів) в останні роки різко зросла, що обумовлено, з одного боку, безпрецедентним прогресом у розвитку сучасної експериментальної техніки, зокрема, різким збільшенням інтенсивності, потужності, якості джерел лазерного випромінювання (сучасні лазерні системи можуть випромінювати достатньо короткі хвилі, от декількох до десятків фемтосекунд з можливостями досягнення пікових інтенсивностей до перспективних  $\sim 10^{23} \text{W/cm}^2$ , наприклад, за рахунок потужностей сучасних типів лазерів на вільних електронах, таких як TESLA XFEL FEL-Europe, US, Japan).

Широке використання прискорювачів, колайдерів важких іонів, джерел синхротронного випромінювання, нейтронних джерел та ін. відкриває принципово нові можливості у сучасній оптиці та спектроскопії за рахунок зіткнень атомів та багатозарядних іонів, у тому числі іонів у плазмі. З іншого боку, необхідність дослідження все більш енергетичних процесів в задачах електрон-іон-атомних зіткнень стимулює і розвиток нових теоретичних методів атомної спектроскопії за рахунок зіткнень.

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

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

Між тим, не дивлячись на досить величезну кількість різноманітних теоретичних методів сучасної атомної оптики та спектроскопії, квантової теорії розсіювання та зіткнень за участю атомів, іонів, електронів та фотонів (варто нагадати про такі відомі методи як спрощене борнівське та кулонівське наближення, різноманітні версії теорії збурень (ТЗ), в яких, як правило,

обмежуються лише поправками низьких порядків, з хартрі-фоківським (ХФ-НФ) та дірак-фоківським (ДФ-ДФ) наближеннями, R-, K-матричні методи, у тому числі з використанням таких моделей як наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багато-конфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA) та інші), існує цілий клас задач та електрон-іон-атомних систем, де використання перелічених підходів не дозволяє досягнути виключно спектроскопічної точності опису. Ситуація стає досить критичною і ще більше ускладнюється при необхідності урахування ефектів, пов'язаних, наприклад з впливом плазмового середовища при дослідженні електрон-іонних зіткнень в плазмі, наявністю додаткового зовнішнього, особливо дуже інтенсивного, електромагнітного поля, можливою реалізацією як одно- так і багато-фотонних процесів особливо у складних багатоелектронних системах тощо.

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

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дослідження, виконані в роботі, увійшли до планів НДР Одеського державного екологічного університету та Міністерства освіти і науки України: «Розвиток і застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики і атомної та ядерної спектроскопії» (№ держр. 0111U005225, 2011-2015), «Розвиток та застосування нових обчислювальних методів в задачах математичної фізики, теорії ядра та адронних атомів, квантової геометрії» (№ держр. 0114U005145, 2014-2018рр.), «Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної,

молекулярної спектроскопії» (№ держр. 0116U002097, 2016-2020pp.), Розрахунок енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів та багатозарядних іонів на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень» (2019–2023), Розвиток та застосування хаос-геометричних та квантово-динамічних методів дослідження спектрів і динаміки лазерних систем та приладів надвисокочастотної електроніки» (2019–2023), а також проектів фундаментальних досліджень МОН України «Прогнозування стану і безпеки навколишнього середовища з урахуванням антропогенного, радіоактивного забруднення, радіаційно-екологічних наслідків аварій на АЕС: Нові моделі і технології» (№ держр. 0115U000632, 2015-2017pp.), «Комплекс нових стохастично-гідродинамічних та атомно-діагностичних моделей моніторингу антропогенного забруднення атмосфери промислових міст та “Green City” технологія» (№ держр. 0117U000622, 2017-2019pp.) і проекту Стипендіату Кабінету Міністрів України (2018-2020 «Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон- та іон-атомних системах» згідно з постановою президії Комітету з Державних премій України в галузі науки і техніки від 23 травня 2018 року, №3).

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

**Для досягнення мети були сформульовані такі наукові задачі:**

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

2. Розвинути новий формалізм релятивістської калібрувально-інваріантної багаточастинкової ТЗ з оптимізованим дірак-кон-шемівським (ДКШ=DKS) і дебай-хюккелівським «0» наближенням і адаптувати послідовну калібрувально-інваріантну *ab initio* методику генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей

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

методику урахування станів континууму в межах релятивістської версії методу штурмовських розкладань.

4. Виконати обчислення енергій та імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перерізів збуджень для бериліє-подібних іонів з зарядом атомного ядра  $Z = 6-36$  з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища для широкого інтервалу параметрів плазми (густина, температура) і з'ясувати внесок обмінно-кореляційних поправок, а також калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційні ширини тощо.

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

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

7. Виконати на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим DKS та дебай-хюккелівським «0» наближенням детальні обчислення енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$ ,  $4s, 4p, 4d$  і  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ , в спектрах Ne-подібних іонів з  $Z \sim 20-83$  та спектральних характеристик Na-подібних спектрів - сателітів  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$  ( $J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ ) до 2-3 переходів Ne-подібних іонів.

8. В рамках релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням та спрощеної статистичної схеми обліку розподілу інтенсивностей ліній переходів між конфігураціями з великим набором станів, узагальнити процедуру теоретичного моделювання спектрів діелектронних сателітів;

9. Виконати на основі нового релятивістського енергетичного формалізму в теорії зіткнень детальні обчислення диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани  $2p^5 3s$  конфігурації  $(2p^5 3s [3/2]^o_2, 2p^5 3s [1/2]^o_0, 2p^5 3s [1/2]^o_1, 2p^5 3s [3/2]^o_1)$  нейтрального атома неону при енергії налітаючого електрона  $E_i = 10-120$  еВ, провести докладне порівняння з альтернативними теоретичними та експериментальними даними, з'ясувавши внесок як складних обмінно-кореляційних ефектів, так і вплив якості використаних базисів релятивістських електронних хвильових функцій;

10. Виконати на основі нового релятивістського енергетичного формалізму в теорії зіткнень детальні обчислення спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом станів конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$  Ne-подібного іона  $Kr^{26+}$  з основного стану (при різних температурах та електронній густині, характерних для плазми токамака, різних енергіях електрона, що налітає), провести докладне порівняння з

альтернативними теоретичними та експериментальними даними, з'ясувавши внесок як складних обмінно-кореляційних ефектів, так і вплив якості використаних базисів релятивістських електронних хвильових функцій

11. Виконати детальне дослідження спектроскопії за рахунок зіткнень Ne-подібного іона  $\text{Ar}^{8+}$ , виконавши обчислення енергій рівнів, сил осциляторів, сил електронних зіткнень (плазма  $\theta$ -пінча:  $n_e=10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $T_e=65\text{eV}$ ) для збудження з основного стану іона  $\text{Ar}^{8+}$  ( $E_i=0.425, 0.5, 0.750, 1.045 \text{ кеВ}$ ) і провести порівняння з альтернативними теоретичними даними обчислень методом ДФ тощо; провести обчислення швидкісних характеристик, у т.ч. швидкісних параметрів збудження, іонізації, радіаційного розпаду та діелектронного захоплення для групи станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів у стани континууму.

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

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

**Об'єкт дослідження** – атомні системи, багатозарядні іони, теоретична оптика і спектроскопія, теорія електрон-атомних зіткнень

**Предмет дослідження** – релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон-, іон- атомних системах, релятивістський енергетичний підхід

**Методи дослідження:** методи квантової механіки і квантової електродинаміки, для розрахунків констант електрон-атомних зіткнень, спектральних характеристик атомних систем; обчислювальні методи для чисельного моделювання енергетичних, спектральних характеристик атомів, та багатозарядних іонів і т.і.

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

1. Вперше розвинутий новий релятивістський підхід до обчислення фундаментальних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень,

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

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

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

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

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

6. Вперше із прийнятною для додатків точністю представлені набори даних для сил електронних зіткнень при збудженні переходу між рівнями тонкої



структури ( $2p^2 P_{3/2} - 2P_{1/2}$ ) основного стану Ве- та F-подібних іонів з  $Z = 19-26$  (енергія електрону, що налітає:  $E_i = \varepsilon_{in} = 0,1294 \cdot Z^2$  еВ,  $T = Z^2$  кеВ ( $Z$  заряд остова),  $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), причому для Ве-подібних іонів відповідні дані отримані взагалі вперше.

7. Вперше на основі релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим нульовим ДКШ та дебай-хюккелівським наближенням отримані дані щодо енергій і ймовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів  $E1$ ,  $E2$ ,  $M1$ ,  $M2$  переходів між рівнями конфігурацій  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  і  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ , в спектрах Ne-подібних іонів з  $Z \sim 20-83$ , які, згідно із ретельним аналізом, переважають у точності по деяким іонам дані альтернативних обчислень за рахунок більш повного врахування обмінно-кореляційних поправок та використання оптимізованого 1-квазічастинкового уявлення; виявлено, що для ряду станів, зокрема,  $2p^5 4d (3/2, 3/2)_2$   $2p^5 4d (3/2, 5/2)_1$  (для іонів Ca XI, Sc XII),  $2s_{1/2} 3p_{1/2}$ ,  $2s_{1/2} 3p_{3/2} (J=1)$  (Br XXVI) експериментальні дані надані в літературі з досить високою похибкою.

8. Вперше на основі релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим нульовим ДКШ та дебай-хюккелівським наближенням отримані дані щодо спектральних характеристик Na-подібних спектрів - сателітів  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1 (J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2)$  до 2-3 переходів в Ne-подібних іонів з  $Z = 17-26$ , у т.ч., Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII, і виявлено досить суттєве значення поправок як другого так й вищих порядків ТЗ, урахування яких дозволяє, напр., покращити точність даних про абсолютне положення всіх рівнів на  $\sim 2-10$  тис.  $\text{cm}^{-1}$ .

9. Вперше на основі нової релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим нульовим ДКШ та дебай-хюккелівським наближенням і узагальненої спрощеної статистичної схеми обліку розподілу інтенсивностей ліній переходів між конфігураціями з великим набором станів отримані результати теоретичного моделювання спектрів діелектронних сателітів для Na-подібних багатозарядних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII, які узагальнюють та доповнюють відомі класичні результати Ivanova et al (1986, 1988).

10. Вперше на основі релятивістського енергетичного підходу в теорії розсіювання отримані масові дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани  $2p^5 3s$  конфігурації ( $2p^5 3s [3/2]_2^0$ ,  $2p^5 3s [1/2]_0^0$ ,  $2p^5 3s [1/2]_1^0$ ,  $2p^5 3s [3/2]_1^0$ ) нейтрального атома неону при енергії налітаючого електрона  $E_i = 10-120$  еВ (тобто в інтервалі, де традиційно використовуване звичайне борнівське наближення не працює) і виявлено, що, по-перше, для малих енергій налітаючого електрона (в інтервалі 20-30 еВ) узгодженість теоретичних і експериментальних даних є значно гіршою, ніж, для високих енергій налітаючого електрона в районі 100 еВ; по-друге, дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують експериментальні дані, особливо у порівнянні з даними обчислень на основі методів типу UFOMBТ, DWBA, RDWA; показано, що

провал в перерізі, який має місце при куті розсіювання  $20^\circ$  імітується (не повною мірою) тільки в рамках енергетичного формалізму.

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

12. Вперше в межах нового релятивістського енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим ДКШ та дебай-хюккелівським нульовим наближенням із спектроскопічною точністю отримані дані для енергії рівнів, сил осциляторів, електронних зіткнень (плазма  $\theta$ -пінч:  $n_e = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $T_e = 65 \text{ eV}$ ) для збудження з основного стану іона Ar ( $E_0 = 0.425, 0.5, 0.750, 1.045 \text{ кеВ}$ ), а також значення швидкісних характеристик збудження, іонізації, радіаційного розпаду для станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму при плазмових параметрах  $n_e = 10^{19-20} \text{ см}^{-3}$  і електронної температури  $T_e = 40, 60 \text{ eV}$ .

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

14. На основі нової версії релятивістського енергетичного формалізму до опису електрон-атомних зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля вперше виконано обчислення багатофотонних диференціальних перерізів  $(e, 2e)$  реакції для нейтрального атома неону при параметрах електрон-атомних зіткнень системи і поля:  $\varepsilon_0 = 2 \cdot 10^8 \text{ В/см}$ ,  $\hbar\omega = 1.17 \text{ eV}$ ,  $E_i = 100 \text{ eV}$ .

15. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень багатоелектронних релятивістських електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання на основі обчислень в наближенні низької частоти для  $(e, 2e)$  реакції іонізації нейтрального атома неону електронним ударом відкрито нове явище (нові фізичні ефекти) радикально різної поведінки

перерізів реакцій типу  $(e,2e)$  за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору електрона, що налітає.

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

Нові методи та нові отримані результати можуть бути корисно використані і в розв'язанні таких нових задач сучасної квантової оптики та спектроскопії як дослідження надпорогового, багатофотонного, сильнопольового збудження, іонізації атомів та багатозарядних іонів, незвичайного розсіювання електронів на атомах та іонах в присутності зовнішнього інтенсивного поля лазерного випромінювання. Слід звернути увагу на безпрецедентні можливості забезпечення контролю атомних систем при взаємодії із потоками електронів та інших частинок, дослідження генерації МЕВ рентгенівських промінів в плазмі, яка створюється фемтосекундними лазерними імпульсами, вивчення індукованих понадінтенсивним зовнішнім випромінюванням елементарних електрон-атомних процесів розсіювання, зіткнень тощо.

**Особистий внесок здобувача.** Всі наукові результати, що становлять основний зміст дисертації, положення та висновки, що виносяться на захист, отримані автором самостійно. Основу роботи складають публікації у фахових виданнях України та зарубіжних спеціалізованих виданнях [1-61]. У більшості з цих статей автору належать постановка задач, основні ідеї, обґрунтування нових методів, їх аналітична та чисельна реалізація, формулювання висновків. Особисто автору належить розвиток нового напрямку у сучасній теоретичній атомній оптиці та спектроскопії, а саме, прецизійної релятивістської оптики і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іон-атомних систем у вільному стані, у дебаєвській плазмі з урахуванням впливу ефектів плазмового

середовища, а також при наявності додаткового зовнішнього поля лазерного випромінювання. Всі представлені в роботі дані для характеристик (перерізів збудження електронним ударом, сил осциляторів та сил зіткнень, енергій рівнів, швидкісних характеристик збудження, іонізації, радіаційного розпаду тощо) досліджених атомів та багатозарядних іонів в плазмі (напр., неону, берилій-фтор-неон-подібних багатозарядних іонів) отримані автором особисто. У монографіях [12, 13] автору належить основна частина матеріалу. У статтях [1, 2, 4, 9, 16, 20] автор спільно з науковим консультантом проф. А.А. Свиначенко брав участь у постановці задачі. В публікаціях [2, 14, 18, 24, 25, 29, 31, 32] автор брав участь в обговоренні результатів та написанні тексту, крім того, дані для енергетичних параметрів досліджених в роботі атомів та іонів отримані особисто автором.

