

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



**Терновський Валентин Борисович**

**УДК 539.184: 539.192**

**РЕЛЯТИВІСТСЬКА СПЕКТРОСКОПІЯ ВАЖКИХ АТОМІВ  
З УРАХУВАННЯМ ОБМІННО-КОРЕЛЯЦІЙНИХ ТА  
РАДІАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ**

**01.04.05 – оптика, лазерна фізика**

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

**ОДЕСА – 2021**

Дисертацією є рукопис.

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

**Науковий консультант:** доктор фізико-математичних наук, професор Глушков Олександр Васильович, завідувач кафедри вищої і прикладної математики, директор Міжнародного центру квантових систем у фізиці, хімії і біології Одеського державного екологічного університету

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук, професор Кондратенко Петро Олексійович, професор кафедри загальної та прикладної фізики Національного авіаційного університету (м. Київ), Заслужений діяч науки і техніки України

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

доктор фізико-математичних наук, професор Усов Валентин Валентинович, професор кафедри технологічної та професійної освіти Південноукраїнського національного педагогічного університету ім. К.Д. Ушинського

Захист відбудеться “24” 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 “23” серпня 2021 р.

В.о. ученого секретаря  
спеціалізованої вченої ради Д 41.090.03,  
доктор фізико-математичних наук, професор



О.Ю. Хецеліус

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Дослідження енергетичних, радіаційних, спектроскопічних, взагалі структурних властивостей важких нейтральних і сильно іонізованих атомів (так званих багатозарядних іонів) має принципове фундаментальне значення в багатьох областях атомної фізики (теорія атомних спектрів, спектроскопія, теорія спектральних ліній), астрофізики, фізики плазми, фізики лазерів тощо. Розвиток нових напрямків в галузі атомної оптики і спектроскопії, лазерної фізики та квантової електроніки, таких як прецизійна спектроскопія важких і надважких атомів і багатозарядних іонів, новітні астрофізичні дослідження, імпульсні методи нагріву в експериментах з керованого термоядерного синтезу, створення принципово нових схем лазерів в ВУФ, а також подальше вдосконалення та розвиток нових експериментальних технологій, у тому числі з використанням нових лазерних технологій, прискорювачів й т.і., обумовлює загальну потребу вирішення актуальних і важливих завдань атомної оптики і лазерної фізики на принципово новому релятивістському рівні теоретичної послідовності і точності.

В останнє десятиліття активно розвивається релятивістська теоретична спектроскопія важких як звичайних, так й екзотичних атомних систем, так званих релятивістських багатоелектронних та адронних атомів, а також важких багатозарядних іонів, яка охоплює ультрафіолетовий і рентгенівський діапазони спектра. Загальновідомо, що вивчення структури спектральних ліній таких атомних систем представляє великий інтерес для подальшого розвитку, як безпосередньо атомної та ядерної теорій, так й теорії фундаментальних взаємодій, у тому числі електрослабкої та сильної. Експерименти щодо визначення властивостей розщеплення спектральних ліній, зокрема, вивчення характеристик надтонкої структури, дозволяють уточнити величини ядерних магнітних моментів різних ізотопів і перевірити точність різних обчислювальних моделей, що використовуються для теоретичного опису атомних ядер у важких системах.

Ключову роль тут відіграє революційний прогрес, досягнутий у розвитку сучасних експериментальних методів дослідження спектрів атомів та іонів, зокрема, використання прискорювачів, колайдерів важких іонів, нових інтенсивних джерел синхротронного випромінювання, застосування нових методів лазерної спектроскопії з різким збільшенням інтенсивності та якості лазерного випромінювання, beam-foil спектроскопія і багато інших.

Очевидно, що фундаментальна прецизійна теорія, що претендує на опис зі спектроскопічною точністю енергетичних і спектральних параметрів важких і надважких атомів та іонів (у т.ч. рівнів енергії, сил осциляторів, параметрів надтонкої структури (НТС) і т.д.), повинна адекватно враховувати весь набір релятивістських, радіаційних (зокрема, власно-енергетичний внесок лембівського зсуву та внесок за рахунок поляризації вакууму, включаючи КЕД поправки вищих порядків квантово-електродинамічної (КЕД) теорії збурень (ТЗ), а також двохпетльові поправки Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ ), ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядра, ефекти Bohr-Weisskopf и

Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.), складних обмінно-кореляційних поправок (включаючи поправки в наближенні випадкових фаз, поляризацію остову, екрануючі ефекти, поправки Бракнера, тиск континууму тощо). При цьому більшість стандартних методів теорії, незважаючи на відомий прогрес в їх розвитку, не здатні забезпечити одночасний прецизійний опис всіх перерахованих груп ефектів і поправок. Дійсно, незважаючи на вжиті в останні три десятиліття численні спроби розвитку прецизійних методів опису спектрів важких атомних систем (метод мега-Dirac-Fock (ДФ=DF), R-матричний метод, relativistic coupled-cluster method, різні версії ТЗ і т.д.; пакети: “SUPERSTRUCTURE”, “Dirac”-package, “Beta-package”, “QED”, “GRASP”, “BERTHA” та ін.), залишається невіршеним цілий комплекс проблем одночасного високоточного врахування вище згаданих ефектів. Більш того, відсутня інформація про досить велику кількість особливо важких та надважких атомів (а також відповідних багатозарядних іонів) періодичної таблиці Менделєєва, причому особливо кризового характеру набула ситуація, пов’язана з вивченням характеристик надважких елементів по причині відсутності будь-яких надійних даних. Подібний комплекс складних теоретичних проблем спостерігається й в релятивістській спектроскопії важких адронних (зокрема, каонних) багатоелектронних атомів, для більшості з яких в літературі не приводяться надійні спектроскопічні дані.

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

**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**, 2016-2020рр.), “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, 2015-2017рр.), “Комплекс нових стохастично-гідродинамічних та атомно-діагностичних моделей моніторингу антропогенного забруднення атмосфери промислових міст та “Green City” технологія” (№ держр. 0117U000622, 2017-2019рр.).

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

Для досягнення мети дослідження були сформульовані такі завдання:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

**Об'єкт дослідження** - важкі звичайні та екзотичні атомні системи, теоретична атомна оптика та спектроскопія багатоелектронних атомів та іонів.

**Предмет дослідження** - релятивістська спектроскопія важких атомів з урахуванням обмінно-кореляційних та радіаційних ефектів

**Методи дослідження**: стандартні та нові (розроблені автором) методи квантової механіки і квантової електродинаміки атомів та іонів, релятивістської квантової теорії поля, обчислювальні методи в задачах моделювання спектрів, енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик атомних систем

(розв'язання систем інтегро-диференціальних рівнянь, у т.ч. рівнянь Дірака, Клейна-Гордона-Фока, метод Рунге-Кутта) тощо.

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

i). Вперше розроблено новий ефективний метод комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням для послідовного опису енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних та каонних атомних систем з послідовним, максимально прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів (включаючи ефекти Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також Bohr-Weisskopf) та радіаційних КЕД поправок (в т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ, зокрема, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  тощо).

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

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

iv). Удосконалено послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризацію вакууму

тощо на основі формалізму релятивістської ТЗ РМВРТ з оптимізованим наближенням ODF з використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges.

v). Встановлено, що у порівнянні зі стандартними неоптимізованими релятивістськими методами Хартрі-Фока (HF) та Дірака-Фока (DF) новий підхід дозволяє отримати більш точні дані як по енергіях так й амплітудам та ймовірностям радіаційних переходів, що підтверджується аналізом отриманих даних для енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ , E2 переходу  $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі Hg<sup>+</sup>, енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$ , (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) важкого атому свинцю Pb, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p^8P_{9/2,7,2}$  атому європію Eu I. Показано, що переваги нового підходу обумовлені використанням оптимізованого нульового наближення ODF, досить повним ефективним урахуванням складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. Виявлено, що внесок за рахунок поляризації остову досягає 30% від значення сили осцилятора; величина калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційну ширину складає долі проценту на відміну від усіх існуючих методів сучасної атомної спектроскопії, для яких внесок досягає 5-50%. З метою отримання нової інформації для надважкого елемента ніхонія  $^{278}_{113}Nh$  вперше виконаний розрахунок спектру низько розташованих рівнів з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних та обмінно-кореляційних поправок.

vi). Отримано нові дані для енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема, конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ ; енергії і сили осциляторів переходів  $6s^2 6p^2 P_{1/2}-6s^2 nd^2 D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^2 6p^2 P_{1/2}-6s^2 ns^2 S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ), енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  Yb, сил осциляторів переходів  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2 np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2 nf[5/2]_2$ , причому для деяких рідбергівських резонансів вперше передбачені значення їх енергій та ширин. В роботі вперше показано, що ключовими факторами, які забезпечують адекватну точність опису спектроскопічних характеристик ітербію Yb, є одночасне прецизійне врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, а також - використання оптимізованих базисів орбіталей.