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

International Conference on Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy (Odessa, Ukraine, 2015), International Nuclear Physics Conference (Adelaide, Australia, 2016), 8<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016; Kielce, Poland, 2016), 13<sup>th</sup> SPARC Topical Workshop Jagiellonian University (Kraków, Poland, 2016), 23<sup>rd</sup> International Conference on Spectral Lines Shapes (Torun, Poland, 2016), International Young Scientists (and workshop) Symposium on Optics of Multicharged Ions and New Ionic Technologies (Odessa, Ukraine, 2016), 28<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics (Gauteng, South Africa, 2016), International Conference "Geometry in Odessa-2016" (Odessa, Ukraine, 2016), XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXI; Vancouver, BC, Canada, 2016), 11<sup>th</sup> Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (Munich, Germany, 2017), 29<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics (Paris, France, 2017), International Conference on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics (QSCPM-2018; Odessa, Ukraine, 2018), XXX IUPAP Conference on Computational Physics (Davis, USA, 2018), International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS, Dublin, Ireland, 2018), 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems (Torun, Poland, 2018), 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII, Kruger Park, South Africa, 2018) 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2019, Deauville, France, 2019), 15<sup>th</sup> International Conference "Dynamical Systems - Theory and Applications" (Lodz, Poland, 2019), XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine, 2019), IV International Conference "Advances in Atomic, Nuclear and Laser Optics and Spectroscopy" (Odessa, Ukraine, 2020), а також та наукових семінарах інститута математики, фізики та інформатики і НДІ фізики Одеського національного університету ім. І. Мечникова, Національного університету "Одеська політехніка", Одеського державного екологічного університету (ОДЕКУ), а також Технічного університету Софії (Болгарія), Лодзь та Торунь (Польща), International Centre on

Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (Odessa), International Centre on Quantum Optics and Laser Physics (Odessa), тощо.

**Публікації.** Основні наукові результати дисертаційної роботи повною мірою викладено в 61 наукових публікаціях, зокрема, 32 статтях у наукових фахових вітчизняних та високо рейтингових міжнародних журналах та виданнях, зокрема видавництва Springer, Intech (у т.ч. тих, що входять до наукометричних баз Scopus and Web of Science), 5 колективних монографіях та 24 тезах і матеріалах доповідей на міжнародних наукових конференціях, школах.

**Структура і обсяг дисертації.** Дисертація складається з вступу, шістьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатку (списку робіт здобувача за темою дисертації). Загальний обсяг дисертації складає 344 сторінки, обсяг основного тексту - 265 сторінок. Робота ілюстрована 24 рисунками та містить 54 таблиць. Список використаних джерел складає 306 найменувань.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовується актуальність, наукова та практична значущість роботи, формулюються мета, задачі дисертації.

В **першому** розділі наданий огляд сучасних теоретичних та експериментальних методів вивчення характеристик електрон-іонних зіткнень, процесів за участю електронів, фотонів, атомів, Бі із використанням експериментальних технологій (джерел ЛВ, синхротронного випромінювання, ЕВІТ, прискорювачі, колайдерів важких іонів та ін.), що відкриває нові можливості вивчення усе більш енергетичних процесів. Наданий фундаментальний аналіз теоретичних робіт у галузі спектроскопії електрон-іонних зіткнень зокрема, базових робіт по обчисленню характеристик елементарних процесів електрон-іонних зіткнень, у т.ч., для таких суттєво релятивістських систем як багатозарядні іони). Коротко наведено зведення сучасних теоретичних методів розрахунку характеристик електрон-іонних процесів зіткнень, включаючи, підходи до вивчення електрон-іонних зіткнень у плазмі. Проаналізовано точність і послідовність теоретичних методів розрахунку основних характеристик електрон-іонних зіткнень, зокрема, перерізів та сил зіткнень, швидкісних коефіцієнтів, і наведено докладно зведення як фундаментальних, так і таких, що пов'язані з технічними обчислювальними аспектами найбільш поширених та відомих недоліків теоретичних підходів, зокрема, підкреслюється, нездатність універсально, зі спектроскопічною точністю описати фундаментальні характеристики елементарних процесів електрон-іонних зіткнень при відносно невисоких енергіях зіткнень, дуже складні проблеми коректного обліку як релятивістських, так і обмінно-кореляційних, включаючи міжконфігураційну взаємодію, ефектів урахування достатньої кількості каналів, облік рідбергівських, автоіонізаційних станів, станів континууму для отримання адекватної точності, виконання принципу калібрувальної інваріантності при побудові відповідного одноквазічастинкового (1-QP) представлення проблеми

адекватного урахування ефектів плазмового середовища, а також відсутність послідовної теорії е-іонних зіткнень у присутності електромагнітного поля, і на кінець, необхідності використання КЕД для побудови дійсно коректної теорії.

У **другому розділі** розроблено принципово новий формалізм, а саме оптимізований енергетичний підхід, до розв'язання широкого класу задач в спектроскопії, викладені основи нового релятивістського енергетичного підходу у спектроскопії за рахунок зіткнень релятивістських, суттєво багатоелектронних електрон-іонних та атомних систем, у т.ч. у плазмі багатозарядних іонів, який базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу, *ab initio* методі релятивістської ТЗ багато-квазічастинкових (QP) систем з оптимізованим ДКШ (DKS) та дебай-хюккелівським нульовим наближенням з генерацією калібрувально-інваріантного базису релятивістських орбіталей «0» порядку і прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів як ефектів 2 і вище порядків ТЗ, а також обліком ефектів плазмового екранування у межах відомого дебаєвського наближення. З класичної теорії Дебая-Хюккеля відомо, що потенціал взаємодії двох заряджених частинок у дебаєвській плазмі моделюється потенціалом типу Юкави, який містить дебаєвський радіус екранування

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

де  $T$  – електронна температура,  $N$  – густина частинок.

Звичайна умова ідеальності плазми  $1/N_e r_D^3 \ll 1$  і із зменшенням  $r_D$  число частинок у дебаєвській сфері  $(4\pi/3)N_e r_D^3$  буде зменшуватися, тобто уявлення про дебаєвське екранування буде зникати.

Зазначимо, що у подальшому нас буде інтересувати випадок, напр., лазерної плазми з характерними параметрами  $T \sim 1 \text{ кеВ}$ ,  $N \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ,  $\mu \sim 10^{-1}$  (ат.од.), а у випадку плазми ЕВІТ -  $T \sim 0.05 \text{ кеВ}$ ,  $N \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $\mu \sim 10^{-3}$ . В КЕД теорії базовим елементом є електродинамічна матриця розсіювання. Послідовний релятивістський метод розрахунку перерізів процесів електрон-іонного зіткнення, радіаційних ширин, енергетичних зсувів – базується на адіабатичній формулі Гелл-Мана і Лоу з електродинамічною матрицею розсіяння. Такий підхід веде до рядів ТЗ для зсуву енергії. Ряд ТЗ звичайно діаграматизується. Як відомо, в такій ТЗ у відокремлених випадках виникають специфічні КЕД розбіжності. Є відомі рецепти компенсації розбіжностей. В нульовому наближенні ТЗ ми стартуємо з релятивістського гамільтоніану Дірака для багатоелектронного атому (іону) у вигляді:

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

де  $\alpha_i$  – матриці Дірака,  $V_C$  –самоузгоджений потенціал середнього поля (потенціал взаємодії «квазічастинка-остов» у випадку атомної системи, що складається з остову замкнених оболонок і декількох зовнішніх квазічастинок; у наших обчисленнях використані відомий потенціал Ivanova-Ivanova (ADNDT, 1979) і релятивістський DKS потенціал  $V^{DKS}(r) = [V_{Coul}^D(r) + V_X(r) + V_C(r|a)]$ , який містить обмінний потенціал Kohn-Sham  $V_X(r)$  та модифікований кореляційний потенціал), а релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії в новій теорії має наступний вигляд:

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot (1 - \alpha_i \alpha_j) / r_{ij} \quad (3)$$

Оскільки у подальшому ми приділимо головну увагу вивченню характеристик електрон-іонних зіткнень для Ne-, Be- подібних іонів, варто зазначити, що у формалізмі ТЗ далі всі стани атомної системи з 2QR над остовом замкнених оболонок розглядаються як група вироджених станів. Процес де-збудження іону, скажемо, Ne-подібного іона (основна конфігурація:  $1s^2 2s^2 2p^6$ ; збуджені стани  $1s^2 2s^2 2p^5 n l_j$ ,  $n=3,4,\dots$ ), за рахунок електрон-іонного зіткнення:  $((2j_{iv})^{-1} 3j_{ie} [J_i M_i], \varepsilon_{in}) - (\Phi_o, \varepsilon_{sc})$ , де  $\Phi_o$  – стан іона із замкненою оболонкою;  $J_i$  – повний кутовий момент початкового стану; індекси  $iv, ie$  відносяться до початкових станів електрону та вакансії;  $\varepsilon_{in} \equiv E_i$ ,  $\varepsilon_{sc} \equiv E_{sc}$  – енергії електрону, що налітає і розсіюється. Початковий стан: іон у збудженому стані з 1 електроном і 1 вакансією в остові + електрон, що налітає, тобто маємо:

$$|I\rangle = a_{in}^+ \sum_{m_{iv}, m_{ie}} a_{ie}^+ a_{iv} \Phi_o C_{m_{ie}, m_{iv}}^{J_i, M_i} \quad (4)$$

де  $C_{m_{ie}, m_{iv}}^{J_i, M_i}$  – коефіцієнти Клебша-Гордона. Кінцевий стан:  $|F\rangle = a_{sc}^+ \Phi_o$ , де  $\Phi_o$  – стан іона із замкненою оболонкою;  $|I\rangle$  відповідає 3-QR стану;  $|F\rangle \sim$  1-QR стану. Відповідна секулярна матриця має вигляд:

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + M^{(3)} + \dots + M^{(k)} \quad (5)$$

де  $k$ - число QR,  $M^{(0)}$ - внесок вакуумних діаграм,  $M^{(i)}$ - внесок  $i$ -QR діаграм. Фундаментальне положення ЕП у КЕД теорії релятивістських багатоелектронних атомних систем полягає у тому, що матричні елементи  $M$  є комплексними, при чому уявна частина визначає імовірність розпаду  $P$ , а зсув повної енергії:

$$\Delta E = \text{Re} \Delta E + i \text{Im} \Delta E, \quad \text{Im} \Delta E = -P/2. \quad (6)$$

У задачі щодо електрон-атомного зіткнення частина зсуву завдяки зіткненню з'являється вперше у 2-му порядку ТЗ у вигляді інтеграла по енергії розсіяного електрона  $\varepsilon_{sc}$ , тобто:

$$\int d\varepsilon_{sc} G(\varepsilon_{iv}, \varepsilon_{ie}, \varepsilon_{in}, \varepsilon_{sc}) / (\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{iv} - \varepsilon_{ie} - \varepsilon_{in} - i0) \quad (7)$$

і відповідно:

$$\text{Im}\Delta E = \pi G(\varepsilon_{iv}, \varepsilon_{ie}, \varepsilon_{in}, \varepsilon_{sc}) \quad (8)$$

де  $G$ -комбінація ( у квадраті) 2QP матричних елементів:

$$V(1,2;4,3) = \sqrt{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)(2j_4 + 1)} (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + j_4 + m_1 + m_2} \times \quad (9)$$

$$\times \sum_{\lambda, \mu} (-1)^\mu \begin{bmatrix} j_1 \dots j_3 \dots \lambda \\ m_1 \dots m_3 \dots \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 \dots j_4 \dots \lambda \\ m_2 \dots m_4 \dots \mu \end{bmatrix} (Q_\lambda^{Qu} + Q_\lambda^{Br})$$

Величини  $Q_\lambda^{Qu}$ ,  $Q_\lambda^{Br}$  відповідають виділенню у формулі (3) кулонівської частини  $\exp(i/\omega/r_{12})/r_{12}$  і брейтовської -  $\exp(i/\omega/r_{12}) \alpha_1 \alpha_2 / r_{12}$ . Величина  $\sigma = -2 \text{Im}\Delta E$ , згідно із визначенням, є перерізом електрон-іонного зіткнення. Звичайна процедура у енергетичному підході зводиться до діагоналізації дійсної матриці  $M$ , в результаті це дозволяє отримати дійсну матрицю коефіцієнтів з власними векторами станів  $B_{iv,ie,J_i}^{IK}$  ( Glushkov-Ivanova, JQSRT,1986; Ivanov et al, Phys.Rev.A 1993; Ivanova et al, Phys. Rep., 1988). Одночасно реалізується перехід від чистої j-j схеми зв'язку моментів до представлення проміжної схеми, де квантові числа I, I' нумерують стани. Діагональні елементи трансформаційної матриці  $\langle IK | M | I'K' \rangle$  мають вигляд:

$$\langle IK | M | I'K' \rangle = \sum_{iv',ie'} B_{iv',ie'}^{IK'} \langle iv',ie',J_i | M | iv,ie,J_i \rangle B_{iv,ie,J_i}^{IK}, \quad (10)$$

і визначають відповідні перерізи електрон-іонного зіткнення (напр., процесу де-збудження:  $|IK, \varepsilon_{iv} j_{in} \rangle \rightarrow |\Phi_0, \varepsilon_{sc} j_{sc} \rangle$ ). Фейнманівська техніка діаграм далі використовується для наглядного представлення процесу де-збудження (збудження) i-QP стану за рахунок зіткнень (рисунок 1).



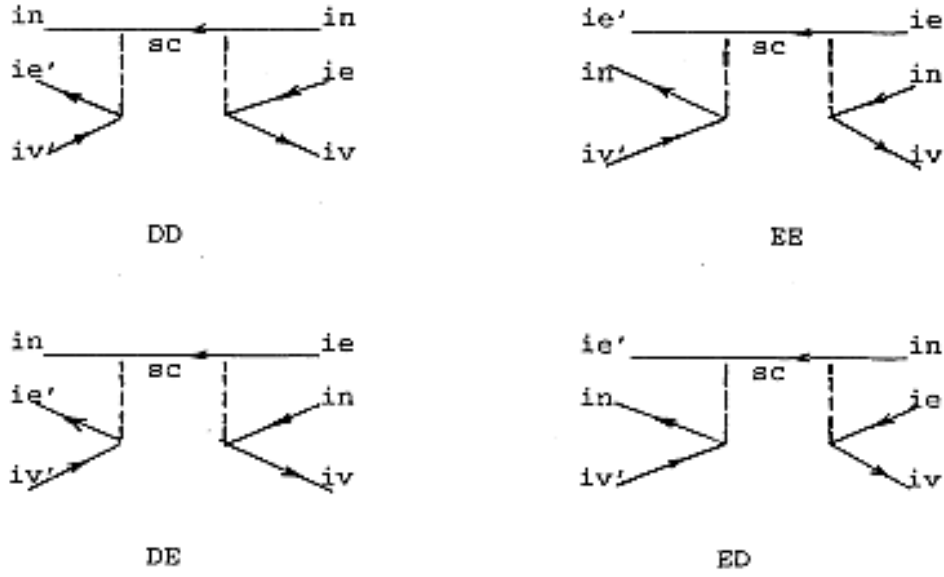


Рис. 1. Трьохквaziчастинкові діаграми, які описують е-іонні зіткнення, що супроводжуються переходом іона з порушеного двохквaziчастинкового стану в основний стан  $|IK, \varepsilon_{in} j_{in}\rangle \rightarrow |\Phi_0, \varepsilon_{sc} j_{sc}\rangle$ ; версії діаграм: DD – “пряма-пряма”, EE – “обмінна-обмінна”, DE – “пряма-обмінна”, ED – “обмінна-пряма”.

Сила зіткнення  $\Omega(I \rightarrow F)$  і переріз  $\sigma$  пов’язані співвідношенням (у кулонівських одиницях, які є зручними при розгляді багатозарядних іонів):

$$\sigma(I \rightarrow F) = \Omega(I \rightarrow F) \cdot \pi / \{(2J_i + 1)\varepsilon_{in} [(\alpha Z)^2 \varepsilon_{in} + 2]\} \quad (11)$$

де переріз зіткнення визначається квадратом відповідної амплітуди:

$$\sigma(IK \rightarrow 0) = 2\pi \sum_{j_{in}, j_{sc}} (2j_{sc} + 1) \left\{ \sum_{j_{ie}, j_{iv}} \langle 0 | j_{in}, j_{sc} | j_{ie}, j_{iv}, J_i \rangle B_{ie, iv}^{IK} \right\}^2 \quad (12)$$

Амплітудна комбінація в (12) має вигляд:

$$\begin{aligned} \langle 0 | j_{in}, j_{sc} | j_{ie}, j_{iv}, J_i \rangle = & \sqrt{(2j_{ie} + 1)(2j_{iv} + 1)} (-1)^{j_{ie} + 1/2} \times \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda + J_i} \times \\ & \times \{ \delta_{\lambda, J_i} / (2J_i + 1) Q_{\lambda}(sc, ie; iv, in) + \left[ \begin{matrix} j_{in} \dots j_{sc} \dots J_i \\ j_{ie} \dots j_{iv} \dots \lambda \end{matrix} \right] Q_{\lambda}(ie, in; iv, sc) \} \end{aligned} \quad (13)$$

В амплітуді (13) далі відповідні члени  $Q_{\lambda}^{Qu}$ ,  $Q_{\lambda}^{Br}$  обчислюються з використанням вперше у релятивістській теорії електрон-атомних зіткнень оптимізованих, розширених базисів релятивістських орбіталей. Для виконання

загально-фундаментального принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках відповідних перерізів і оптимізації базису в роботі використано відому релятивістську процедуру (Glushkov-Ivanov, Phys.Lett.A, 1992), що базується на принципі мінімізації внеску кореляційних діаграм 2 і вище порядків ТЗ  $A_d$ , що пов'язані з обміном подовжніми фотонами в уявну частину електронної енергії. Цей внесок визначається матричними елементами поляризаційного оператора  $V_{pol}(r_1, r_2)$  (див. нижче):

$$\text{Im } E_{inv}(\alpha - s | A_d) = \sum \text{Im } E(\alpha - s | A) \sim G\{ \langle V_{pol}(r_1, r_2) \rangle \} \quad (14)$$

Процедура дозволяє додержати принцип калібрувальної інваріантності, що у результаті є додатковим критерієм повноти урахування обмінно-кореляційних ефектів. Далі розглянемо питання побудови базису орбіталей докладніше на прикладі Ne-подібних іонів. Самий укорочений базис, звичайно, є  $\{2; 3\}$ , тоді секулярна матриця розраховується між 36 функціями 2QR станів  $2lj; 3lj$ , побудованих з 8 орбіталей реальних станів  $\{2;3\}$ -базиса. Базис  $\{2; 3,4\}$  включає додатково п'ять  $4lj$  ( $l=0,1,2$ ) 1QR станів. Далі, додаючи ще п'ять  $5lj$  орбіталей маємо  $\{2;3,4,5\}$ -базис. Секулярна матриця для  $\{2;3,4\}$ - і  $\{2;3,4,5\}$ - базисів відповідно містить 72 і 108 станів. Розширений базис  $\{2;3,4,5,6S\}$  включає додатково  $f$ -орбіталі і штурмівські додатки. Як відомо, спектр штурмівського доповнення може містити безкінечне (але пораховане) число розв'язків. Напр., власне значення  $\delta_{3lj} = 1$  відповідає орбіталі  $\varphi_{3lj}$  реального стану, решта значень  $\delta < 1$  відповідає орбіталям штурмівського доповнення,  $4lj, 5lj$  або  $6lj$  з  $l = 0,1,2,3$ , тобто, кожна серія орбіталей реальних станів доповнюється лише однією штурмівською орбіталою той же симетрії, яка генерує 36 додаткових віртуальних станів Ne-подібного іону. Звичайно, крім станів континууму, є необхідність обліку і рідбергівських станів. Тим паче, що у процесах електрон-іонних зіткнень за участю багатозарядних іонів у плазмі відповідні стани збігаються до нижньої межі континууму  $-\varepsilon_0$ , тобто фактично визначається термалізована енергетична зона рідбергівських і автоіонізаційних рідбергівських станів, що збігаються до порогу іонізації кожного іону у плазмі. Авжеж, для забезпечення високої точності розрахунку характеристик електрон-іонних зіткнень потрібно додаткове урахування обмінно-кореляційних ефектів 2 і вище порядків ТЗ (поправки на поляризацію тощо). Поляризаційний оператор  $V_{pol}(r_1, r_2)$  нами обрано у релятивістській формі 2-частинкового оператора (Glushkov, Rus.Phys.J, 1990; Ivanov-Ivanova-Glushkov, Phys.Scr. 1985), який додається до (3) при розрахунку  $M^{(2)}$ . Слід зазначити, що переріз діелектронного захоплення можна отримати аналітичним продовженням  $\Omega(i \rightarrow j; \varepsilon_{in})$  в область енергій  $\varepsilon_{in}$  нижче порогу електрон-атомного зіткнення, де енергія розсіяного (захопленого) електрону  $\varepsilon_{sc} = \varepsilon_{in} - \varepsilon_{ij}$  стає негативною:

$$C(i-j) = \frac{\pi a_0^2}{(2J_i + 1)} \int_{\varepsilon_{jm} + \varepsilon_{ji}}^{\infty} d\varepsilon_{in} \frac{Ry}{\varepsilon_{in}} \Omega(i-j; \varepsilon_{in}) F(\varepsilon_{in}; T_e) \quad (15)$$

де  $a_0$  – борівський радіус,  $Ry$ - енергія Ридберга (у кулонівських од.  $Ry=Z^2/2$ ),  $F$ - функція розподілу електронів по  $\varepsilon$  (звичайно використовується релятивістська функція Максвелла-Больцмана; по справжньому, це модельний елемент, який допускає використання і немаксвеллівської функції). Напр., наявність зовнішнього електромагнітного поля може привести до перекручення функції розподілу в області величин енергій, тощо. Всі розрахунки в роботі виконані за допомогою атомного чисельного коду Superatom-ISAN.

У **третьому** розділі наведені результати розрахунку на основі нового методу енергій рівнів, сил осциляторів радіаційних переходів в спектрах багатозарядних іонів, перерізів збудження за рахунок електронного зіткнення, сил електрон-іонних зіткнень, а також швидкісних коефіцієнтів для сил електронних зіткнень для цілого ряду Ве-, F-подібних іонів. Представлені дані по енергіях переходів, силах осциляторів і силах зіткнень для переходів  $2s^2-2s_{1/2}2p_{1/2,3/2}$  в спектрах Ве-подібних іонів із  $Z=26-36$  і плазмових параметрах густині  $n_e=10^{22}-10^{24} \text{ cm}^{-3}$ , температурі  $T=0.5-2$  кеВ (параметр  $\mu \sim 0.01-0.3$ ). В таблиці 1 наведені наші дані для зсуві енергії  $\Delta E$   $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$  переходу для Ве-подібних іонів з  $Z = 26-36$  при різних значеннях електронної густини і температурах (кеВ).

Таблиця 1

Зсув енергії  $\Delta E$  ( $\text{cm}^{-1}$ )  $2s^2-[2s_{1/2}2p_{1/2}]_1$  переходу для Ве-подібних іонів при різних значеннях густини  $n_e$  ( $\text{cm}^{-3}$ ) і  $T$  (еВ): наші дані (ТЗ-ДКШ) і також аналогічні дані, отримані в БКДФ-МП (Li et al) і моделі іонної сфери (IS)

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

З фізичної точки зору поведінка зсувів пояснюється очевидною обставиною, саме, збільшенням блакитного зсуву ліній внаслідок збільшення ефектів електронного екранування. Варто зазначити, що в досить акуратній реалізації методу ДФ розбіжність сил осциляторів складає  $\sim 1.1\%$ , в нашій роботі калібрувальний-неінваріантний внесок в радіаційну ширину не перевищує  $0.2\%$ .

Далі наведені дані детальних обчислень перерізів збудження за рахунок зіткнень переходів  $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P)]$ ,  $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$ ,  $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$ ,  $[2s2p\ ^3P^0 - (2p^2\ ^3P)]$  в спектрах Ве-подібних іонів з  $Z = 6-8$ , 26-36 і проведено порівняння результатів обчислень перерізу збудження за рахунок електронних зіткнень вказаних вище переходів в спектрах іонів вуглецю, азоту, кисню з даними альтернативного 3-конфігураційного R-матричного розрахунку Bannister et al (1999). В якості прикладу на рис.2 наведені експериментальні і теоретичні дані для перерізу електронного збудження за рахунок зіткнень переходу  $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$  в спектрі Ве- подібного кисню OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія); наша теорія (пунктирна лінія).

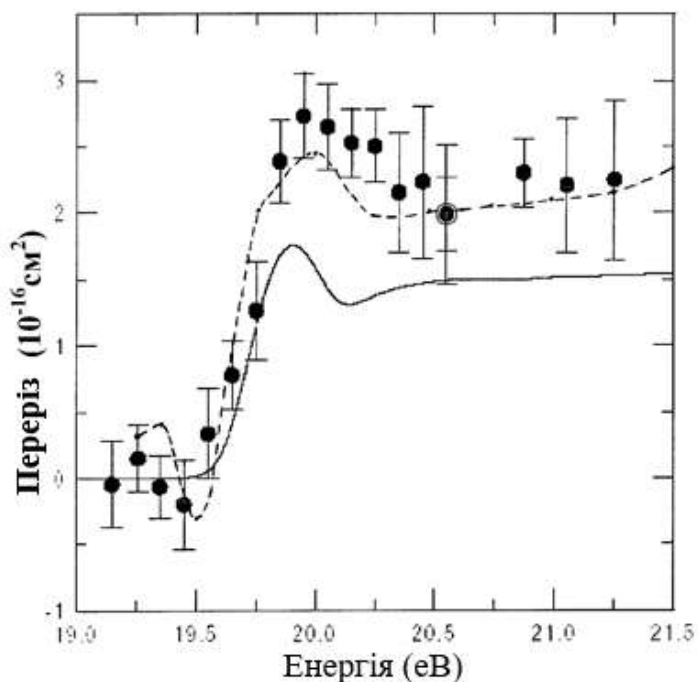


Рис.2. Експериментальні і теоретичні дані для перерізу збудження за рахунок зіткнень переходу  $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P_0)]$  в спектрі Ве- подібного OV разом з даними експерименту MEIBEL (точки); теорія - R-матричний розрахунок (суцільна лінія) Bannister et al (1999); наша теорія (пунктирна лінія).

Далі наведені дані релятивістських обчислень з урахуванням обмінно-кореляційних поправок, значення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури ( $2p\ ^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ ) основного стану Ве- та F-подібних іонів з  $Z = 19-26$  (енергія налітаючого електрона  $\epsilon_{in} = 0,1294 \cdot Z^2$  eV,  $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = Z^2$  keV ( $Z$ - заряд остова)) і показано, що наш підхід забезпечує

цілком фізично розумну узгодженість теорії з експериментом, в декотрій мірі навіть кращу ніж дані альтернативних обчислень, у т.ч., на основі одного з найбільш ефективних і широко використовуємих за теперішнього часу R-матричного методу (версії ICFT, LS+JAJOM).

В четвертому розділі дані масових обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-коншемівським та дебай-хюккелівським наближенням енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  і  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ , в спектрах Ne-подібних іонів з  $Z \sim 20-83$ . У табл.2 наведені експериментальні дані енергій (в  $10^2 \text{ см}^{-1}$ ; повний кутовий момент  $J=1$ ) рівнів конфігурації  $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$  і  $2s 2p^6 3p, 4p$  в спектрі іона Ni XIX, а також результати розрахунку на основі різних теоретичних підходів, зокрема: методом МКДФ (Froese Fischer, 2004), релятивістської ТЗ (РБТЗ) (Safronova et al, 2005), релятивістської ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП) Ivanova-Glushkov (1986), наші дані.