vii). Вперше із спектроскопічною точністю виявлено унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії ітербію Yb і тулію Tm, пов'язані з аномально малими ширинами автоіонізаційних та рідбергівських резонансів, *й які можна розглядати як відкриття елементів нової нелінійної некулонівської фізики важких атомних систем*. Отримано нові прецизійні дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1} 6s_{1/2}(J') n_R 1_{R, J_R}[J]$  ( $j, J', j_R, J$ ) = 1/2-5/2 атому тулію Tm



для енергій та ширин збуджених, автоіонізаційних станів  $Tm\ 4f^{-1}_j\ 6s(J12)nsnp[J]$  з квантовим числом  $n=25-50$ , зокрема, наведені значення енергій, ширин автоіонізаційних станів  $4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2}6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)np_j[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_{5/2}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (розпад яких проходить, як по стандартному каналу Бейтлера-Фано (BFD), так й новому для атомної спектроскопії каналу реорієнтаційного типу ROD, або по обидва каналам одночасно). В цілому узагальнено нову інформацію щодо важких атомів типу лантаноїдів та актиноїдів, урану, трансуранових елементів тощо.

viii). Вперше отримано прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня  $32899.790\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5880-5890)\text{ Å}$ ), нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137)\text{ Å}$ ), рівня  $32857.449\text{ см}^{-1}$  ( $5f36d7s8s\ ^7L_5^0$ ) (послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914)\text{ Å}$ ), а також рівня  $33083.3\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951)\text{ Å}$ ). На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість значень енергії в серіях встановлено, що наведена у літературі фактично єдина інформація по вказаним вище рідбергівським серіям  $^{92}\text{U}$  (дані групи Solarz et al. [Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory, University of California]) містить певні неточності, пов'язані із вкрай високою складністю шуканих рідбергівських серій.

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

x). Виконано нові обчислення енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також відповідно ймовірностей вказаних радіаційних переходів, енергії рідбергівських переходів в спектрі важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану  $^{238}\text{U}$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії. Проведено порівняння експериментальних та альтернативних теоретичних даних (зокрема, отриманих на основі каскадної моделі Fermi-Teller з використанням коду Leon-Seki, послідовних теоретичних Klein-Gordon-Fock методів Indelicato et al., Batty et al., Khetselius et al.), яке вказує на достатньо високу ефективність розвинутого нового релятивістського підходу в теорії важких каонних систем та на необхідність прецизійного ураху-

вання перелічених вище груп поправок для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією й дуже складним експериментом..

хі). Вперше в межах прецизійної кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем розвинуто новий релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких систем, який базується на основі нового формалізму калібрувально-інваріантної МВРТ з оптимізованим дірак-фоківським наближенням ODF. На прикладі серії дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів, а саме – дані для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  вперше розглянуто зв'язок між хімічним оточенням атома та характеристиками (інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду) дозволених  $\beta$ -переходів; встановлено, що при переході від визначення  $F(E, Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $F(E, Z)$ , що обчислюється за амплітудами при нулі, функція  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0 = 167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0 = 65,8$  кеВ) – на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0 = 140,7$  кеВ) – 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0 = 20,8$  кеВ) – на 32%.

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

**Практичне значення отриманих результатів.** Розвинута в роботі релятивістська теоретична прецизійна спектроскопія важких звичайних багатоелектронних, а також екзотичних адронних (каонних) систем забезпечує отримання наборів фундаментальних енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем, знання яких має вирішальне теоретичне й практичне значення для величезної кількості сучасних задач, зокрема, атомної і молекулярної оптики та спектроскопії, астрофізики, фізики термоядерної, астрофізичної, лабораторної плазми, токамака ( $\theta$ -пінча, капілярного розряду), плазмохімії, лазерної фізики і квантової електроніки, розробки нових ефективних схем генерації, включаючи створення разерів, гразерів, а також суміжних галузей фізики, а саме фізики ядра, елементарних частинок, високих енергій, фізики прискорювачів, колайдерів. З іншого боку, нові дані по спектроскопії важких та надважких звичайних та адронних (каонних) систем дуже важливі в плані теоретичної перевірки нових ефектів на стику традиційної атомної оптики та спектроскопії, а також фізики електрослабких взаємодій, зокрема, пошуку ефектів Нової фізики за межами Стандартної Моделі, з'ясування ролі слабких взаємодій в атомній спектроскопії, вивчення властивостей нового стану речовини, так званої рідбергівської матерії тощо. Отримані в роботі набори енергетичних та радіаційних характеристик мають величезне практичне значення для вирішення задач побудови оптимальних схем лазерного фотоіонізаційного поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів та ядерних ізомерів, зокрема, атомів елементів лантанодів, актиноідів, урану, трансуранових елементів тощо. Розвинуті в роботі методи безпосередньо призначені для дослідження енергетич-

них, радіаційних та спектроскопічних характеристик важких та надважких елементів періодичної таблиці Менделєєва, інформація про які за теперішнього часу є або не зовсім достовірною або взагалі відсутня.

**Особистий внесок здобувача.** Всі наукові результати, представлені в дисертації, положення та висновки, що виносяться на захист, отримані автором самостійно. Основу дисертаційної роботи складають публікації у фахових виданнях України та зарубіжних спеціалізованих виданнях [1-15, 17-33]. У більшості з цих статей особистий внесок автора полягав у постановці проблеми, виборі об'єктів досліджень, виконанні числових комп'ютерних розрахунків, та формулюванні висновків. Також автору належать основні ідеї, обґрунтування нових методів, їх аналітична квантово-електродинамічна (механічна) інтерпретація, виведення основних співвідношень, чисельні оцінки й аналіз результатів. У монографіях [16, 34] автору належать розділи 3 і 4 відповідно.

У статтях [1-5, 9-11, 18-20, 22-23, 26-33] автор спільно з науковим конс. проф. О. Глушковым, проф. А. Свинаренко брав участь у постановці задачі. У публікаціях [6-7, 17, 21] дисертанту належить визначальна роль у формулюванні мети і задач дослідження, у проведенні розрахунків, інтерпретації отриманих результатів, підготовці публікацій та доповідей для конференцій. В [12-15, 24-25] дані для атомів у вільному стані отримані автором. В усіх опублікованих статтях автор брав участь в обговоренні результатів та написанні тексту. Взагалі, всі представлені в роботі дані для енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик важких атомних систем у вільному стані, зокрема, атомів (іонів) ртуті, талію, ітербію, тулію, урану, а також відповідних каонних (вольфрам  $^{184}\text{W}$ , свинець  $^{207}\text{Pb}$ , уран  $^{238}\text{U}$ ) та бета-розпадних атомних систем отримані автором особисто.

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

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

Line Shapes (ICSLS, Dublin, Ireland, 2018), 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems (Torun, Poland, 2018), 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII, Kruger Park, South Africa, 2018), 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2019, Deauville, France, 2019), 15<sup>th</sup> International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications” (Lodz, Poland, 2019), XXIV International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine, 2019; *здобувач був членом оргкомітету*), 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 у 54 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), 2 колективних монографіях та 20 тезах і матеріалах доповідей на міжнародних наукових конференціях та школах.

**Структура й обсяг дисертації.** Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел та додатку (списку робіт здобувача за темою дисертації). Загальний обсяг дисертації складає 345 сторінок, обсяг основного тексту - 267 сторінок. Робота ілюстрована 14 рисунками та містить 55 таблиць. Список використаних джерел складає 456 найменувань.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі подано загальну характеристику роботи, обґрунтовано актуальність, наукову та практичну значущість роботи, сформульовано мету, задачі дослідження.

В першому розділі викладений загальний огляд та критичний аналіз теоретичних методів розрахунку спектрів і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів, розглянуті сучасні найбільш послідовні та потужні методи та моделі теоретичної атомної спектроскопії, у т.ч. процедури урахування релятивістських, радіаційних, квантово-електродинамічних, обмінно-кореляційних ефектів в розрахунках спектроскопічних властивостей як звичайних важких атомів та іонів, так й так званих екзотичних (адронних, у т.ч. каонних), та бета-розпадних атомних систем, докладно проаналізовані і сформульовані проблеми (напр., генерація у більшості методів неоптимізованих базисів релятивістських хвильових функцій електронів, невиконання принципу калібрувальної інваріантності тощо) сучасної теорії (спектроскопії) важких звичайних та адронних атомів, а також бета-розпадних систем в світлі нового напрям-

ку у оптиці та спектроскопії, а саме кооперативної бета-ядерної спектроскопії релятивістських атомів.