Таблиця 2

Енергії рівнів конфігурації  $2s^2 2p^5 3s, 3d, 4s, 4d$  і  $2s 2p^6 3p, 4p$  в іоні Ni XIX (в  $10^2 \text{ см}^{-1}$ ; повний кутовий момент  $J=1$ ): теорії - методо МКДФ (Froese Fischer, 2004), релятивістська ТЗ (РБТЗ) (Safronova et al, 2005), релятивістська ТЗ з емпіричним "0" наближенням (РТЗМП) Ivanova-Glushkov (1986), наші дані

Рівень $J=1$	Експ.	МКДФ	РБТЗ	РТЗМП	Наші дані
$2p_{3/2} 3s_{1/2}$	71,280	71,208	71,276	71,225	71,270
$2p_{1/2} 3s_{1/2}$	72,620	72,609	72,613	72,584	72,611
$2p_{3/2} 3d_{3/2}$	78,130	78,065	78,126	78,072	78,121
$2p_{3/2} 3d_{5/2}$	79,110	79,061	79,106	79,064	79,102
$2p_{1/2} 3d_{3/2}$	80,520	80,512	80,517	80,517	80,512
$2s_{1/2} 3p_{1/2}$	-	-	-	86,277	86,318
$2s_{1/2} 3p_{3/2}$	-	-	-	86,721	86,768
$2p_{3/2} 4s_{1/2}$	-	95,887	-	95,879	95,882

Аналізуючи представлені дані, можна відзначити, що, по-перше, дані нашого розрахунку знаходяться в досить хорошій згоді з експериментальними результатами, трохи кращому, ніж альтернативні дані, отримані на основі МКДФ, РТЗМП і РБТЗ обчислень. По-друге, слід підкреслити важливість коректного обліку найскладніших обмінно-кореляційних ефектів (поляризація остова, екранування). Далі наведені результати обчислень спектральних характеристик Na-подібних спектрі – сателітів  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$  ( $J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ ) до 2-3 переходів в Ne-подібних іонів з  $Z = 17-26$ , у тому числі Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII. В таблиці 3 шукані дані надані для Na-подібного іону ArVIII, зокрема, наші дані (с), а також дані обчислень на основі методу (а) БКХФ та (b) – РТЗМП (Ivanova-Gogava, 1988). Фактично враховано накладення всіх станів двох електронів і однієї

вакансії, які можна побудувати з  $2p^{-1}_{1/2}, 2p^{-1}_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}$  орбіталей. У таблиці показані головні терми відповідних векторів станів. Сильне змішування станів спостерігається як для низько лежачих рівнів, де змішуються, як правило, два стани, так і для високо лежачих рівнів, для яких можливо змішування 3-х і більше станів. Аналіз показує, що облік вищих порядків ТЗ, в основному, змішує абсолютне положення всіх рівнів, що викликано неповною компенсацією поправок вищого порядку.

Таблиця 3

Енергії рівнів конфігурації  $2p^5 3s 3p, 2p^5 3p^2$  в іоні Ar VIII (в  $10^3 \text{ см}^{-1}$ ;  $J=3/2$ ): а – метод ХФ; б - метод релятивістської ТВ з емпіричним “0” наближенням; с - наш розрахунок (з урахуванням вищих порядків ТЗ); е - експеримент

Конфігурація рівня	а	б	с	е
0.54(p'sp'2)0.50(p'sp1)0.42(p'sp0)	2079	2076	2059	2060
0.80(p'sp0)0.39(psp1)	2098	2094	2079	2080
0.61(p'sp'2)0.60(p'sp1)0.39(p'sp'1)	2119	2105	2089	2091
0.65(psp'1)0.47(psp1)0.41(p'sp0)	2127	2114	2099	2100
0.56(psp'2)0.54(psp1)0.49(p'sp'2)	2129	2120	2105	2106
0.77(p'sp'1)0.54(p'sp1)	2184	2171	2164	2165
0.79(p'sp'1)0.52(psp1)0.26(p'sp'1)	2196	2184	2175	2178
0.98(p'ss0)	1995	1980	1980	1980
0.60(p'pp0)0.53(p'pp'1)0.37(p'p'p'0)	2256	2244	2240	
0.65(p'pp'1)0.46(p'pp0)0.39(pp'p'2)	2272	2257	2255	
0.78(p'pp'2)0.38(p'p'p'0)	2273	2258	2257	
0.81(ppp'1)0.35(ppp'2)0.32(p'pp'1)	2284	2271	2268	
0.61(pp'p'2)0.48(p'p'p'2)0.38(p'p'p'2)	2291	2277	2274	
0.54(pp'p'2)0.52(p'pp'2)0.48(p'p'p'2)	2309	2295	2291	
0.73(p'p'p'0)0.53(p'pp0)0.28(ppp'2)	2331	2319	2316	
0.64(p'p'p'2)0.53(ppp'2)0.40(ppp'1)	2362	2356	2356	

Детальне порівняння відносних положень рівнів енергії з експериментальними даними (колонка с) показує, що включення вищих поправок покращує на  $\sim 2-10 \text{ тис. см}^{-1}$  відносне положення зазначених рівнів. В межах узагальненої спрощеної статистичної схеми обліку розподілу інтенсивностей ліній переходів між конфігураціями з великим набором станів представлені дані теоретичного моделювання спектрів діелектро нних сателітів для Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII, які узагальнюють та доповнюють відомі класичні результати Ivanova et al (1986,1988).

В п'ятому розділі представлені дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани  $2p^5 3s$  конфігурації ( $2p^5 3s[3/2]^o_2, 2p^5 3s[1/2]^o_0, 2p^5 3s[1/2]^o_1, 2p^5 3s[3/2]^o_1$ ) нейтрального неону при енергії електрона, що налітає  $E_i = 10-120 \text{ eV}$ , отримані дані щодо спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження

електронним ударом станів для конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$  Ne-подібного іона  $Kr^{26+}$  з основного стану (енергія налітаючого електрона 4.082 кеВ та 6.80 кеВ), вперше представлені із спектроскопічною точністю теоретичні дані по ефективних силах зіткнень для Ne-подібного іона  $Kr^{26+}$  для температур  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7 K$  та електронної густини (типова густина в плазмі токамака)  $n_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Докладний аналіз диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани  $2p^5 3s$  конфігурації ( $2p^5 3s[3/2]_2^o$ ,  $2p^5 3s[1/2]_0^o$ ,  $2p^5 3s[1/2]_1^o$ ,  $2p^5 3s[3/2]_1^o$ ) нейтрального неону при  $E_i = 10-120 \text{ eV}$  показує, що, для малих енергій  $E_i = 20-30 \text{ eV}$  узгодженість теоретичних і експериментальних даних є значно гіршою, ніж, для високих енергій налітаючого електрона в районі  $E_i 100 \text{ eV}$ . Важливо підкреслити, враховуючи досить високу складність розглянутої системи, що дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують експериментальні дані, особливо у порівнянні з даними обчислень на основі методів типу UFOMBT, DWBA, RDWA. Ще один важливий аспект пов'язаний з провалом в перерізі, кут розсіювання  $20^\circ$ , який відтворюється (але не в повній мірі) в рамках нашого підходу. Далі в таблиці 4 наведені розраховані нами (ТЗ-ДКШ) відповідні значення усереднених сил осциляторів gf для переходів в спектрі іона  $Kr^{26+}$ .

Таблиця 4

Сили осциляторів gf для ряду e-переходів зі збудженого стану в основний стан іону  $Kr^{26+}$  (див. текст)

Перехід	БКДФ	$L/V_{\text{дф}}$	ТЗ-ДКШ	$L/V_{\text{КЕД}}$	gf (реком.)
$2s^2 2p^5 3s (3/2, 1/2)_1$	$1.34 \times 10^{-1}$	0.98	$1.27 \times 10^{-1}$	1.01	-
$2s^2 2p^5 3s (1/2, 1/2)_1$	$8.45 \times 10^{-2}$	0.98	$8.35 \times 10^{-2}$	0.99	-
$2s^2 2p^5 3d (3/2, 3/2)_1$	$6.41 \times 10^{-3}$	0.95	$7.77 \times 10^{-3}$	1.00	$7.79 \times 10^{-3}$
$2s^2 2p^5 3d (3/2, 5/2)_1$	$1.55 \times 10^0$	0.96	$1.53 \times 10^0$	1.00	$1.54 \times 10^0$
$2s^2 2p^5 3d (1/2, 3/2)_1$	$1.93 \times 10^0$	0.96	$1.94 \times 10^0$	0.99	$1.94 \times 10^0$
$2s 2p^6 3p (1/2, 1/2)_1$	$8.97 \times 10^{-2}$	1.00	$8.81 \times 10^{-2}$	1.00	$8.75 \times 10^{-2}$
$2s 2p^6 3p (1/2, 3/2)_1$	$3.05 \times 10^{-1}$	1.00	$3.05 \times 10^{-1}$	1.00	$3.05 \times 10^{-1}$

Також представлені рекомендовані емпіричні значення і дані розрахунку методом БКДФ. Важливо зазначити, що надані значення сил осциляторів з використанням оператора переходу в формі довжини і швидкості  $L/V$  (показник урахування обмінно-кореляційних ефектів в розрахунках відповідних термів і сил осциляторів). Аналіз показує, що наші дані прийнятно узгоджуються з даними, рекомендованими NIST, і в деякій мірі мають більш високу точність, ніж дані БКДФ. Слід підкреслити важливість коректного урахування найскладніших обмінно-кореляційних ефектів (поляризація остова, екранування), які наприклад, у БКДФ адекватно не враховані. Використання калібрувально-інваріантних базисів орбіталей є також вкрай важливим аспектом теоретичної процедури. Зауважимо, що значення сил осциляторів для зазначених в таблиці 4 переходів без урахування ефектів поляризації остова та

інших кореляційних внесків виявляються вищими від наведених наших даних в середньому на 20-22%. В таблиці 5 наведені наші значення (наші дані) перерізів збудження електронним ударом групи станів  $Kr^{26+}$  при енергії налітаючого електрона 6.80 кеВ, а також дані (для перших 26 збуджених станів) розрахунку R-матричним методом у наближенні Брейта-Паулі Gupta et al (BP-RM), в релятивістському наближенні перевернутих хвиль Reed et al (RDWA), R-матричним методом в наближенні ДФ Griffin et al (DF-RM, 2006).

Таблиця 5

Перерізи збудження електронним ударом станів  $Kr^{26+}$  при  $E_i=6.80$  кеВ

Рівень	BP-RM	RDWA	DF-RM	Наші дані
$2p^5 3s (3/2,1/2)_2$	2.08(-23)	2.05(-23)	2.73(-23)	2.68(-23)
$2p^5 3s (3/2,1/2)_1$	4.87(-22)	5.43(-22)	7.04(-22)	6.82(-22)
$2p^5 3p (3/2,1/2)_1$	3.87(-23)	4.11(-23)	5.26(-23)	5.01(-23)
$2p^5 3p (3/2,1/2)_2$	2.92(-22)	2.52(-22)	3.14(-22)	3.03(-22)
$2p^5 3s (1/2,1/2)_0$	4.37(-24)	4.40(-24)	5.53(-24)	5.39(-24)
$2p^5 3s (1/2,1/2)_1$	2.60(-22)	3.18(-22)	4.24(-22)	4.11(-22)
$2p^5 3p (3/2,3/2)_3$	5.22(-23)	4.84(-23)	6.21(-23)	5.93(-23)
$2p^5 3p (3/2,3/2)_1$	2.61(-23)	2.35(-23)	3.32(-23)	3.08(-23)
$2p^5 3p (3/2,3/2)_2$	2.84(-22)	2.16(-22)	2.80(-22)	2.76(-22)
$2p^5 3p (3/2,3/2)_0$	9.69(-22)	1.08(-21)	1.29(-21)	1.14(-21)
$2p^5 3p (1/2,1/2)_1$	2.14(-23)	2.05(-23)	2.69(-23)	2.56(-23)
$2p^5 3p (1/2,3/2)_1$	2.60(-23)	2.49(-23)	3.30(-23)	3.19(-23)
$2p^5 3p (1/2,3/2)_2$	2.51(-22)	2.32(-22)	2.84(-22)	2.72(-22)
$2p^5 3d (3/2,3/2)_0$	2.04(-23)	2.05(-23)	2.58(-23)	2.44(-23)
$2p^5 3p (1/2,1/2)_0$	3.27(-21)	2.83(-21)	3.27(-21)	3.21(-21)
$2p^5 3d (3/2,3/2)_1$	9.15(-23)	9.09(-23)	1.20(-22)	1.13(-22)
$2p^5 3d (3/2,3/2)_3$	2.39(-22)	2.26(-22)	2.76(-22)	2.65(-22)
$2p^5 3d (3/2,5/2)_2$	5.86(-23)	5.72(-23)	7.17(-23)	7.01(-23)
$2p^5 3d (3/2,5/2)_4$	6.00(-23)	5.72(-23)	7.28(-23)	7.02(-23)
$2p^5 3d (3/2,3/2)_2$	2.42(-23)	2.20(-23)	3.15(-23)	2.98(-23)
$2p^5 3d (3/2,5/2)_3$	2.02(-22)	1.88(-22)	2.29(-22)	2.16(-22)
$2p^5 3d (3/2,5/2)_1$	9.74(-21)	9.93(-21)	1.20(-20)	1.14(-20)
$2p^5 3d (1/2,3/2)_2$	2.89(-23)	2.79(-23)	3.58(-23)	3.43(-23)
$2p^5 3d (1/2,5/2)_2$	4.77(-23)	4.55(-23)	5.74(-23)	5.52(-23)
$2p^5 3d (1/2,5/2)_3$	2.26(-22)	2.11(-22)	2.58(-22)	2.46(-22)
$2p^5 3d (1/2,3/2)_1$	1.21(-20)	1.19(-20)	1.40(-20)	1.33(-20)

Також важливо зазначити, що для певної групи термів дані по перерізах збудження в даній роботі вперше представлені. У таблиці 6 представлені наші дані по ефективних силах зіткнень, із збудженням ряду станів іона  $Kr^{26+}$  при  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7$  К,  $n_e=10^{14}$  см<sup>-3</sup> (типова електронна густина в плазмі токамака).



Для порівняння в таблиці 6 наведені також і дані (для перших 26 збуджених станів) розрахунку R-матричним методом у наближенні ДФ Griffin et al (RM, 2006) при  $T=5 \times 10^6$  К; порівняння даних обох обчислень демонструє розумну кореляцію.

Таблиця 6  
Ефективні сил зіткнень  $Kr^{26+}$  при  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7$  К,  $n_e=10^{14} \text{ см}^{-3}$  (наші дані)

Терм	$T=5 \times 10^6$ К	$T=5 \times 10^6$ К	$T=1 \times 10^7$ К	$T=3 \times 10^7$ К
	DF-RM	ЕП (нд)	ЕП(нд)	ЕП (нд)
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_2$	8.29(-3)	8.13(-3)	4.56(-3)	1.81(-3)
$2p^5 3s (3/2, 1/2)_1$	9.36(-3)	9.19(-3)	5.65(-3)	3.82(-3)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_1$	3.49(-3)	3.38(-3)	2.25(-3)	1.13(-3)
$2p^5 3p (3/2, 1/2)_2$	4.30(-3)	4.18(-3)	3.04(-3)	2.22(-3)
$2p^5 3s (1/2, 1/2)_0$	1.32(-3)	1.21(-3)	7.51(-4)	2.98(-4)
$2p^5 3s (1/2, 1/2)_1$	7.69(-3)	7.56(-3)	4.62(-3)	2.73(-3)
$2p^5 3p (3/2, 3/2)_3$	4.03(-3)	3.89(-3)	2.81(-3)	1.44(-3)
$2p^5 3p (3/2, 3/2)_1$	3.14(-3)	3.01(-3)	2.00(-3)	9.82(-4)
$2p^5 3p (3/2, 3/2)_2$	3.36(-3)	3.12(-3)	2.43(-3)	1.78(-3)
$2p^5 3p (3/2, 3/2)_0$	8.67(-3)	8.49(-3)	7.67(-3)	7.14(-3)
$2p^5 3p (1/2, 1/2)_1$	2.69(-3)	2.54(-3)	1.62(-3)	8.33(-4)
$2p^5 3p (1/2, 3/2)_1$	2.80(-3)	2.72(-3)	1.81(-3)	9.45(-4)
$2p^5 3p (1/2, 3/2)_2$	3.27(-3)	3.16(-3)	2.53(-3)	1.86(-3)
$2p^5 3d (3/2, 3/2)_0$	1.24(-3)	1.13(-3)	9.72(-4)	5.69(-4)
$2p^5 3p (1/2, 1/2)_0$	1.71(-2)	1.58(-2)	1.63(-2)	1.64(-2)
$2p^5 3d (3/2, 3/2)_1$	3.45(-3)	3.31(-3)	2.68(-3)	1.61(-3)
$2p^5 3d (3/2, 3/2)_3$	3.80(-3)	3.67(-3)	2.92(-3)	2.08(-3)
$2p^5 3d (3/2, 5/2)_2$	4.13(-3)	3.96(-3)	3.07(-3)	1.73(-3)
$2p^5 3d (3/2, 5/2)_4$	4.48(-03)	4.32(-03)	3.35(-03)	1.82(-03)
$2p^5 3d (3/2, 3/2)_2$	3.08(-03)	2.97(-03)	2.13(-03)	9.97(-04)
$2p^5 3d (3/2, 5/2)_3$	3.20(-03)	3.02(-03)	2.42(-03)	1.63(-03)
$2p^5 3d (3/2, 5/2)_1$	3.37(-02)	3.16(-02)	3.66(-02)	4.84(-02)
$2p^5 3d (1/2, 3/2)_2$	2.41(-03)	2.30(-03)	1.71(-03)	9.89(-04)
$2p^5 3d (1/2, 5/2)_2$	3.61(-03)	3.51(-03)	2.65(-03)	1.41(-03)
$2p^5 3d (1/2, 5/2)_3$	3.12(-03)	2.99(-03)	2.47(-03)	1.83(-03)
$2p^5 3d (1/2, 3/2)_1$	3.83(-02)	3.71(-02)	4.19(-02)	5.68(-02)

Важливий висновок полягає у тому, що точність наведених даних суттєво обумовлюється, крім всього іншого, також і якістю використаних базисів хвильових функцій, а також повнотою урахування обмінно-кореляційних ефектів, ефектів міжконфігураційної взаємодії. В таблиці 7 наведені теоретичні значення розрахованих нами швидкостей за рахунок зіткнень збудження (ШЗЗ), іонізації (ШЗІ), а також радіаційного розпаду (ШРР) та діелектронного захоплення (ШДЗ) станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між

рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму. В таблиці 7 також вказані і розглянуті значення параметрів  $n_e=10^{19-20}\text{см}^{-3}$  і температури  $T_e=20\text{eV}$ . Для порівняння наведені також ( $T=20\text{ eV}$ ) значення швидкостей, визначені на основі методу релятивістської ТЗ з модельним нульовим наближенням (РТЗМП) Ivanova et al (1996).

Таблиця 7

Швидкості збудження і дезбудження за рахунок зіткнень (ШЗЗ и ШДЗ:  $\text{см}^3/\text{с}$ ), іонізації за рахунок зіткнень (ШІЗ:  $\text{см}^3/\text{с}$ ), радіаційного розпаду (ШРР: в  $\text{с}^{-1}$ ) для Ne-подібного Ar при плазмових параметрах  $n_e=10^{19-20}\text{см}^{-3}$ ,  $T_e=20\text{eV}$

		РТЗМП			Наші дані		
Параметри	$n_e, \text{см}^{-3}$	$T_e=20\text{eV}$	$T_e=20\text{eV}$	$T_e=20\text{eV}$	$T_e=20\text{eV}$	$T_e=20\text{eV}$	$T_e=20\text{eV}$
Перехід		1→f	2→f	3→f	1→f	2→f	3→f
ШЗЗ ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	2.36 -07	3.21-10	3.47-12	2.55 -07	3.45-10	3.82-12
	1.0+20	1.98-07	2.11-10	4.46-12	2.22-07	2.36-10	5.01-12
Перехід		1→2	1→3	2→3	1→2	1→3	2→3
ШРР ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	2.22+09	1.71+09	5.97+10	2.48+09	1.96+09	6.28+10
	1.0+20	1.41+09	1.03 +09	6.38+10	1.62+09	1.25 +09	6.57+10
ШДЗ ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	5.35-10	1.64-10	1.13-09	5.77-10	1.92-10	1.28-09
	1.0+20	5.51-10	1.60-10	1.12-09	5.94-10	1.78-10	1.25-09

В табл. 8 наведені розраховані нами значення швидкісних параметрів ((ШЗЗ, ШДЗ, ШІЗ:  $\text{см}^3/\text{с}$ ), розпаду (ШРР: в  $\text{с}^{-1}$ ) для Ne-подібного Ar, для  $n_e=10^{19-20}\text{см}^{-3}$  і температури  $T_e=40\text{ eV}$ .

Таблиця 8

Швидкості збудження і дезбудження за рахунок зіткнень (ШЗЗ и ШДЗ:  $\text{см}^3/\text{с}$ ), іонізації (ШІЗ:  $\text{см}^3/\text{с}$ ), радіаційного розпаду (ШРР: в  $\text{с}^{-1}$ ) для Ne-подібного іону Ar при плазмових параметрах  $n_e=10^{19-20}\text{см}^{-3}$  і електронній температурі  $T_e=40, 60\text{ eV}$ . (наші дані)

Параметри	$n_e, \text{см}^{-3}$	$T_e=40\text{eV}$	$T_e=40\text{eV}$	$T_e=40\text{eV}$
Перехід		1→f	2→f	3→f
ШЗЗ ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	1.72-07	9.95-10	7.83-11
	1.0+20	9.88-08	1.68-09	9.79-11
Перехід		1→2	1→3	2→3
ШРР ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	1.25+09	9.77+08	7.24+10
	1.0+20	3.72+09	2.78+09	5.63+10
ШДЗ ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	3.18-10	8.45-11	6.81-10
	1.0+20	5.02-10	1.56-10	4.99-10
Перехід		2→1	3→1	3→2
ШІЗ( $i\rightarrow i ;k$ )	1.0+19	5.33-10	5.63-10	7.11-11
	1.0+20	7.67-10	6.94-11	8.93-11

У шостому розділі викладені основи нової версії релятивістського енергетичного підходу в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому електромагнітному полі (полі лазерного випромінювання), яка базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів, зіткнень (перерізів, сил зіткнень) істотно багатоелектронних атомів і іонів в присутності зовнішнього електромагнітного поля, зокрема, для визначення характеристик процесу електрон-іонних зіткнень ( $l$  - фотонні перерізи іонізації, перерізи (e,2e) реакцій):

$$e^-(k_i) + A^{+Z-1}(1s) + l\omega \rightarrow A^{+Z} + e^-(k_f) + e^-(k_e) \quad (16)$$

де  $k_{i,f}$  відповідають початковому (initial) і кінцевому (final) хвильовим векторам електрону, що налітає;  $k_e$  - повільному електрону, що залишає атом при електрон-атомному зіткненні;  $\omega$  - частота електромагнітного поля (напруженість:  $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \sin \omega t$ ). В енергетичному підході задача зводиться до визначення уявної частини  $\text{Im}\Delta E$  за рахунок електрон-атомного зіткнення. Авжеж, початковий і кінцевий стан електрону, що налітає, описується хвильовою функцією типу Волкова, напр.,

$$\chi_{k_i}(r_0, t) = (2\pi)^{-3/2} \exp \left\{ i \left[ k_i \cdot r_0 - k_i \cdot \alpha_0 \sin \omega t - E_i t - \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A^2(t') dt' \right] \right\} \quad (17)$$

з векторним потенціалом  $A(t) = (c/\omega_0)\varepsilon_0 \sin \omega t$ ; функція континууму, кулонівською, волковською функцією; хвильова функція “одягнутого” полем електрону(атому)

$$\psi_0(r_1, t) = \left( 1 - \frac{i}{\omega} \varepsilon_0 \cdot r_1 \cos \omega t \right) \phi_0(r_1) \exp \left\{ -i \left[ W_0 t + \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t dt' A^2(t') \right] \right\} \quad (18)$$

де  $\phi_0(r_1)$  дається, напр., (4). Зсув має вираз через S-матричні елементи:

$$S_{k_{ff}, k_{ii}} = (2\pi)^{-1} i \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta(E_{k_f} - E_{k_i} - E_f - E_i - l\omega) T_l^{fi}(k_f, k_i) \quad (19)$$

де  $T_l$ -амплітуда процесу  $(k_i, i) \rightarrow (k_f, f)$  з обміном  $l$  фотонами. У наближенні низької частоти ( $\hbar\omega \ll k_i^2/2$ ) відтворюється загальновідома формула Kroll-Watson:

$$\frac{d\sigma^l}{d\Omega} = \frac{k_f^l}{k_i} J_l^2(q \cdot \alpha_0) \frac{d\sigma}{d\Omega}(k_f, k_i) \quad (20)$$

де  $\frac{d\sigma^l}{d\Omega}$ ,  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  диференціальні перерізи зіткнення в полі і відповідно без наявності додаткового поля;  $k_f^2(l) = k_i^2 + 2l\omega$ . Аргумент функції Бесселя  $J_l^2(q \cdot \alpha_0)$  у звич.од.  $q \cdot \alpha_0 = N = \frac{|e\varepsilon_0 \delta p|}{\hbar m \omega^2}$ , тобто фактично є відношенням амплітуди коливань електрону у електромагнітному полі  $\alpha_0 = e\varepsilon_0 / m\omega^2$  до довжини хвилі де Бройля по переданому імпульсу  $\hbar \delta p$ . Неважко зрозуміти, що електрон має бути достатньо швидким, напруженість поля – досить великою, але не більше  $\varepsilon_0'' = 5.14 \cdot 10^9 \text{В/см}$ , і  $N > 1$ , щоб фотонні процеси були досить імовірними.

Далі (пр. 6.3) наведені дані обчислення багатофотонних диференціальних перерізів  $(e, 2e)$  реакції для атома неону. Параметри поля лазерного випромінювання обрані таким чином: напруженість  $\varepsilon_0 = 2 \cdot 10^8 \text{В/см}$ , частота  $\hbar\omega = 1.17 \text{еВ}$  (ці параметри відповідають лазеру Nd: YAG), а енергія досить швидкого налітаючого електрона  $E_i = 100 \text{еВ}$ . Передбачається, що початок системи координат збігається з ядром атома неону, вісь z збігається з напрямом уздовж хвильового вектору налітаючого електрона, вісь x лежить в площині, утвореній хвильовим вектором налітаючого електрона і вектором поляризації лазерного поля (кут між даними векторами позначений  $\Theta$ ), кут розсіювання швидкого розсіяного електрона і кут вильоту повільного атомного  $2p$  електрона позначені як  $\theta_f$  та  $\theta_e$  відповідно, нарешті, кут між площиною розсіювання і площиною Oхz -  $\phi$  (азимутальний кут). Параметри електрон-атомного зіткнення системи і поля:  $\theta_f = 5^\circ$ ,  $\theta_e = 45^\circ$ ,  $\phi = 0^\circ$ . Далі обчислена  $l$ -залежність ( $l$  - число фотонів, обмін якими супроводжує електрон-атомне зіткнення) багато фотонного диференціального перерізу іонізації  $[(e, 2e) \text{ реакція}]$  атома неону  $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$  електронним ударом в присутності поля випромінювання лазера Nd: YAG. Шукані  $l$ -залежності багатофотонного диференціального перерізу іонізації  $[(e, 2e) \text{ реакція}]$  Ne електронним ударом виявляються симетричними щодо  $l=0$ , що пояснюється властивостями функції Бесселя. Далі наведені результати для залежності від кута розсіювання багатофотонних диференціальних перерізів іонізації  $[(e, 2e) \text{ реакція}]$  Ne  $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$  електронним ударом в присутності поля випромінювання лазера Nd: YAG, зокрема, дані для перерізу, підсумованого по багатофотонних процесах, а також перерізу із супроводжуючим електрон-атомне зіткнення поглинанням фотону, тобто  $l=-1$ . Випадок випромінювання фотона, тобто  $l=1$  в розглянутому наближенні є симетричним по відношенню до випадку поглинання, проте, в більш реалістичній картині, зрозуміло, буде мати місце деяка асиметрія. Осциляції, що мають місце у відповідних перерізах, спричиняються осциляціями функції Бесселя, тож в разі, скажімо,  $l=2$  осциляцій буде більше. У разі сумарного багатофотонного перерізу шукані осциляції, природно, виявляються згладженими. Якісно новою рисою поведінки багатофотонних перерізів  $(e, 2e)$  реакції для багатоелектронного атома (неон) є

велика відмінність у випадках, коли вектор поляризації лазерного випромінювання і хвильовий вектор електрона, що налітає, або паралельні, або перпендикулярні. В разі ( $\epsilon_0 \parallel k_i$ ) має місце різкий пік поблизу  $l=0$ . В разі ( $\epsilon_0 \perp k_i$ ) переріз визначається багатифотонними процесами. Таким чином, мова йде про нове фізичне явище радикально різної поведінки перерізів реакцій типу  $(e, 2e)$  за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору електрона, що налітає.