У другому розділі викладені теоретичні основи нового ефективного методу комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit (ODFB) нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу для послідовного опису та розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних атомних систем (в подальшому це буде основою й для екзотичних каонних атомів та бета-розпадних систем) з послідовним максимальною прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів (включаючи ефекти Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також Bohr-Weisskopf) та радіаційних КЕД поправок (в т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ, зокрема, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  тощо. Стартовою основою для розвитку нашого нового підходу до розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомних систем є адіабатичний формалізм Гелл-Мана та Лоу і апарат ab initio ТЗ з використанням фейнманівської діаграмної техніки. Відомий S-матричний адіабатичний формалізм Гелл-Мана та Лоу призводить до рядів ТЗ по константі зв'язку (в нашому випадку електромагнітної взаємодії) для зсувів  $\Delta E$ . Ряди ТЗ стандартним чином діаграматизуються (з використанням звичайної техніки фейнманівських діаграм). При цьому природно, що нові наближення в теорії багатоелектронних систем зручно формулювати, як методи підсумовування фейнманівських діаграм певного типу. В теорії релятивістського атома існує методика, яка пов'язана з діагоналізацією власної матриці  $M$  для розрахунку зсувів енергії  $\Delta E$  станів, причому відповідні матричні елементи комплексні. Для багатоелектронної атомної системи в релятивістській теорії зсув енергії збудженого стану представляється у стандартному комплексному вигляді як:

$$\Delta E = \text{Re}\Delta E + i \text{Im}\Delta E, \quad (1a)$$

$$\text{Im} \Delta E = -\Gamma/2, \quad (1b)$$

де ймовірність розпаду  $P$  співпадає з повною шириною відповідного енергетичного рівня  $\Gamma$ . Зрозуміло, що повна ширина  $\Gamma$  включає, як радіаційну, так і автоіонізаційну ширину. Секулярна енергетична матриця  $M$ , що розраховується між усіма станами однієї парності в спектрі релятивістського атома, може бути представлена у вигляді звичайної стандартної суми:

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

де  $k$  - число квазічастинок;  $M^{(0)}$  - внесок вакуумних фейнманівських діаграм,  $M^{(1)}$  - внесок одноквазічастинкових фейнманівських діаграм,  $M^{(2)}$  - внесок двоквазічастинкових фейнманівських діаграм і т.д. В нашій теорії важка багатоелектронна атомна система описується рівнянням Дірака з релятивістським гамільтоніаном виду (підр. 2.2.2):

$$H = \sum_i \{ \alpha c p - \beta m c^2 - Z / r_i \} + \sum_{i>j} V(r_{ij}), \quad (3)$$

де  $\alpha$  та  $\beta$  ( $\alpha_i$ ) - матриці Дірака,  $Z$  - заряд ядра атома,  $V(r_{ij})$  - потенціал міжелектронної взаємодії; в якості потенціалу  $V(r_{ij})$  ми будемо використовувати релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії:

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}. \quad (4)$$

Принципальним моментом нашого підходу є вибір в якості нульового наближення оптимізованого Dirac-Fock (ODF) потенціалу, причому процедура побудови одноквазічастинкового уявлення базується на принципі побудови оптимізованих атомних базисів з дотриманням принципу калібрувальної інваріантності, зокрема, шляхом мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційні ширини рівнів. Тут важливо підкреслити, що ця процедура в даному підході реалізована вперше, на відміну від альтернативних підходів у релятивістській спектроскопії важких атомів та іонів, де будувались нульові наближення: неоптимізований (стандартний) DF, Dirac-Hartree-Slater, Dirac-Kohn-Sham (DKS),  $X_\alpha$ , relativistic HF, Hartree-Fock-Slater, а також модельні методи (модельний потенціал, псевдопотенціал і т.і.). Функція певного стану системи (ASF) із сумарним кутовим моментом  $J$ , з його  $z$ -проекцією  $M$  і парністю  $p$  має вид:

$$\Psi_s(JM^p) = \sum_m c_m(s) \Phi(\gamma_m JM^p), \quad (5)$$

$$\Phi(\gamma_m JM^p) = \sum_i d_i \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \cdots & \psi_1(N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}, \quad (6)$$

де  $c$  - коефіцієнти змішування конфігурації для стану  $s$ ;  $\Phi(\gamma_m JM^p)$  - функції стану певної конфігурації, тобто детермінант Слейтера 4-компонентних діраківських біспінорів;  $\psi_i$  - одноелектронні релятивістські хвильові функції.

Одноелектронна хвильова функція може бути визначена, як

$$\psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \\ iQ_{n,\kappa}(r) \cdot \Omega_{-\kappa,j}^{m_j}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

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

Слід зауважити, що в принципі в нульовому наближенні RMBPT (з дірак-фоківським «0» наближенням) можна розв'язувати як систему нелокальних ДФ радіальних рівнянь для компонент діраківського спінору  $F=P$ ,  $G=Q$ , так й використовувати модель локального дірак-фоківського потенціалу. Загальновідомо, що найбільш послідовний підхід щодо врахування ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядер, ефекти Bohr-Weisskopf і Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.) складається з вирішення відповідних рівнянь релятивістської моделі середнього поля для атомного ядра, однак в теоретичній атомній спектроскопії прийнято використовувати кілька відомих моделей, які забезпечують

спектроскопічну точність при проведенні розрахунків широкого набору характеристик атомів. Зокрема, мова йде про такі моделі розподілу електричного заряду в атомному ядрі, як моделі Гауса і Фермі. Далі викладена методика побудови штурмовських розкладень для врахування станів безперервного спектру в нашій оптимізованій теорії ODF (підр.2.2.3). Далі докладно викладені процедури розрахунку поправок першого, другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit (ODFB) нульовим наближенням (підр.2.2.4). Зокрема, поправка першого порядку визначається виразом виду:

$$M_1^{(2)} = \langle n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 [J] | V_{\text{int}} | n_4 l_4 j_4 \quad n_3 l_3 j_3 [J] \rangle =$$

$$= P_1 P_2 (-1)^{1+j_2+j_4+J} [(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)]^{1/2} \times$$

$$\times \sum_{i,k} \sum_a \left\{ \begin{matrix} j_i j_k J \\ j_2 j_1 a \end{matrix} \right\} (\delta_{i,3} \delta_{k,4} + (-1)^J \delta_{i,4} \delta_{k,3}) \cdot T_\lambda, \quad (8)$$

$$T_\lambda = T_\lambda^{\text{Qu}} + T_\lambda^{\text{Br}}, \quad (9)$$

де  $T_\lambda$  може бути виражена через радіальні інтеграли  $R$ , які, в принципі, схожі на відомі слейтерівські, і взагалі представляє суму так званих кулонівської та брейтівської частин релятивістського потенціалу (4). Як приклад, наведено визначення кулонівської частини:

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

$$+ R_l(1\tilde{2}\tilde{4}3) Y_\lambda(1\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) Y_\lambda(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \},$$

$$R_k(n'l'j' nlj; n'l'j' nlj) = \iint dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 f_{n'l'j'}(r_1) f_{nlj}(r_2) W_k(r_1 r_2) f_{n'l'j'}(r_2) f_{nlj}(r_1), \quad (10)$$

де 1,2,3,4 означають великі компоненти радіальної діраківської функції, відповідно цифри з тильдою - це малі компоненти; знак “~” позначає, що велику радіальну компоненту  $f_i$  в (10) потрібно замінити на малу  $g_i$ , а в кутових коефіцієнтах - замінити  $l_i$  на  $\tilde{l}_i = l_i - 1$  (для  $\alpha_i > 0$  та  $l_i + 1$  для  $\alpha_i < 0$ ); в (10) функція  $W$  звичайно виражається через функції Бесселя  $J$  1-го і 2-го порядку:

$$W_k(r_1 r_2) = \begin{cases} \frac{\pi}{\sqrt{r_1 r_2}} (-1)^k (2k+1) J_{k+1/2}(\alpha z w, r_1) J_{-k-1/2}(\alpha z w, r_2), & r_1 < r_2 \\ \frac{\pi}{\sqrt{r_1 r_2}} (-1)^k (2k+1) J_{k+1/2}(\alpha z w, r_2) J_{-k-1/2}(\alpha z w, r_1), & r_1 > r_2 \end{cases}. \quad (11)$$

Аналогічні вирази можуть бути записані також для брейтівської частини  $T$ :

$$T_\lambda^{\text{Br}} = T_{\lambda, \lambda-1}^{\text{Br}} + T_{\lambda, \lambda}^{\text{Br}} + T_{\lambda, \lambda+1}^{\text{Br}}, \quad (12a)$$

$$T_\lambda^{\text{Br}} = \{ R_l(12\tilde{4}\tilde{3}) Y_\lambda'(12\tilde{4}\tilde{3}) + R_l(\tilde{1}\tilde{2}43) Y_\lambda'(1243) +$$

$$+ R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) Y_\lambda'(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(1\tilde{2}4\tilde{3}) Y_\lambda'(1\tilde{2}4\tilde{3}) \}. \quad (12b)$$

з кутовою частиною  $Y$ , яка має стандартний вигляд в теорії кутового моменту.

При проведенні розрахунків спектрів складних атомних систем, зокрема, спектрів трьох- і більше квазічастинкових станів, найбільш трудомістким завданням є обчислення кутових частин матричних елементів, які виникають при інтегруванні по кутовим, а також по спіновим (при підсумовуванні) змінним (підр.2.2.5). Найбільш ефективним вважається метод, запропонований Фано. Даний метод був адаптований в задачах атомної спектроскопії, зокрема, Ivanova-Ivanov та співр. (Phys. Rep. 1988). Наступний принципово важливий крок пов'язаний із розвитком в рамках нового формалізму релятивістської калібрувальньо-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим ODF нульовим наближенням (RMBPT-ODF) прецизійного підходу до урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (як при обчисленні енергетичних спектрів після діагоналізації секулярної матриці, так й амплітуд, сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів з урахуванням багаточастинкових обмінно-поляризаційних поправок), як ефектів другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків ТЗ, у т.ч. поляризаційної міжквазічастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незорому набору конфігурацій та суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску континууму тощо (підр.2.2.6). Принципово новий елемент розвинутої теорії пов'язаний з побудовою та використанням нового оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів на основі принципу мінімізації калібрувальньо-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків RMBPT-ODF (підр.2.3). Найбільш прості діаграми, що дають внесок ненульовий внесок в радіаційну ширину, зображені на рис.1.