## ВИСНОВКИ

Розвинені в роботі нові підходи і отримані оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці і спектроскопії, зокрема, релятивістської спектроскопії за рахунок зіткнень електрон- та іон-атомних систем, заснованої на використанні релятивістського енергетичного підходу у калібрувальній-інваріантній формі.

Основні результати і висновки роботи полягають у наступному:

1. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень розвинуто новий релятивістський підхід до обчислення енергетичних і спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (у т.ч., перерізів, сил е-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного та радіаційного розпаду, сил осциляторів тощо) для атомів, багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів мішеней і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень), що базується на релятивістському енергетичному підході, S-матричному формалізмі Гелл-Мана та Лоу.

2. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень для урахування впливу ефектів плазмового середовища та багаточастинкових ефектів розвинутий новий формалізм релятивістської багаточастинкової теорії збурень з дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським нульовим наближенням і вперше узагальнена послідовна калібрувальна-інваріантна *ab initio* методика генерації оптимізованого одноквазічастинкового уявлення і відповідно базисів релятивістських орбіталей в класі розглянутих задач релятивістських електрон-іонних зіткнень у дебаєвській плазмі.

3. Вперше адаптовані нові в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, включаючи ефекти поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок: електронів і вакансій через поляризований остов і ефекти взаємного екранування або антиекранування зовнішніх квазічастинок як ефектів вищих порядків релятивістської ТЗ, які базуються на використанні ефективних коректних обмінно-кореляційних функціоналів густини; на основі релятивістської ТЗ з дебай-хюккелівським «0» наближенням розвинута ефективна схема урахування станів континууму в межах релятивістської версії методу штурмовських розкладань.

4. Вперше з спектроскопічною точністю виконані обчислення енергій та імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, перерізів збуджень для бериліє-подібних іонів з зарядом атомного ядра  $Z = 6-36$  з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища (параметри плазми: густина  $n_e = 10^{22}-10^{24} \text{ cm}^{-3}$ , температура  $T = 0.5-2$  кеВ, параметр екранування  $\mu \sim 0.01-0.3$ ); проведено детальне порівняння отриманих даних з аналогічними даними на основі обчислень в межах методу багатоконфігураційного наближення ДФ і наближення модельного потенціалу (МП) для урахування ефектів плазмового екранування моделі (Li et al), а також дані розрахунку в рамках простої моделі іонної сфери. Варто зазначити, що в досить акуратній реалізації методу ДФ розбіжність сил осциляторів складає  $\sim 1.1\%$ , в той час як в даній роботі калібрувально-неінваріантний внесок в радіаційну ширину не перевищує  $0.2\%$ .

5. Вперше проведені детальні обчислення значень перерізів збудження за рахунок зіткнень переходів  $[2s^2 \ ^1S - (2s2p \ ^1P)]$ ,  $[(2s2p \ ^3P^0) - (2s2p \ ^1P^0)]$ ,  $[(2s2p \ ^3P^0) - (2s2p \ ^1P^0)]$ ,  $[2s2p \ ^3P^0 - (2p^2 \ ^3P)]$  в спектрах Ве-подібних іонів з  $Z = 6-8, 26-36$ ; порівняння результатів обчислень перерізу збудження за рахунок електронних зіткнень вказаних вище переходів в спектрах іонів вуглецю, азоту, кисню з даними альтернативного 3-конфігураційного R-матричного розрахунку Bannister et al (1999) і експерименту показує, що при енергії нижчій ніж деяке  $E_0$  (напр.,  $E_0 \sim 20 \text{ eV}$  для Ве-подібного кисню) спостерігається розумна узгодженість даних обох теоретичних обчислень з експериментальними, однак, коли енергії вище  $E_0$  має місце розбіжність наших даних і R-матричної теорії, яка зумовлена різним ступенем урахування кореляційних ефектів (взаємодія конфігурацій) і різницею використаних базисів; при цьому слід відзначити кількісну коректність нашої теорії, особливо у порівнянні з потужним R-матричним методом.

6. На основі релятивістських обчислень з урахуванням обмінно-кореляційних поправок отримані значення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури ( $2p \ ^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ ) основного стану F-подібних іонів з  $Z = 19-26$  (енергія налітаючого електрона  $\epsilon_{in} = 0,1294 \cdot Z^2$  еВ,  $T = z^2$  кеВ ( $z$ - заряд остова),  $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) і показано, що наш підхід забезпечує цілком фізично розумну узгодженість теорії з експериментом, в декотрій мірі навіть кращу ніж дані альтернативних обчислень, у т.ч., на основі одного з найбільш ефективних і широко використовуємих за теперішнього часу R-матричного методу (версії ICFT, LS+JAJOM).

7. Наведені дані масових обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-коншемівським та дебай-хюккелівським наближенням енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  і  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$ , в спектрах Ne-подібних іонів з  $Z \sim 20-83$ . Порівняння отриманих в роботі даних по енергіям та імовірностям радіаційних переходів з даними інших обчислень, зокрема, на основі багатоконфігураційного методу ДФ та експериментальними даними для групи іонів, зокрема, CaXI, ScXII та інших (для цих іонів є уривчасті результати

beam-foil експерименту та ін.) показує, що отримані в роботі дані знаходяться у фізично розумній згоді з експериментальними даними і перевищують по точності альтернативні розрахунки за рахунок більш повного врахування обмінно-кореляційних поправок та використання оптимізованого одноквазічастинкового уявлення. Варто зазначити, що для ряду станів, зокрема,  $2p^5 4d (3/2, 3/2)_2 2p^5 4d (3/2, 5/2)_1$  (для іонів Ca XI, Sc XII),  $2s_{1/2} 3p_{1/2}$ ,  $2s_{1/2} 3p_{3/2}$  ( $J=1$ ) (Br XXVI) експериментальні дані наведені в літературі з досить високою похибкою. Аналіз кривих  $Z$ -залежностей імовірностей переходів демонструє певні, часом хаотичні, нерегулярності, пов'язані зі зміною ступеня взаємодії різних конфігурацій в шуканих спектрах, і сильну залежність характеристик від ступеня урахування обмінно-кореляційних ефектів.

8. Наведені дані масових обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським наближенням спектральних характеристик Na-подібних спектрів – сателітів  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$  ( $J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ ) до 2-3 переходів в Ne-подібних іонів з  $Z=17-26$ , у тому числі Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII. Порівняння даних з уривчастими даними експерименту показало високу точність наших обчислень, особливо в порівнянні з результатами обчислень на основі багато-конфігураційного методу ДФ. Характерними особливостями обчислених спектрів є досить інтенсивне змішування станів, а також досить суттєвий внесок поправок як другого так й вищих порядків ТЗ, урахування яких дозволяє покращити точність даних про абсолютне положення всіх рівнів на  $\sim 2-10$  тис.  $\text{см}^{-1}$ .

9. В рамках релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським наближенням та спрощеної статистичної схеми обліку розподілу інтенсивностей ліній переходів між конфігураціями з великим набором станів, узагальнена процедура теоретичного моделювання спектрів діелектронних сателітів; її конкретна реалізація для моделювання спектрів (проміжний випадок і спектр є лінійно-смугою) Na-подібних багатозарядних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII, показує, що узагальнена схема дає дані, більш точні у порівнянні з широко використовуваними схемами на основі даних обчислень у багатоконфігураційному наближенні ДФ.

10. На основі обчислень в межах нового релятивістського енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським «0» наближенням отримані дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження станів конфігурації в стани  $2p^5 3s$  конфігурації ( $2p^5 3s [3/2]_2^0$ ,  $2p^5 3s [1/2]_0^0$ ,  $2p^5 3s [1/2]_1^0$ ,  $2p^5 3s [3/2]_1^0$ ) нейтрального неону при енергії електрона, що налітає  $E_i = 10-120$  еВ (тобто в інтервалі, де часто використовуване стандартне борнівське наближення не працює); проведено докладне порівняння з наявними альтернативними теоретичними та експериментальними результатами, у тому числі, даними експерименту Khakoo et al, Register et al, Kanik et al і теоретичними даними,

отриманими на основі обчислень в межах наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), релятивістське наближення перекручених хвиль з 1-конфігураційною і багатоконфігураційною хвильовою функцією основного стану (SCGS-RDWA, MCGS-RDWA), а також методу ТЗ з урахуванням поправки першого порядку (UFOMBT).

11. Докладний аналіз отриманих в роботі даних для диференціальних і інтегральних перерізів вище вказаних станів неону, а також порівняння з наявними альтернативними теоретичними даними показує що, по-перше, для малих енергій  $E_i$  електрона (в інтервалі 20-30eВ), що налітає, узгодженість даних теорії та експерименту є значно гіршою, ніж, для високих енергій  $E_i$  в районі 100 eВ; по-друге, дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують емпіричні дані, особливо у порівнянні з даними обчислень на основі методів UFOMBT, DWBA, RDWA.

12. Аналіз отриманих даних для перерізів у випадку неону також показує, що релятивістський енергетичний формалізм в деяких випадках дає більш точні результати у порівнянні з іншими методами, що можна пояснити більш коректним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів та використанням більш повних базисів електронних хвильових функцій; R-матричний метод, особливо при малих кутах розсіювання може давати немалу похибку. Показано, що провал у перерізі, який має місце при куті розсіювання  $20^\circ$  імітується (не повною мірою) тільки в рамках енергетичного підходу; також виявлено, що при енергії  $E_i \sim 100$  eВ ситуація при порівнянні даних експерименту з даними інших теорій суттєво поліпшується, зокрема, мова йде про UFOMBT, DWBA, RDWA, R-матричний метод та наш підхід.

13. На основі обчислень в межах нового енергетичного формалізму та релятивістської багаточастинкової ТЗ з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським «0» наближенням отримані дані щодо спектрів, сил осциляторів електричних дипольних переходів і перерізів збудження електронним ударом групи станів конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$  Ne подібного іона  $Kr^{26+}$  з основного стану (енергія електрона, що налітає 4.082 кеВ і 6.80 кеВ). Проведено порівняння з наявними для ряду термів альтернативними даними обчислень R-матричним методом у наближенні Брейта -Паулі Gupta et al (БП-RM), у релятивістському наближенні перекручених хвиль Reed et al (RDWA), R-матричним методом в наближенні ДФ Griffin et al (ДФ-RM); для цілої групи термів в роботі вперше представлені результати по перерізах збудження; показано, що значення, отримані в рамках енергетичного підходу даної роботи і R-матричного методу для перерізів збудження станів «лазерних» конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$   $Kr^{26+}$  з основного стану за рахунок зіткнень ( $E_i=4.082, 6.8$  кеВ) виявляються найбільш близькими до експериментальних значень, в той час як у методах БП-RM і наближенні перекручених хвиль RDWA використані скорочені базиси, через що, дані по перерізах збудження виявляються сильно заниженими; в той же час, у R-матричному методі, хоча і



використується більш розширений базис, ефекти конфігураційної взаємодії виявляються врахованими в меншій мірі порівняно з нашим підходом.

14. Вперше представлені із спектроскопічною точністю теоретичні дані по ефективних силах зіткнень для Ne-подібного іона криптону  $\text{Kr}^{26+}$  для температур  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7 \text{K}$ , електронної густини (типова густина в плазмі токамака)  $n_e=10^{14} \text{cm}^{-3}$ ; аналіз показує, що дані наших обчислень (для перших 36 станів) в певній мірі узгоджуються з даними обчислень R-матричним методом у багатоконфігураційному наближенні БКДФ Griffin et al ( $T=5 \times 10^6 \text{K}$ ), але через більш коректне урахування складних обмінно-поляризаційних ефектів та застосування оптимізованих базисів хвильових функцій є більш точними.

15. Виконано детальне дослідження набору характеристик за рахунок зіткнень Ne-подібного іона  $\text{Ar}^{8+}$ , як одного з найбільш оптимальних кандидатів на лазерну короткохвильову генерацію; розраховані енергії рівнів, сили осциляторів, сили електронних зіткнень (плазма  $\theta$ -пінч:  $n_e=10^{16} \text{cm}^{-3}$ ,  $T_e=65 \text{eV}$ ) для збудження з основного стану  $\text{Ar}^{8+}$  ( $E_0 = 0.425, 0.5, 0.750, 1.045 \text{keV}$ ) і проведено порівняння з альтернативними результатами обчислень методом БКДФ Bhatia-Doschek, релятивістської ТЗ з МП нульовим наближенням (РТЗ-МП) Ivanov-Ivanova-Knight і нечисленними експериментальними NIST значеннями; наведені дані обчислень із прийнятною точністю швидкісних параметрів збудження, іонізації, розпаду для групи станів Ne-подібного іону  $\text{Ar}^{8+}$ , які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму при параметрах плазми  $n_e=10^{19-20} \text{cm}^{-3}$  і температурі  $T_e=40, 60 \text{eV}$ .

16. Аналіз набору отриманих даних для швидкісних параметрів збудження, іонізації, розпаду для групи станів Ne-подібного іону  $\text{Ar}^{8+}$  показує, що результати обчислень на основі методу даної роботи в середньому на 8-12% перевищують дані обчислень на основі РТЗ-МП, причому останні виявляються в певній мірі заниженими в порівнянні з експериментальними на 10-15%; обчислення показують, що більш детальне експериментальне дослідження відповідних характеристик видається вкрай необхідним для подальшого вирішення як проблем загальної спектроскопії за рахунок зіткнень іонів у плазмі, так і актуальних проблем пошуку оптимальних кандидатів на генерацію лазерного випромінювання на основі плазми Ne-подібних іонів, і зокрема Ar, Cr, Fe.

17. Вперше розроблена нова версія релятивістського енергетичного формалізму в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому електромагнітному полі (полі лазерного випромінювання), яка базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській багаточастинковій ТЗ з оптимізованим нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів, зіткнень (перерізів, сил зіткнень) істотно багатоелектронних атомів і іонів в присутності зовнішнього електромагнітного поля.