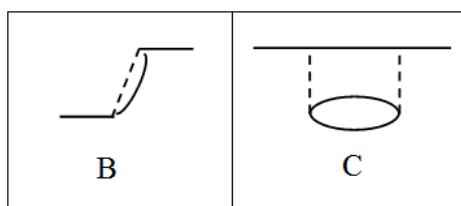


Рис. 1. Найбільш прості 1-QP діаграми, що дають ненульовий внесок в  $\text{Im}\delta E$

Внесок в  $\text{Im}\delta E$ , обумовлений діаграмами виду В (рис.1.) має вигляд:

$$\text{Im}\delta E_i(B) = \sum \text{Im}\delta E(i-j). \text{Im}\delta E = -\frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{\gamma, \delta)_{n}} V_{ij}^{|\omega|}, \quad (13)$$

де матричний елемент переходу  $V$ , що є, фактично, матричним елементом від уявної частини релятивістського оператора електромагнітної взаємодії (4), має вигляд:

$$V_{ijkl} = \iint d^3r_1 d^3r_2 \varphi_i^*(r_1) \varphi_j^*(r_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \cdot \varphi_k(r_2) \varphi_l(r_1). \quad (14)$$



причому окремі члени суми в (13) являють собою парціальні внески різних каналів радіаційного розпаду. Обчислення відповідної послідовності діаграми з використанням фотонного пропагатора у вигляді  $D = D_T + C \cdot D_L$  з відповідними поперечною  $D_T$  та поздовжньою  $D_L$  частинами ( $C$  - калібрувальна константа), дає наступний вираз для внесків в  $\text{Im}\delta E$ , обумовлених послідовністю діаграм типу С (рис. 1; Glushkov-Ivanov, (1992) Phys. Lett. A. 170:33):

$$\begin{aligned} \text{Im}\delta E_{\text{inv}}(\alpha - s | A_d) = & -C \frac{e^2}{4\pi} \iiint \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \sum \left( \frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{\alpha_s}} + \right. \\ & \left. \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha_s}} \right) \Psi_{\alpha}^+(r_1) \Psi_m^+(r_2) \Psi_s^+(r_3) \Psi_n^+(r_4) (1 - \alpha_1 \alpha_2) / r_{12} \cdot \\ & \{ [(\alpha_3 \alpha_4 - (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34})) / r_{34} \cdot \sin[\omega_{\alpha_n}(r_{12} + r_{34}) + \omega_{\alpha_n} \cdot \\ & \cos[\omega_{\alpha_n}(r_{12} + r_{34})] (1 + (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34}))] \} \Psi_m(r_3) \Psi_{\alpha}(r_4) \Psi_n(r_2) \Psi_s(r_1) \end{aligned} \quad (15)$$

Далі реалізується процедура мінімізації функціонала густини  $\text{Im}\delta E_{\text{inv}}$ , що призводить до відповідних інтегро-диференціальних рівнянь типу ДФ, рішення яких дозволяє отримати точне оптимізоване одноквазічастинкове уявлення в теорії. Використання базисів нашої нової релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим ODF нульовим наближенням при обчисленні матричних елементів в (13)-(15), які складають основу відомого релятивістського енергетичного підходу, закладає основи нового калібрувально-інваріантного підходу до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних характеристик (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) важких релятивістських багатоелектронних атомів, а у подальшому розгляді й вперше важких каонних атомів. До числа вкрай важливих задач при прецизійному описі енергетичних, спектроскопічних характеристик релятивістських атомних систем відноситься питання урахування радіаційних КЕД поправок, а саме, власної енергетичної частини зсуву Лемба і поляризації електрон-позитронного вакууму (рис. 2).

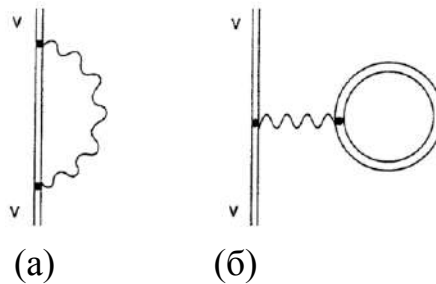


Рис. 2. Діаграми, що визначають внески в лембівський зсув у нижчому за  $\alpha Z$  порядку ( $\alpha$  - стала тонкої структури):  
а - власно-енергетична частина; б - поправка на поляризацію вакууму

У випадку прецизійного опису важких атомних систем, а також екзотичних атомів принципово важливим є питання урахування поправок порядку  $[\alpha(Z\alpha)]^n$  ( $n=2,3$ ), зокрема, поправок Калена-Сабри (Källén-Sabry) порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  і поправок Вічмана-Кролла (Wichmann-Kroll) порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$ . В роботі (пр.2.6) в рамках формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF з використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges (Phys. Rev. A., 2005) розвинуто та узагальнено послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів, зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризації вакууму тощо. Радіаційний потенціал представимо у вигляді суми стандартного потенціалу Юлінга-Сербера, внеску, пов'язаного з магнітним форм-фактором, високочастотного внеску, пов'язаного з електричним форм-фактором та низькочастотного внеску (а також члену, який враховує поправки вищих порядків) тобто:

$$V_{rad}(r) = V_U(r) + V_g(r) + V_f(r) + V_l(r) + \frac{2}{3}V_U^{high-order}(r), \quad (16a)$$

де, зокрема, потенціал Юлінга-Сербера у наближенні із скінченним розміром FS ядра із функцією розподілу ядра  $\rho(r)$  має вигляд:

$$V_U^{FS}(r) = -\frac{2\alpha^2}{3\pi} \int d^3r' \int_m^\infty dt \exp(-2t|r-r'|/\alpha Z) \times \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \frac{\rho(r')}{|r-r'|}, \quad (16б)$$

$$V_g(r) = \frac{\alpha}{4\pi m} i\gamma \cdot \nabla \left[ \Phi(r) \left( \int_1^\infty dt \frac{1}{t^2 \sqrt{t^2-1}} e^{-2trm} - 1 \right) \right], \quad (16в)$$

$$V_f(r) = -A(Z,r) \frac{\alpha}{\pi} V(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2-1}} \left[ \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right) \times [\ln(t^2-1) + 4\ln(1/Z\alpha + 0.5)] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right] e^{-2trm}. \quad (16г)$$

Інші члени мають аналогічний вигляд. Варто також зазначити, що в теорії враховувалися й інші прецизійні поправки, зокрема, поправки на приведену масу, релятивістську віддачу, на поляризацію вакууму завдяки утворенню віртуальних пар мюонів і т.і. Всі розрахунки в роботі виконувалися на основі атомного чисельного коду Superatom-ISAN.

В третьому розділі з метою апробації нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу викладені на його основі результати розрахунків енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомів, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та E2 переходу  $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі Hg<sup>+</sup>, енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J' \rightarrow 7s^3P_J^0$  (лінії 2833.9, 3684.5, 4059А) атому свинцю, енергій рівнів, ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2} - 4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2,7,2}$ ,

$4f^7(^8S)6s8p^8P_{9/2,7/2}$  атому Eu I, енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ ; енергії і сили осциляторів переходів  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ) (підр.3.1-3.3). У табл. 1 представлені результати теоретичного обчислення ймовірностей дипольних E1 (для тесту) переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  в  $Hg^+$  (HF - хартрі-фоківські дані, DF - дірак-фоківські дані, DF<sub>експ.</sub> - ДФ дані з використанням експериментальної енергії переходу, RPT-MP - релятивістська ТЗ з емпіричним модельним потенціалом (MP), Our data, QI-RMBPT - наші дані на основі калібрувально-інваріантної (QI) RMBPT з оптимізованим «0» наближенням ODF), а також експериментальні дані Moore (NBS, Washington).

Таблиця 1.

Ймовірності E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  
 $5d^{10}7p(P_{1/2},P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  в  $Hg^+$  (в  $s^{-1}$ ); див. текст

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

У табл. 2 далі наведені наші дані розрахунку ймовірності переходу, що відповідає лінії 12789A (1278.9 нм) в спектрі Pb, разом з результатами альтернативних теорій, зокрема, даними, отриманими на основі розрахунку в багатоко-нфігураціоному наближенні DF з використанням відповідно теоретичного DF та експериментального значень енергії переходу (MCDF: thr.E; exp.E), в багато-конфігураціоному релятивістському наближенні випадкових фаз (MCRRPA), в релятивістському наближенні RHF, в наближенні проміжного зв'язку (ICC) і, методом емпіричного модельного потенціалу (EMP), RPT-DKS - релятивістська ТЗ з DKS нульовим наближенням, та експерименту.

Таблиця 2

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

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

Аналіз наведених результатів показує, що поправка на урахування поляризаційної взаємодії зовнішніх квазічастинок змінює значення ймовірностей дипольних переходів на 15-30%. Також слід звернути увагу на практично нульове значення калібрувальньо-неінваріантного внеску в ймовірність переходу (для більшості даних цей внесок не перевищує 0,2% сили осцилятора  $gf$ , тобто різниці між значеннями  $gf$ , розрахованими з використанням оператора переходу у формі довжини та у формі швидкості), що на традиційній мові означає еквівалентність результатів розрахунків ймовірностей в схемах з оператором у формі довжини та швидкості (різні калібрування фотонного пропатора) та є свідченням оптимального вибору дірак-фоківського нульового наближення ODF, а також досить повного ефективного урахування багаточастинкових кореляційних ефектів. Далі (пр.3.4) наведені отримані на основі нового формалізму релятивістської калібрувальньо-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу прецизійні дані для енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  атому ітербію Yb, сил осциляторів радіаційних переходів, зокрема,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ , причому для деяких рідбергівських резонансів вперше передбачені значення їх енергій та ширин. В атомі Yb основна електронна конфігурація  $4f^{14}6s^2$ ,  $Z=70$  (в даному випадку оболонки  $5s^2$  і  $5p^6$  мають більшу енергію зв'язку, ніж  $4f^{14}$ ). Енергія іонізації цього атома  $I=50441\text{ см}^{-1}$ . В табл. 3 приведені наші дані (RMBPT-ODF), а також експериментальні і альтернативні теоретичні дані для енергій деяких Yb I одноразово збуджених станів (відлік яких ведеться від енергії основного стану:  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0$ ): MCHF-BP - дані, отримані на основі багато конфігураційного методу Хартрі-Фока (MCHF) з урахуванням поправок Брейта-Паулі (BP) (A,B+D,D - різні набори конфігурацій, включених в розрахунок методом MCHF-BP); RHF - дані Cowen, метод РХФ; RPT-MP (E1) - дані Ivanov-Letokhov та співр., метод - RPT з MP нульовим наближенням; RPT-DKS - дані Glushkov-Svinarenko релятивістська ТЗ з DKS нульовим наближенням; дані ДФ аналізу Wyart-Camus (DF) з емпіричною підгонкою.

Таблиця 3

Енергії ( $\text{см}^{-1}$ ) одноразово збуджених станів Yb I (див. текст)

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

У табл. 4 наведені експериментальні та теоретичні дані Летохова та співр. (JETP,1981) для енергії і ширини збуджених (автоіонізаційних) станів  $7s6p$  конфігурації в спектрі Yb I (які відбуваються з основного стану:  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0$  Yb): E1, Г1 - дані Ivanov et al. (RPT-MP); E2, Г2 - наша теорія (RPT-DKS); E3 - дані Karasoban-Özdemir (MCHF-VP; Phys.Polonica.A, 2011), E4, Г4 - наші дані (RMBPT-ODF). Похибка методу ХФ досягає понад  $100\text{ см}^{-1}$ .

Таблиця 4

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

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

У нашому розрахунку використано оптимізований базис релятивістських орбіталей станів, та більш точно виконане врахування принципово важливих багаточасткових обмінно-кореляційних ефектів (у т.ч. поляризаційної міжквazi-частинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незоромому набору конфігурацій, суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та обліку станів континууму). Причому, якщо енергії, які розраховані на основі різних методів, достатньо добре узгоджуються друг з другом, то ширин мають досить величезні відмінності. Ключовими для адекватної точності опису спектроскопічних характеристик ітербію є прецизійне врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів, використання оптимізованих базисів орбіталей. Саме останній фактор пояснює дуже істотну різницю в даних, отриманих різними методами. Отримані (підр.3.5) прецизійні дані для енергій та ширин збуджених, у т.ч. автоіонізаційних станів атома тулію Tm  $4f^{13}6s(J12)nsnp[J]$  з квантовим числом  $n=25-50$ , зокрема, наведені значення енергій, ширин автоіонізаційних станів  $4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)np_j[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (розпад проходить як по стандартному каналу VFD, так й новому для сучасної атомної спектроскопії каналу реорієнтаційного типу ROD, або по обидва каналам одночасно), а також дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1}6s_{1/2}(J')n_R1_Rj_R[J]$  ( $j, J', j_R, J$ )= $1/2-5/2$ . В табл. 5 приведені розраховані значення ширин Г3 (в  $\text{см}^{-1}$ ) та енергій E3 ( $10\text{см}^{-1}$ ) для станів  $4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$  атома Tm, для яких ROD-розпад - єдиний канал автоіонізаційного розпаду. Для порівняння наведені розрахункові дані, методом релятивістської ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення RPT-MP Ivanov-Vidolova-Angelova et al. (E1, Г1), а також RPT-DKS Glushkov-Svinarenko (E, Г2). Аналіз наведених даних показує, що при одному каналі розпаду, ширини для випадку ROD розпаду мають більші значення, чим у випадку VFD. Але для різ-

них станів(різних значень квантових чисел) ситуація може суттєво ускладнюватися.

Варто також підкреслити, що вивчення спектру Tm та інших важких атомів, зокрема, атомів лантанодів, актиноідів, урану (див нижче), трансуранових елементів тощо, становить значний інтерес, по-перше, з точки зору дослідження дуже складної динаміки та квантової кінетики розпаду збуджених, особливо високо розташованих рідбергівських станів важких систем. З іншого боку, це принципово важливо й з точки зору виявлення унікальних особливостей теоретичної спектроскопії автоіонізаційних резонансів особливо реорієнтаційного типу, а також, зрозуміло, для подальшого розвитку сучасної квантової електроніки та лазерної спектроскопії, побудови нових ефективних технологій поділення ізотопів методом лазерної селективної атомної фотоіонізації.

Таблиця 5

Ширина та енергії АС  $4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$  атома Tm (див. текст)

N	J=5/2			J=5/2			J=7/2	J=7/2
	Г1	Г2	Г3	Е1	Е3	Е2	Г3	Е3
25	1.18(-5)	1.25(-5)	1.21(-5)	4985	4980	4981	1.54(-2)	4984
26	-	1.07(-5)	1.01(-5)	-	4974	4975	1.31(-2)	4986
30	5.77(-6)	6.05(-6)	5.95(-6)	4995	4993	4994	3.94(-3)	4993
33	-	-	-3.63(-6)	-	4995	-	1.58(-2)	4996
35	-	-	3.07(-6)	-	4997	-	3.18(-3)	4998

Далі (підр.3.6) наведені результати розрахунку енергій орбіталей для атому урану (ізоотоп  $^{92}\text{U}$ ), проведено порівняння з альтернативними найбільш ефективними підходами сучасної атомної спектроскопії (стандартний релятивістський метод Hartree-Fock, стандартні версії Dirac-Fock, Dirac-Kohn-Sham etc.), яке підтверджує ефективність релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим нульовим наближенням ODF. Вперше отримані прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану, відраховані від рівня  $32899.790\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5880-5890)\text{ Å}$ ), нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2nf$ , відраховані від рівня  $32899.790\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6098.10 + (5998-6137)\text{ Å}$ ), рівня  $32857.449\text{ см}^{-1}$  ( $5f36d7s8s\ ^7L_5^0$ ); послідовність збудження:  $6056.81 + 6113.89 + (5862-5914)\text{ Å}$ ), а також рівня  $33083.3\text{ см}^{-1}$  (послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951)\text{ Å}$ ). Проведено докладне порівняння з фактично єдиними (!) в літературі даними групи Solarz et al. (Phys. Rev., 1975; Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory, University of California). Як приклад, в табл. 6 представлені розраховані енергії (в  $\text{см}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії урану  $5f37s2np$ , відраховані від рівня  $33083.3\text{ см}^{-1}$ ; послідовність збудження:  $6056.81 + 6030.6 + (5943-5951)\text{ Å}$  (наші дані).

На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість значень енергії показано, що наведені у літературі дані по вказаним вище рідбергівським серіям  $^{92}\text{U}$  (містять певні неточності, що пов'язано із вкрай високою складністю шуканих рідбергівських серій).

Таблиця 6

Теоретичні енергії (в  $\text{см}^{-1}$ ) рівнів нижчих членів рідбергівської серії  $U 5f^3 7s^2 np$ , відрах. від рівня  $33083.3 \text{ см}^{-1}$ ; посл.збудження:  $6056.81+6030.6+(5943-5951)\text{Å}$

$E_{theor}$	$n_{theor}$	$E_{theor}$	$n_{theor}$
49889.7	44	49901.3	49
49891.9	45	49903.9	50
49894.2	46	49906.2	51
49896.6	47	49908.4	52
49898.8	48	49910.5	53

Загальний аналіз даних, отриманих для атомів ітербію, тулію та урану, вказує на унікальні особливості в рідбергівській автоіонізаційній спектроскопії, пов'язані з аномально малими ширинами автоіонізаційних, рідбергівських резонансів, *й які можна розглядати як відкриття елементів нової нелінійної некулонівської фізики важких атомних систем*. Фактично, на наш погляд, сказане стосується взагалі важких атомів типу лантаноїдів та актиноїдів, урану, та, можливо, трансуранових елементів тощо.