18. На основі нової версії релятивістського енергетичного формалізму до опису електрон-атомних зіткнень в присутності полі лазерного випромінювання виконана оцінка багатофотонних диференціальних перерізів ( $e, 2e$ ) реакції для атома неону при параметрах  $e$ -атомних зіткнень системи і поля:  $\varepsilon_0=2 \cdot 10^8$  В/см,  $\hbar\omega = 1.17$  еВ,  $E_i=100$  еВ; Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень багатоелектронних релятивістських електрон-іонних систем у зовнішньому електромагнітному полі в рамках нової теорії на основі чисельних оцінок в наближенні низької частоти для ( $e, 2e$ ) реакції іонізації нейтрального атома Ne електронним ударом передбачені нові фізичні ефекти радикально різної поведінки перерізів реакцій типу ( $e, 2e$ ) за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору електрона, що налітає.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ АВТОРОМ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

(\*Статті у міжнародних наукових виданнях, які включені до міжнародних наукометричних баз Scopus, Web of Science, а також видань Springer, InTech)

1. \*Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Glushkov A.V., Kuznetsova A.A. Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional and Radiative Spectroscopy of Ions in Plasmas In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 27-44.
2. \*Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Buyadzhi V.V., Mykhailov O.L. Hyperfine and Electroweak Interaction in Heavy Finite Fermi-Systems and Parity Non-conservation Effect. In: Mammino L., Ceresoli D., Maruani J., Brändas E. (eds) Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology. Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2020, Vol.32, P.65-81.
3. Buyadzhi V.V. Relativistic energy approach and many-body perturbation theory to computing electron-collision cross-sections of complex multielectron ions Photoelectronics. 2020. Vol.29. P.102-109.
4. \*Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V. Advanced Quantum-Kinetic Model of Energy Exchange in Atmospheric Molecule Mixtures and CO<sub>2</sub> Laser-Molecule Interaction. In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Ser.: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 223-234.
5. Chernyshev A.S., Efimova E.A., Buyadzhi V.V., Nikola L.V. Cascade of Auger transitions in spectrum of xenon: Theoretical data. Photoelectronics. 2020. Vol.29. P.94-101

6. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Chernyshev A.S., Efimova E.A., Tsudik A.V. Theoretical Auger spectroscopy of solids: sensing energy parameters *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2020. Vol.17. N1. P.21-28.
7. \*Buyadzhi V.V., Kuznetsova A.A., Buyadzhi A.A., Ternovsky E.V., Tkach T.B. Advanced Quantum Approach in Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas. *Advances in Quantum Chemistry (Elsevier)*.- 2019.-Vol.78.- P.171-191; [Scopus]  
<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.002> [Scopus]
8. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Mykhailov O.L., Khetselius O.Yu. Determination of radiation decay parameters for heavy complex atomic systems. *Sensor Electronics and Microsystem Techn.* 2019. Vol.16. N3. P.59-68.
9. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Stepanenko S.N., Svinarenko A.A., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V. Sensing and analysis of radioactive radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration chaotic variability in an atmosphere environment *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2019. Vol.16. N4. P.27-36.
10. Efimova E.A., Chernyshev A.S., Buyadzhi V.V., Nikola L.V. Theoretical Auger spectroscopy of the neon: transition energies and widths. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.24-31.
11. Buyadzhi V.V. Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions: advanced energy approach. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.62-67.
12. Буюджи В.В., Глушков О.В. Спектроскопія за рахунок зіткнень електрон- і іон-атомних систем: Енергетичний підхід. Одеса: Гельветика, 2020, 210С.
13. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Atoms in a laser field and laser separation of the radioactive isotopes. Odessa: TES, 2018.-152P.
14. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Tsudik A.V., Zaichko P.A. Relativistic approach to calculation of ionization characteristics for rydberg alkali atom in a black-body radiation field. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2019. Vol.16. N3. P.69-77.
15. \* Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Chernyakova Y.G., Tkach T.B., Buyadzhi A., Zaichko P.A. Advanced computational approach in electron-collisional spectroscopy of atoms and multicharged ions in plasmas. *Journal of Physics: C. Series (IOP, London)*. 2018. Vol.1136. P.012011. [Scopus]
16. \*Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Svinarenko A.A., Ternovsky E.V. Advanced relativistic energy approach in electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in plasma. In: *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Eds. Yan A. Wang, Mark Thachuk, Roman Krems, Jean Maruani (Springer). 2018. Vol.31. P.55-69.
17. Buyadzhi V.V., Tkach T.B., Lavrenko A.P., Romanenko E.S. Spectroscopy of multicharged ions in plasmas: oscillator strengths of Be-like ions GaXXVIII and GeXXIX. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.24-29.
18. Glushkov A.V., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Ignatenko A. V., Kuznetsova A. A., Mashkantsev A. A chaos-dynamical approach to analysis,

- processing and forecasting measurements data of the chaotic quantum and laser systems and sensors. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2018. Vol.15,N4. P.41-49.
19. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B. New Generalized Chaos-Geometric and Neural Networks Approach to Nonlinear Dynamics of the Complex Systems. *Int. Robotics & Automation Journ.* 2018. Vol. 4. P.167-169
  20. Ternovsky E.V., Buyadzhi V.V., Tsudik A.V., Svinarenko A.A. Relativistic calculation of Rydberg autoionization states parameters in spectrum of barium. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.34-43.
  21. Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V. Chaos and strange attractors in environmental radioactivity dynamics of some geosystems: Atmospheric radon  $^{222}\text{Rn}$ . *Dynamical Systems Theory* Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J, Mrozowski (Lodz, Polland).-2017. P.BIF323 (10P.)
  22. Buyadzhi V.V., Belodonov A.S., Mironenko D., Mashkantsev A.A., Kir'yanov S.A., Buyadzhi A.A., Glushkov A.V. Nonlinear dynamics of external cavity semiconductor laser system with elements of a chaos. *Dynamical Systems Theory* Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J, Mrozowski (Lodz, Polland). 2017. P.BIF325 (9P.).
  23. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Gurskaya M., Khetselius O., Ternovsky E.V., Mashkantsev A.A., Kirianov S.V. A novel combined chaos-geometric and vibration blind source monitoring approach to damage analysis and detection of engineering structures (nuclear reactors) under varying environmental, operational conditions and emergency accidents// *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* 2017. Vol.17, N4.-P.60-72.
  24. \*Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B. and Mansarliysky V.F. Computing of radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced Code. *Journal of Physics: C. Series*. 2017. Vol.905. P. 012003. [doi:10.1088/1742-6596/905/1/012003](https://doi.org/10.1088/1742-6596/905/1/012003)\*[Scopus]
  25. Buyadzhi V.V., Chernyakova Yu.G., Antoshkina O.A., Tkach T.B. Spectroscopy of multicharged ions in plasmas: Oscillator strengths of Be-like ion Fe. *Photoelectronics*. 2017. Vol.26. P.94-102.
  26. \*Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuznetsova A.A., Buyadzhi A.A., Prepelitsa G.P. and Ternovsky V.B. Nonlinear dynamics of laser systems with elements of a chaos: Advanced computational code. *Journal of Physics: C. Series* (IOP, London). 2017. Vol.905. P. 012007. [doi:10.1088/1742-6596/905/1/012007](https://doi.org/10.1088/1742-6596/905/1/012007)\* [Scopus]
  27. \*Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Y.Y., Florco T. et al. An effective chaos-geometric computational approach to analysis and prediction of evolutionary dynamics of the environmental systems. *Journal of Physics: Conf. Series* (IOP, London, UK).-2017.-Vol.905.-P. 012036\*. [Scopus]
  28. Glushkov A.V., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Khetselius O.Yu. New approach and microsystem

- technology of advanced non-linear analysis and modelling chaotic environmental radioactivity dynamics. *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* 2017. Vol.17, N3. P.24-37.
29. \*Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Smirnov A.V., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Florko T.A., Mansarliysky V.F. (2017) Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Hyperfine Structure and Oscillator Strength Parameters for Some Heavy Element Atoms and Ions. In: Tadjer A, Pavlov R, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G (eds) *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol 30. Springer, Cham, pp 271-281
  30. Smirnov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Belodonov A.S. Advanced relativistic approach in spectroscopy of complex autoionization resonances in atomic spectra. *Photoelectronics.*-2017.-Vol.26.-P.114-123.
  31. \*Glushkov A., Khetselius O., Svinarenko A., Buyadzhi V., Ternovsky V., Kuznetsova A., Bashkarev P. Relativistic perturbation theory formalism to computing spectra and radiation characteristics: Application to heavy elements. In: *Recent Studies in Perturbation Theory*, Ed. D. Uzunov (InTech, EU).-2017.-P.131-150.
  32. \*Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Buyadzhi V.V. Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonances. In: *Rare-Earth Element*, Ed. Jose Edgar Alfonso Orjuela (Intech, EU).-2017.-P.83-104
  33. Khetselius O.Yu., Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Bunyakova Yu.Ya. New nonlinear chaos-dynamical analysis of atmospheric radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration time series from beta particles activity data of radon monitors// *Photoelectronics.* 2017. Vol.26. P.29-40.
  34. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Geometry of Chaos: Advanced computational approach to treating chaotic dynamics of environmental radioactivity systems II. *Proc.of Intern. Geometry Center.* 2016. Vol.9,N1. P.4-9. [Scopus]
  35. Buyadzhi V.V., Chernyakova Yu.G., Smirnov A.V., Tkach T.B. Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions in plasma: Be-like ions. *Photoelectronics.* 2016. Vol.25. P.97-101
  36. Serga I.N., Kulakli T.A., Smirnov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Relativistic theory of spectra of usual and exotic atoms: nitrogen hyperfine transitions energies. *Photoelectronics .*-2016.-Vol.25.-P.34-39
  37. Глушков А.В., Хецеліус О.Ю., Свинаренко А.А., Буюджи В.В. Спектроскопія автоіонізаційних станів важких атомів і багатозарядних іонів: Чисельні моделі. ТЕС, Odessa, 2016.

**Матеріали і тези доповідей на міжнародних конгресах, конференціях, школах**

38. Buyadzhi V. Electron-Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas: Relativistic Energy Approach. Abs. of the 24 International Workshop

- “Quan-tum Systems in Chemistry, Physics and Biology QSCP –XXIV” (OSEN, Odessa) Ukraine. 2019. P.62
39. Buyadzhi V.V., Svinarenko A., Glushkov A., Plysetska Ye. Atomic ensemble in a laser pulse of the nonrectangular shape: Optical bi-stability, resonant, noise and chaos effects. Abs. of the 31st Int Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. (FR-064) P.485.
  40. Buyadzhi V. Electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in Debye plasmas: Relativistic energy approach. Abs. of the 31st Int Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. (TU-131) P.916.
  41. Buyadzhi V.V., Buyadzhi A., Chernyshev A., Plisetskaya E., Pavlov E., Kir’yanov S. Nonlinear dynamics of laser systems: Chaos, bifurcations and strange attractors". Abs. of the 15th International Conference "Dynamical Systems - Theory and Applications" (Lodz University; Lodz, Poland). 2019. (BIF271)
  42. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Chernyakova Yu., Svinarenko A.A., Bogdanova D. Electron-collisional spectroscopy of atoms and ions in plasma. Abs. of the III Internat.Conf."Quantum Systems in Physics and Mathenatics". (OSEN, Odessa). Ukraine. 2019. P.
  43. Buyadzhi V.V. Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions: Advanced Relativistic Approach. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum SystemsIn Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII). Kruger Park (South Africa). 2018. P.47.
  44. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T., Buyadzhi A.A., Chernyakova Y.G. Multi-photon Spectroscopy of Many-electron Atoms and Ions in the Debye Plasmas. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum SystemsIn Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII). Kruger Park (South Africa). 2018. P.48.
  45. Buyadzhi V. An advanced relativistic energy approach in electron-collisional spectroscopy of multicharged ions in plasmas. Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics. Davis (USA). 2018. P.P31.
  46. Buyadzhi V.V. Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions: Advanced Quantum Approach. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS). Dublin (Ireland). 2018. P.100 (Tu.P.22).
  47. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T.B., Chernyakova Y.G. Multi-photon Spectroscopy of Many-electron Atoms and Ions in the Debye Plasmas. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS). Dublin (Ireland). 2018. P. 127 (We.P.22).
  48. Buyadzhi V. Electron-Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in plasmas: Relativistic Energy Approach. Abs. of the 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems. Torun (Poland). 2018. P.94(A33).
  49. Buyadzhi V., Ternovsky E., Glushkov A., Khetselius O. Multi-photon spectroscopy of the many-electron atoms and ions in a laser field with

- accounting for the Debye plasma effects. Abs. of 26<sup>th</sup> Int. Conference on Atomic Physics, (ICAP 2018). Barcelona (Spain). 2018. P.344.
50. Khetselius O., Glushkov A., Ternovsky E., Buyadzhi V. Laser Electron-Gamma-Nuclear Spectroscopy of Atoms and Multicharged Ions: Shake-Up and NEET Effects. Abs. of 26<sup>th</sup> Int. Conference on Atomic Physics, (ICAP 2018).- Barcelona (Spain). 2018. P.346.
  51. Buyadzhi V.V., Antoshkina O.A., Ternovsky E.V., Kulakli T.A. Advanced relativistic model potential approach to computing the radiation transition characteristics for atoms and multicharged ions. Abs. of the 29thIUPAP Conference on Computational Physics. Paris (France). 2017. P.207.
  52. Buyadzhi V.V., Ternovsky E.V., Tkach T.B. Advanced computational approach in electron-collisional spectroscopy of atoms and multicharged ions in plasmas. Abs. of the 29thIUPAP Conference on Computational Physics. Paris (France). 2017. P.208.
  53. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Dubrovskaya Y.V., Khetselius O.Yu. New electron-  $\beta$ -nuclear spectroscopy of molecules and chemical bond effect on the  $\beta$ -decay parameters. Abs. of 11<sup>th</sup> Congress of the World Association of Theor. and Computational Chem. (Munich, Germany). 2017. P. PO3-255.
  54. Buyadzhi V.V. Multi-Photon Dynamics and Spectroscopy of the Many-Electron Atomic Systems in the Debye Plasma in presence of a Intense Laser Field. Abs. of the XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology. Vancouver, BC, Canada. 2016.
  55. Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Smirnov A.V., Mansarliysky V.F., Relativistic density functional theory with accounting for nuclear and radiation corrections for heavy atomic (nuclear) systems. Abs. of the XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology. Vancouver, BC, Canada. 2016.
  56. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Buyadzhi V.V. Quantum Geometry: An effective approach to quantization of quasi-stationary states for bispinor Dirac equation and photon propagator gauge problem// Abstr.of International Conference “Geometry in Odessa-2016”. Odessa (Ukraine). 2016. P.20.
  57. Buyadzhi V.V., Khetselius O.Yu., Florko T.A., Ignatenko A.V. Excitation rates for nuclear isomers in hot plasma and photon- plasmon transitions in positronium. Abs. of the International Nuclear Physics Conference. Adelaide (Australia). 2016. P.ID465.
  58. Buyadzhi V., Khetselius O., Glushkov A., Antoshkina O., Kulakli T. Advanced relativistic model potential approach to computing the radiation transition and autoionization characteristics for atoms and multicharged ions. Abs. of 23<sup>rd</sup> International Conference on Spectral Line Shapes. Torun (Polland). 2016. P.159.
  59. Buyadzhi V.V., Smirnov A.V., Antoshkina O.A., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A. Spectroscopy of excited and autoionization states in spectra of multicharged ions: He-like ions. Abs. of 8<sup>th</sup> Int. Conf. on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016). Kielce (Polland). 2016. P.86 (PA20).

60. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Zaichko P.A., Antoshkina O.A., Kulakli T.A. Computing radiation parameters for atoms and multicharged ions within relativistic energy approach: Advanced code. Abs. of the 28th IUPAP Conference on Computational Physics. Gauteng (South Africa). 2016. P.5 (ID-110).
61. Buyadzhi V.V. Multi-photon spectroscopy of the many-electron atoms and ions of the Debye plasma a laser field. Abs. of the 23rd International Conference on Spectral Line Shapes. Torun (Poland). 2016. P.157

## АНОТАЦІЇ

**Буяджи В.В.** Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон- та іон-атомних системах: Енергетичний підхід.— Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – «Оптика, лазерна фізика» (104 – Фізика і астрономія).— Одеський державний екологічний університет МОН України, Одеса, 2021.

Дисертація присвячена розвитку нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці і спектроскопії, зокрема, релятивістської спектроскопії за рахунок зіткнень електрон- та іон-атомних систем. Вперше розвинутий новий релятивістський підхід до обчислення енергетичних та спектроскопічних характеристик процесів електрон-атом-іонних зіткнень (у т.ч. перерізів, сил електрон-іонних зіткнень, швидкостей процесів зіткнень, діелектронного захоплення, автоіонізаційного розпаду, а також радіаційного розпаду, сил осциляторів тощо) для атомів та багатозарядних іонів з урахуванням впливу плазмового середовища в широкому інтервалі параметрів атомів і іонів (мішеней) і налітаючого електрона (включаючи випадок повільних зіткнень), який базується на енергетичному підході, S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу та релятивістській багаточастинковій теорії збурень (РБЧТЗ) з дірак-кон-шемівським (ДКШ) та дебай-хюккелівським «0» наближенням з використанням послідовної калібрувально-інваріантної процедури генерації базисів електронних хвильових функцій. Вперше адаптовані нові в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень з урахуванням впливу плазмового середовища процедури ефективного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. Вперше з спектроскопічною точністю виконані обчислення енергій та імовірностей радіаційних переходів, сила осциляторів, перерізів збуджень для Ве-подібних та фтор- подібних іонів із зарядом атомного ядра  $Z=6-36$ , зокрема, перерізів збудження за рахунок зіткнень переходів  $[2s^2 \ ^1S - (2s2p \ ^1P)]$ ,  $[(2s2p \ ^3P^0) - (2s2p \ ^1P^0)]$ ,  $[(2s2p \ ^3P^0) - (2s2p \ ^1P^0)]$ ,  $[2s2p \ ^3P^0 - (2p^2 \ ^3P)]$  з урахуванням ефектів впливу плазмового середовища і проведено детальне порівняння отриманих даних з аналогічними даними на основі обчислень в межах методу багатоконфігураційного наближення Дірака-Фока, 3-конфігураційного R-матричного розрахунку Vannister et al і експериментальними даними (1999).



Показано, що при енергії нижчій ніж деяке  $E_0$  (напр.,  $E_0=20$  еВ для Ве-подібного кисню) спостерігається розумна узгодженість теоретичних даних з експериментальними, однак, коли енергії вище  $E_0$  має місце розбіжність наших даних і альтернативної R-матричної теорії. Представлені дані обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-кон-шемівським та дебай-хюккелівським наближенням енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів E1, E2, M1, M2 переходів між рівнями конфігурацій  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  і  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  в спектрах Ne-подібних іонів з  $Z \sim 20-83$ , спектральних характеристик Na-подібних спектрів – сателітів  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$  ( $J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ ) до 2-3 переходів в Ne-подібних іонах з  $Z=17-26$ , у тому числі Na-подібних іонів CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII. На основі обчислень в межах нового релятивістського енергетичного формалізму та РБЧТЗ з ДКШ та дебай-хюккелівським «0» наближенням отримані дані щодо диференціальних і інтегральних перерізів збудження в стани  $2p^5 3s$  конфігурації ( $2p^5 3s[3/2]_2^0, 2p^5 3s[1/2]_0^0, 2p^5 3s[1/2]_1^0, 2p^5 3s[3/2]_1^0$ ) нейтрального атома неону при енергії налітаючого електрона  $E_i = 10-120$  еВ, до речі в інтервалі, де звичайне борнівське наближення не працює; проведено порівняння з наявними даними експерименту і теоретичними даними, отриманими на основі обчислень в межах наближення перекручених хвиль з урахуванням конфігураційної взаємодії (CI-DWBA), наближення перекручених хвиль з використанням ХФ базису (HF-DWBA), методу ТЗ з урахуванням поправки першого порядку (UFOMBT) та ін. Показано, що дані наших обчислень, а також обчислень R-матричним методом є значно точнішими і істотно краще описують експериментальні дані, у порівнянні з даними обчислень на основі методів типу UFOMBT, DWBA, RDWA. Представлені нові дані щодо спектрів, сил осциляторів E1 переходів і перерізів збудження електронним ударом станів для конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$  Ne-подібного іона  $Kr^{26+}$  з основного стану (енергія налітаючого електрона 4.082 кеВ та 6.80 кеВ; інтервал температур  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7$  К та електронна густина (аналогічно густині у плазмі токамака)  $n_e=10^{14}$  см<sup>-3</sup>). Виконано детальне дослідження Ne-подібного іона  $Ar^{8+}$  і розраховані енергії рівнів, сили осциляторів, сили електронних зіткнень (плазма  $\theta$ -пінча:  $n_e=10^{16}$  см<sup>-3</sup>,  $T_e=65$ еВ) для збудження з основного стану іона Ar ( $E_0 = 0.425, 0.5, 0.750, 1.045$  кеВ) спектроскопії за рахунок зіткнень і проведено порівняння з альтернативними результатами розрахунку. Приведені набори даних для швидкісних характеристик збудження, іонізації, радіаційного розпаду для групи станів Ne-подібного аргону, які відповідають переходам між рідбергівськими рівнями і з рідбергівських рівнів в стани континууму при електронній температурі  $T_e = 40, 60$  еВ і плазмових параметрах  $n_e=10^{19-20}$  см<sup>-3</sup>. Вперше розроблена нова версія релятивістського енергетичного формалізму до визначення перерізів та сил зіткнень для електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання і виконана оцінка багатофотонних диференціальних перерізів ( $e, 2e$ ) реакції для нейтрального атома неону при параметрах електрон-атомних зіткнень системи і поля:

$\varepsilon_0=2\cdot 10^8$ В/см,  $\hbar\omega=1.17$ еВ,  $E_i=100$ еВ. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем в зовнішньому електромагнітному полі в наближенні низької частоти для (e,2e) реакції іонізації нейтрального атома Ne електронним ударом передбачені нові фізичні ефекти радикально різної поведінки перерізів реакцій типу (e,2e) за умов паралельності і перпендикулярності вектору поляризації лазерного випромінювання і хвильового вектору налітаючого електрона.

**Ключові слова:** релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень, електрон-іон-атомні системи, енергетичний формалізм, релятивістська теорія збурень, енергетичні та спектральні характеристики, переріз збудження, сили зіткнень, сили осциляторів, релятивістські обмінно-поляризаційні ефекти.

**Buyadzhi V.V.** Relativistic spectroscopy due to collisions in electron- and ion-atomic systems: Energy approach.— Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Science in Physics and Mathematics in speciality 01.04.05 – optics and laser physics. – Odessa State Environmental University of Ministry of Education & Science of Ukraine, Odessa, 2021.

The dissertation is devoted to the development of a new scientific direction in theoretical atomic optics and spectroscopy, in particular, relativistic spectroscopy due to collisions of electron and ion atomic systems. For the first time a new relativistic approach to the calculation of energy and spectroscopic characteristics of electron-atom-ion collision processes (including cross sections, electron-ion collision forces, velocities of collision processes, dielectronic capture, autoionization decay, and radiation) was developed. decay, oscillator forces, etc.) for atoms and multicharged ions, taking into account the influence of the plasma medium in a wide range of parameters of atoms and ions (targets) and the incident electron (including the case of slow collisions), which is based on the energy approach, S- matrix formalism of Gell-Mann and Low and relativistic multiparticle perturbation theory with Dirac-Kohn-Sham (DKS) and Debye-Hückel zeroth approximation using a sequential calibration-invariant procedure for generating bases of electronic wave functions. For the first time, new procedures in the relativistic theory of electron-ion collisions have been adapted, taking into account the influence of the plasma environment, the effective consideration of multiparticle exchange-correlation effects. For the first time with spectroscopic accuracy the calculations of energies and probabilities of radiation transitions, power of oscillators, excitation cross sections for Be-like and fluorine-like ions with atomic nucleus charge  $Z = 6-36$  were performed, in particular, cross-sections of excitation due to collisions of transitions  $[2s^2\ ^1S - (2s2p\ ^1P)]$ ,  $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$ ,  $[(2s2p\ ^3P^0) - (2s2p\ ^1P^0)]$ ,  $[2s2p\ ^3P^0 - (2p^2\ ^3P)]$  taking into account the effects of the plasma environment and a detailed comparison of the obtained data with similar data based on calculations within the method of multi-configuration Dirac-Fock approximation, 3-configuration R-matrix calculation Bannister et al and experimental data (1999). It is shown that at energies lower than some  $E_0$  (e.g.,  $E_0 = 20$  eV for Be-like oxygen) there is a reasonable consistency of theoretical data with experimental ones, however, when the energy is

higher than E0, there is a discrepancy between our data and the alternative R -matrix theory. The data of calculations on the basis of relativistic multiparticle perturbation theory with optimized zero Dirac-Kohn-Sham and Debye-Hückel zeroth approximation of energies and probabilities of radiation transitions, oscillator strengths of the E1, E2, M1, M2 transitions between configuration levels  $2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  i  $2s 2p^6 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$  in spectra of Ne-like with  $Z \sim 20-83$ , spectral characteristics of Na-like spectra-satellites  $2p^5 3l_1 3l_2 - 2p^6 3l_1$  ( $J=1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ ) to 2-3 transitions in Ne-like with  $Z=17-26$ , including Na-like ions CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII, are presented. On the basis of calculations within relativistic multiparticle perturbation theory with Dirac-Kohn-Shem (DKS) and Debye-Hückel zeroth approximation there are listed data on differential and integral cross-sections of excitation of the states to the states of configurations  $2p^5 3s$ : ( $2p^5 3s[3/2]_2^0$ ,  $2p^5 3s[1/2]_0^0$ ,  $2p^5 3s[1/2]_1^0$ ,  $2p^5 3s[3/2]_1^0$ ) a neutral neon atom at the energy of the incident electron  $E_i = 10-120$  eV, by the way in the interval where the usual Born approximation does not work; There is performed a comparison with the available experimental data and theoretical data obtained on the basis of calculations within the approximation of distorted waves taking into account the configuration interaction (CI-DWBA), the approximation of distorted waves using HF basis (HF-DWBA), the perturbation theory method taking into account the first correction order (UFOMBT) and others. It is shown that the data of our calculations, as well as calculations by the R-matrix method are much more accurate and significantly better describe the experimental data, especially in comparison with the data of calculations based on methods such as UFOMBT, DWBA, RDWA. New data on the spectra, oscillators strengths for E1 transitions and excitation cross-sections of electron impact states for configurations  $1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d$  Ne-like  $Kr^{26+}$  ion from the ground state (energy of the incident electron 4.082 keV and 6.80 keV; temperature range  $T=5 \times 10^6 - 3 \times 10^7$  K and electron density (similar to the density in tokamak plasma)  $n_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ). A detailed study of spectroscopy due to collisions of the Ne-shaped Ar8 + ion was performed and the calculated energies of levels, oscillator forces, electron collision strengths ( $\theta$ -pinch plasmas:  $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_e = 65$  eV) for excitation from the ground state of the ion were performed. Ar ( $E_0 = 0.425, 0.5, 0.750, 1.045$  keV) and a comparison with alternative calculation results. Data sets for velocity characteristics of excitation, ionization, radiation decay for a group of states of Ne-shaped argon, which correspond to transitions between Rydberg levels and from Rydberg levels in continuum states at plasma parameters  $n_e = 10^{19-20} \text{ cm}^{-3}$  and electron temperature,  $T_e = 40, 60$  eV are presented. For the first time a new version of relativistic energy formalism was developed to determine the cross sections and forces of collisions for electron-ion systems in the external field of laser radiation and the estimation of multiphoton differential cross sections (e, 2e) of the reaction for neutral neon atom at the parameters of electron-atom collisions of the system and the field:  $\varepsilon_0 = 2 \cdot 10^8$  V/cm,  $\hbar\omega = 1.17$  eV,  $E_i = 100$  eV. For the first time in theoretical spectroscopy due to collisions for electron-ion systems in an external electromagnetic field in the low frequency approximation for the (e, 2e) ionization reaction of the neutral atom Ne electron

impact there are opened new physical effects of radically different behavior of cross sections 2e) under conditions of parallelism and perpendicularity of the polarization vector of the laser radiation and the wave vector of the incident electron.

**Keywords:** relativistic collision spectroscopy, electron-ion-atomic systems, energy formalism, relativistic perturbation theory, energy and spectral characteristics, excitation cross section, collision forces, oscillator forces, relativistic exchange-polarization effects.