В четвертому розділі викладено новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних характеристик важких екзотичних адронних (каонних) атомних систем на основі релятивістських рівнянь Klein-Gordon-Fock (каон) та Dirac (електронна підсистема) з одночасним урахуванням електромагнітної та сильної каон-ядерної взаємодії з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу. В основі нової теорії лежать елементи розвинутої вище комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit (ODFB) нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу. Повне рівняння Клейна-Гордона-Фока з урахуванням потенціалу сильної каон-ядерної взаємодії для каонної атомної системи може бути представлено в наступному вигляді:

$$\left[ \hbar^2 \nabla^2 + c^{-2} (E - V_{FS})^2 - \mu^2 c^2 \right] \psi = 2\mu V_N \psi. \quad (17)$$

де  $\mu$  - приведена маса каона (маса, радіус каона:  $m_K = 493.667 \pm 0.013 \text{ MeV}$ ,  $r_K = 0.560 \pm 0.031 \text{ фм}$ ),  $E$  - енергія каона,  $c$  - швидкість світла,  $\hbar$  - стала Планка,  $V_{FS}$  - ефективний потенціал, який складається з суми релятивістського кулонівського потенціалу, електричного потенціалу скінченно-розмірного ядра, узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges. У разі каон-нуклонної системи, як правило, використовується потенціал типу Batty et al. (Phys.Rev., 2005):

$$V_N = -\frac{2\pi}{\mu} \left[ 1 + \frac{M_K}{M_N} \right] [A_{Kp} \rho_p(r) + A_{Kn} \rho_n(r)], \quad (18)$$

де  $A_{Kp}, A_{Kn}$  - комплексні ефективні довжини  $Kp$  та розсіювання  $Kn$ ;  $M_K$  и  $M_N$  - маси каона та нуклона відповідно,  $\rho_p(r), \rho_n(r)$  - протонна і нейтронна густини в

ядрі. Далі (підр.4.5.1) з метою тестування нової теорії наведені результати розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також, відповідно, ймовірностей вказаних радіаційних переходів, енергії переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі свинцю та проведено порівняння з альтернативним підходами. Показано, що найбільший внесок в енергію переходу визначається основним кулонівським членом, але внесок радіаційних поправок, зокрема, поправки за рахунок поляризації вакууму (у т.ч. вищі порядки) є суттєвим для отримання спектроскопічної точності визначення відповідної енергії переходу.

У табл. 7 наведені внески (в кеВ) в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного атому свинцю: дані теорій Indelicato et al., Cheng et al., Kunzelman et al. (каскадні моделі), Khetselius et al. (модель на основі рівняння Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uehling-Serber), наші дані; експеримент - Cheng et al.

Таблиця 7

Внески (кеВ) в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі К-Pb

Внески в енергію переходу	Indelicato et al.	Kunzelman et al.	Khetselius et al.	Cheng et al.	Our data
Кулонівський Вклад	116.5666	116.600	116.5644	116.575	116.5658
Поляризація Вакууму	0.4134	0.410	0.4067	0,412	0.4138
$\alpha(Z\alpha)$	0.4203	-	-	0.421	0.4209
$\alpha(Z\alpha)^3 + \alpha^2(Z\alpha)$	-0.0069	-	-	-0.009	-0.0071
Поправка на віддачу + інші	0.0004	-0.050	-0.0126	-0.044	-0.0022
Сума:	116.9804	116.960	116.9585	116.943	116.9774
Експ.	-	-	-	116.952((10)	-

Різниця в методах обчислення величин енергетичних внесків в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного свинцю (зокрема в межах теорій Indelicato et al., Cheng et al., Kunzelman et al., Khetselius et al. й нашої) обумовлена: i) використанням різних процедур урахування КЕД, релятивістських та інших поправок; ii) використанням різних потенціалів самоузгодженого поля та, звичайно, різних моделей для розподілу заряду в ядрі атому. У табл. 8 приведені значення внеску в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в каонному атомі свинцю Pb внаслідок наявності двох ([He]), чотирьох ([Be]), десяти ([Ne]) вісімнадцяти ([Ar]) електронів: а) - дані розрахунку методом DF Indelicato et al, (b) - дані теорії з використанням наближення DKS Khetselius et al, (c) - наша теорія. Не дивлячись на відносно невеликі значення відповідних поправок, вони фактично перевершують величину, що обумовлена невизначеністю експерименту й, таким чином, в прецизійній теорії їх урахування виявляється принципово важливим.



Таблиця 8

Внесок в енергію переходу  $12o \rightarrow 11n$  в КА Pb, що обумовлений наявністю двох ([He]), чотирьох ([Be]), десяти ([Ne]) електронів

Метод	[He]	[Be]	[Ne]	[Ar]
(a)	-40.917	-47.419	-47.484	-
(b)	-39.345	-45.286	-45.172	-
(c)	-39.682	-46.983	-47.025	-53.986

Нарешті, в табл. 9 наведені теоретичні ( $E_{th}$ ) та експериментальні ( $E_{exp}$ ) енергії рентгенівського випромінювання для зазначених важких каонних атомних систем.

Таблиця 9

Теоретичні ( $E_{th}$ ) та Експериментальні ( $E_{exp}$ ) значення енергії рентгенівського випромінювання каонних атомів (в кеВ): (a),(b) - теоретичні дані Batty et al. з використанням найпростішої каскадної моделі Фермі-Теллера та Леон-Секі, (c) - результати Indelicato et al, (d) - результати Khetselius et al. (модель Klein-Gordon-Fock з потенціалом Uhling-Serber), (e) - наші дані

КА	Transition	$E_{th}$ (a)	$E_{th}$ (b)	$E_{th}$ (c)	$E_{th}$ (d)	$E_{th}$ (e)	$E_{exp}$
W	8-7	346.54	-	346.571	346.586	346.598	346.624(25)
Pb	8-7	426.15	426.201	426.180	426.175	426.195	426.221(57)
U	8-7	538.72	538.013	537.440	538.520	538.472	538.315(100)

Загальний висновок полягає у тому, що для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією та експериментом важливо використовувати ефективні послідовні й кількісно прецизійні процедури релятивістських, ядерних (у т.ч. ефектів сильної взаємодії), радіаційних ефектів.

В п'ятому розділі викладені основи нового ефективного релятивістського підходу до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких атомних систем, який базується на новому формалізмі релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським наближенням ODF та узагальненому релятивістському енергетичному підході. Весь розгляд обмежений лише групою дозволених та понад дозволених переходів. Загально відомо, що дозволених переходи вносять найсуттєвіший внесок в сумарний спектр  $\beta$ -розпаду, тоді як внесок заборонених переходів зазвичай становить лише кілька відсотків повної інтенсивності. Внесок цих та інших переходів у ймовірність  $\beta$ -розпаду описується на основі виразу для гамільтоніана взаємодії і ймовірності  $\beta$ -розпаду шляхом розкладання лептонного струму в ряд по характерним для  $\beta$ -розпаду малим параметрам. Розподіл енергії  $\beta$ -частинок має вигляд:

$$dW_{\beta}(E)/dE = \frac{1}{2\pi^3} G_F^2 \cdot F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 \cdot |M|^2. \quad (19)$$

де  $G_F$  - це константа слабкої взаємодії;  $E, p=(E^2-1)^{1/2}$  - повна енергія та імпульс  $\beta$ -частинки;  $E_0=1+(E_{cp}/m_e c^2)$ , ( $E_{cp}$  - гранична енергія  $\beta$ -спектра);  $|M|$  - енергоне-залежний матричний елемент для дозволених  $\beta$ -переходів.  $F$  - відома функція Фермі, яка за визначенням дорівнює:

$$F(E, Z) = \frac{1}{2p^2} (g_{-1}^2 + f_{+1}^2), \quad (20)$$

де позначки  $\pm 1 = \kappa$ ,  $\kappa = (l-j)/(2j+1)$ . У (20) фігурують функції  $f_{+1}$  та  $g_{-1}$  - релятивістські електронні радіальні хвильові функції, які обчислюються на межі сферичного ядра радіусом  $R_0$  або використовуються значення цих функцій в нулі (амплітуди розкладання функцій в ряд в нулі). Відповідна інтегральна функція Фермі  $f$  задається визначенням:

$$f(E_0, Z) = \int_1^{E_0} F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 dE. \quad (21)$$

Важливим моментом теорії є правильне нормування електронних радіальних функцій  $f_\kappa$  та  $g_\kappa$ , для яких при великих значеннях радіальної змінної

$$g_\kappa(r) \rightarrow r^{-1} [40(E+1)/E]^{1/2} \sin(pr + \delta_\kappa), \quad (22a)$$

$$f_\kappa(r) \rightarrow r^{-1} (\kappa/|\kappa|) [40(E-1)/E]^{1/2} \cos(pr + \delta_\kappa). \quad (22b)$$

Детальний опис методології визначення хвильових функцій у рамках формалізму RMBPT-ODF викладений вище у розділі 2. Зазначимо, що чисельний розв'язок усіх рівнянь, а також весь розрахунок характеристик  $\beta$ -розпаду та атомних поправок проведені на основі атомного чисельного коду Superatom-ISAN, в якому реалізовані процедури обчислення функції Фермі для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції, оцінки впливу вибору виду самоузгодженого атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також впливу урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі. Нова теорія застосована до розрахунку характеристик серії дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ . Кількісно досліджено вплив хімічного оточення атома на характеристики (інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду) дозволених  $\beta$ -переходів і проведено порівняння отриманих даних з результатами альтернативних обчислень з використанням неоптимізованих методів релятивістського HF, стандартних версій DF, DKS.

Показано, що при переході від визначення  $F(E, Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $f(E, Z)$ , що обчислюється за амплітудами при нулі, функція  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0 = 167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0 = 65,8$  кеВ) - на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0 = 140,7$  кеВ) - 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0 = 20,8$  кеВ) - на 32%. В табл. 10 наведені дані щодо внеску величини повного урахування обміну в хвильових функціях дискретного та неперервного спектрів на значення інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$  на основі різних підходів.

Внесок величини повного урахування обміну в хвильових функціях дискретного та неперервного спектрів до значень інтегральної функції Фермі  $f(E_0, Z)$

Розпад	$E_0$ , кеВ	$f(E_0, Z)$ ODF	$f(E_0, Z)$ DF	$f(E_0, Z)$ HFS <sub>rel</sub>	$\Delta_4$ , %	$\Delta_5$ , %
$^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$	167,4	$1,3461 \cdot 10^{-2}$	$1,3556 \cdot 10^{-2}$	$1,3682 \cdot 10^{-2}$	-1,6	-0,9
$^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$	39,4	$6,2375 \cdot 10^{-4}$	$6,4304 \cdot 10^{-4}$	$6,6304 \cdot 10^{-4}$	-5,9	-3,0
$^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$	140,7	$8,6124 \cdot 10^{-2}$	$8,7025 \cdot 10^{-2}$	$8,8817 \cdot 10^{-2}$	-3,0	-2,0
$^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$	20,8	$1,5896 \cdot 10^{-3}$	$1,6424 \cdot 10^{-3}$	$1,7208 \cdot 10^{-3}$	-7,6	-4,6

В якості характерних параметрів, що визначають внесок шуканих ефектів, взяті величини:

$$\Delta_4 = \{ [40 f(E_0, Z) \text{OD}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1 \} \cdot 100\%, \quad (23a)$$

$$\Delta_5 = \{ [40 f(E_0, Z) \text{D}\Phi / f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}] - 1 \} \cdot 100\%, \quad (23b)$$

де  $f(E_0, Z) \text{OD}\Phi$  - інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні ODF з повним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів;  $f(E_0, Z) \text{D}\Phi$  - інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні ДФ з повним урахуванням обмінних ефектів;  $f(E_0, Z) \text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  - інтегральна функція Фермі, обчислена у наближенні  $\text{X}\Phi C_{\text{rel}}$  з неповним врахуванням обмінних ефектів. В якості ODF значень використані результати нашого розрахунку з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів ( $\Delta_4$ ), а також для порівняння - результати класичного DF розрахунку Vand-Listengarten-Trzhakovskaya ( $\Delta_5$ ) й аналогічні дані DKS розрахунку Glushkov-Dubrovskaya et al. з урахуванням обмінних ефектів. Аналіз даних свідчить про те, що із збільшенням повноти урахування обмінних ефектів (в подальшому обмінно-кореляційних) у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру поправка на енергію зростає із зменшенням граничної енергії. Відносна зміна інтегральної функції Фермі, наприклад, для переходу  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  становить 7,6%. Цікавим уявляється питання щодо впливу врахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі. У табл. 11 наведені дані наших ODF обчислень значень функції Фермі  $F(E, Z)$  для розпадів:  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ .

Таблиця 11

Функція Фермі  $F(E, Z)$  та вплив на неї повного урахування обміну (кореляції) у хвильових функціях дискретного і неперервного спектрів ( $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ )

$E_\beta^-$ кін, кеВ	Z=95	$F(E, Z) ^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}; E_0 = 20,8 \text{ кеВ}$			$\Delta_6$ , %	$\Delta_7$ , %	$\Delta_8$ , %
	ODF	DF	HFS <sub>rel</sub>	Coulomb			
0,27137	2014,23	2075,86	2316,49	2431,60	-13,0	-10,4	-4,7
1,4033	944,398	961,517	1018,29	1069,57	-7,3	-5,6	-4,8
3,3341	621,733	634,238	661,040	694,165	-5,9	-4,1	-4,0
8,8517	391,341	394,909	406,591	426,528	-3,8	-2,9	-4,7
14,907	303,167	306,220	313,858	329,084	-3,4	-2,4	-4,6
20,755	259,001	260,587	266,528	279,230	-2,8	-2,2	-4,5

Для порівняння також наведені деякі значення функції  $F(E,Z)$ , розраховані методом  $HFS_{rel}$ , стандартним методом DF, а також у наближенні кулонівського (Coulomb) поля з урахуванням кінцевих розмірів ядра.

В якості характерних параметрів, що визначають внесок шуканих ефектів, зручно оперувати величинами:

$$\Delta_6 = \{[40 F(E,Z)ODF / F(E,Z)HFS_{rel} ]-1\} \cdot 100\%, \quad (24a)$$

$$\Delta_7 = \{[40 F(E,Z)DF_{обм} / F(E,Z)HFS_{rel} ]-1\} \cdot 100\%, \quad (24b)$$

$$\Delta_8 = \{[40 F(E,Z)HFS_{rel} / F(E,Z)_{Coulomb} ]-1\} \cdot 100\%, \quad (24c)$$

де  $F(E,Z)KЭД$  - функція Фермі, обчислена в оптимізованому наближенні ODF з повним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів;  $F(E,Z)DF_{обм}$  - функція Фермі, обчислена в апроксимації DF з повним урахуванням обмінних ефектів;  $F(E,Z)HFS_{rel}$  - функція Фермі, обчислена в наближенні  $HFS_{rel}$  з неповним врахуванням обмінних ефектів;  $F(E,Z)_{Кулон}$  - функція Фермі (Coulomb approximation). Аналіз даних, наведених в табл. 11, показує, що поправка, пов'язана з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях дискретного та безперервного спектрів, при низькій енергії суттєво перевищує поправку на екранування (відносно до кулонівського поля), яка виявляється за допомогою методу  $XFC_{rel}$ , однак із зростанням енергії поправка на екранування поступово зрівнюється з обмінним внеском. З цього можна зробити висновок, що відповідний графік Кюрі, побудований за отриманими даними для  $F(E,Z)$  у порівнянні з результатами аналогічних даних на основі методу  $XFC_{rel}$ , в області малих значень енергії буде мати перевищення над прямою, яка проведена по точках з більшою енергією. Такий надлишок може імітувати масивне нейтрино з ненульовою масою у кількості 1,8% від числа розпадів.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі наведено нове вирішення наукової проблеми, що виявляється в розробці теоретичних основ нової прецизійної релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних адронних (каонних) систем з одночасним коректним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів на основі формалізму комбінованої калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу, нового ефективного релятивістського підходу до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволених переходів) важких систем в межах прецизійної кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем. Розвинені в даній роботі вперше в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії принципово нові підходи і отримані на їх основі в переважній більшості із спектроскопічною точністю вперше оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в сучасній теоретичній оптиці і спектроскопії важких атомних систем.

Основні узагальнені результати і висновки роботи зводяться до наступного:

1. На основі методології апарату КЕД теорії збурень та фейнманівської діаграмної техніки та адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розвинуто теоретичні основи нового ефективного методу комбінованої релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу для послідовного опису та розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких звичайних багатоелектронних атомних систем з послідовним, максимально прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів (включаючи ефекти Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow, а також Bohr-Weisskopf) та радіаційних КЕД поправок (у т.ч. поправки на поляризацію вакууму, власно-енергетичну частину лембівського зсуву, а також поправки вищих порядків ТЗ, зокрема, Källén-Sabry порядку  $\alpha^2(\alpha Z)$  та Wichmann-Kroll порядку  $\alpha(Z\alpha)^n$  тощо).

2. На основі адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розвинуто теоретичні основи нової послідовної калібрувально-інваріантної ab initio версії релятивістського енергетичного підходу з метою подальшої побудови оптимізованого одноквазічастинкового 1-QP уявлення в релятивістській теорії спектрів важких атомів за принципом мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційну ширину енергетичних рівнів, обумовлених послідовністю складних обмінно-поляризаційних діаграм другого та вищих порядків релятивістської ТЗ RMBPT з дірак-фоківським нульовим наближенням ODF.

3. Розроблено теоретичні основи нової калібрувально-інваріантної версії релятивістського енергетичного підходу до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних (амплітуди та ймовірності переходів, сили осциляторів, радіаційні та автоіонізаційні ширини тощо) характеристик важких релятивістських багатоелектронних атомів з використанням формалізму калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF й ефективним прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів. Вперше в межах RMBPT-ODF адаптована узагальнена техніка обчислення матричних елементів оператора релятивістської міжелектронної взаємодії, що включає кулонівську, брейтівську магнітну взаємодію, з використанням методу диференціальних рівнянь.

4. В рамках нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим ODF нульовим наближенням розвинуто і теоретично обґрунтовано новий прецизійний підхід до урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (як при обчисленні енергетичних спектрів після діагоналізації секулярної матриці, так й амплітуд, сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів з урахуванням багаточастинкових обмінно-поляризаційних поправок), як ефектів другого порядку і домінуючих класів діаграм вищих порядків ТЗ, у т.ч. поляризаційної міжквазічастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по неозорому набору конфігурацій та суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та урахуванню станів континууму в межах узагальненої релятивістська ODF версії методу штурмовських розкладань.

5. В рамках формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF удосконалено послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок до енергій рівнів важких атомів (зокрема, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки на поляризації вакууму тощо) з використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges (у стандартній версії FGRP визначається як сума потенціалу Uhling-Serber, внесків від електричного і магнітного форм-факторів, членів, що враховують внески поправок вищих порядків типу Källén-Sabry та Wichmann-Kroll тощо).

6. З метою апробації нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу виконано розрахунки енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч. енергій та ймовірностей, сил осциляторів електричних E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та E2 переходу  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі  $Hg^+$ , енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$  (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) важкого атому свинцю Pb, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{9/2,7,2}$  атому Європію Eu I; отримано нову інформацію щодо надважкого елемента ніхонія  ${}_{113}^{278}Nh$  (виконано розрахунок спектру низько розташованих рівнів з урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних та обмінно-кореляційних поправок). В роботі зроблено висновок, що розвинутий підхід у порівнянні зі стандартними неоптимізованими релятивістськими методами HF та DF дозволяє отримати більш точні дані як по енергіях, так й амплітудам та ймовірностям радіаційних переходів, що обумовлено використанням оптимізованого нульового наближення ODF, досить повним ефективним урахуванням складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів (внесок за рахунок поляризації остову досягає 30% від значення сили осцилятора; величина калібрувально-неінваріантного внеску в радіаційну ширину складає долі проценту на відміну від усіх існуючих методів сучасної атомної спектроскопії, для яких внесок досягає 5-50%).

7. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові дані для енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ , енергії і сили осциляторів переходів  $6s^26p^2P_{1/2}$ - $6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^26p^2P_{1/2}$ - $6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ). Показано, що у порівнянні з методом HF, а також загальновідомим кулонівським наближенням, які дають недостатньо точні дані як по енергіях, так і ймовірностям радіаційних переходів, розроблений підхід забезпечує фізично розумну узгодженість з експериментальними даними за рахунок використання оптимізованого нульового наближення ODF та досить повного урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів.

8. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові прецизійні дані для енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  атому ітербію Yb, сил осциляторів радіаційних переходів, зокрема,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії і ширини автоіонізаційних резонансів  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ , причому вперше для деяких рідбергівських резонансів вперше передбачені значення їх енергій та ширин. Показано, що точність опису спектроскопічних характеристик залежить від ключових факторів: одночасного прецизійного врахування релятивістських, радіаційних та обмінно-кореляційних ефектів та використання оптимізованих базисів орбіталей.

9. На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові прецизійні дані для енергій та ширин збуджених, у т.ч. автоіонізаційних станів атома тулію Tm  $4f^{-1}_j\ 6s(J12)nsnp[J]$  з квантовим числом  $n=25-50$ , зокрема, наведені значення енергій, ширин автоіонізаційних станів

$$4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J], \quad 4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J], \quad 4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)np_j[J], \quad 4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J],$$

$4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (розпад проходить як по стандартному каналу Бейтлера-Фано (BFD), так й новому для сучасної атомної спектроскопії каналу реорієнтаційного типу ROD, або по обидва каналам одночасно), а також – нові дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1}6s_{1/2}(J')n_Rl_Rj_R[J]$  ( $j, J', j_R, J$ )= $1/2-5/2$ . Вперше виявлено унікальні особливості в автоіонізаційній спектроскопії ітербію та тулію, пов'язані з аномально малими ширинами автоіонізаційних, рідбергівських резонансів, що може бути пояснено виключно надто складною некулонівською енергетикою відповідних атомних систем і одночасно дає суттєві переваги при пошуку нових оптимальних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів (той же уран, плутоній тощо); узагальнено інформацію щодо важких атомів типу лантаноїдів та актиноїдів, урану, та можливо трансуранових елементів тощо.

10. За результатами розрахунку енергій орбіталей для атома урану (ізоотоп  $^{92}\text{U}$ ) в роботі зроблено висновок про високу ефективність релятивістської ТЗ RMBPT з оптимізованим нульовим наближенням ODF у порівнянні з альтернативними та найбільш ефективними підходами сучасної атомної спектроскопії (стандартний релятивістський метод Hartree-Fock, стандартні версії Dirac-Fock, Dirac-Kohn-Sham etc.).

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

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

11. Вперше в рамках релятивістської спектроскопії важких екзотичних адронних (каонних) атомних систем запропоновано та розвинуто новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку їх спектрів та спектроскопічних характеристик на основі релятивістських рівнянь Klein-Gordon-Fock (каон) та Dirac (електронна підсистема) з одночасним урахуванням електромагнітної (шляхом побудови ефективного самоузгодженого потенціалу, який складається з суми релятивістського кулонівського потенціалу, електричного потенціалу скінченно-розмірного ядра, узагальненого радіаційного потенціалу FGRP типу Flambaum-Ginges) та сильної каон-ядерної взаємодії з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу.

12. Проведено тестування нової релятивістської теорії екзотичних багатоелектронних каонних атомних систем шляхом порівняння з альтернативним підходами на основі отриманих результатів розрахунку енергетичних (електромагнітних) внесків (основна кулонівська поправка, поправка на поляризацію вакууму, релятивістська поправка на ефект віддачі та надтонкий зсув) в енергії  $8i-7h, 8k-7i, 7h-6g$  в спектрі каонного азоту, а також відповідно ймовірностей вказаних радіаційних переходів, енергії переходу  $12o \rightarrow 11n$  в спектрі каонного свинцю.

Показано, що найбільший внесок в енергію переходу визначається основним кулонівським членом, але внесок радіаційних поправок, зокрема, поправки за рахунок поляризації вакууму (включаючи вищі порядки) є суттєвим для отримання спектроскопічної точності визначення відповідної енергії переходу.

13. З метою отримання нової інформації про важкі каонні атоми, а також тестування нової релятивістської теорії виконано докладні розрахунки енергетичних та спектроскопічних характеристик важких каонних атомів, зокрема, вольфраму  $^{184}\text{W}$ , свинцю  $^{207}\text{Pb}$  та урану  $^{238}\text{U}$  з прецизійним урахуванням релятивістських, радіаційних і ядерних ефектів, а також поправки за рахунок сильної каон-ядерної взаємодії. Порівняння експериментальних та альтернативних теоретичних даних (зокрема, отриманих на основі каскадної моделі Fermi-Teller з використанням коду Leon-Seki, послідовних теоретичних Klein-Gordon-Fock методів Indelicato et al., Batty et al., Khetselius et al.) вказує на принципову необхідність прецизійного урахування перелічених вище груп поправок для досягнення фізично розумної узгодженості між теорією й дуже складним експериментом.

14. В рамках кооперативної електронно- $\beta$ -ядерної спектроскопії атомних систем розвинуто новий ефективний релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволені переходи) важких атомних систем, який базується на основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським наближенням ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу. Реалізовані процедури обчис-



лення функції Фермі для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень цієї функції, оцінки впливу вибору виду самоузгодженого атомного поля на характеристики  $\beta$ -розпаду, а також впливу урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі.

15. Вперше на основі нового підходу отримано результати щодо характеристик цілої серії дозволених (понад дозволених)  $\beta$ -розпадів, а саме – дані для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ ,  $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$ ,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$ ,  $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$ ,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$ ,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ ; кількісно досліджено вплив хімічного оточення атома на характеристики (інтегральна функція Фермі, період напіврозпаду) дозволених  $\beta$ -переходів і проведено порівняння отриманих даних з результатами альтернативних обчислень з використанням неоптимізованих методів релятивістського Hartree-Fock, стандартних версій Dirac-Fock, Dirac-Kohn-Sham. Встановлено, що при переході від визначення  $F(E, Z)$  за функціями на межі ядра до визначення  $F(E, Z)$ , що обчислюється за амплітудами при нулі, функція  $f$  зростає відповідно для розпадів  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_0 = 249$  кеВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_0 = 167$  кеВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_0 = 65,8$  кеВ) – на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_0 = 140,7$  кеВ) – 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_0 = 20,8$  кеВ) – на 32%.

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

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

(\* - позначені роботи, які включені до міжнародних наукометричних баз (Scopus, Web of Science)

1. Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Y.V. and Svinarenko A.A. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of atomic systems and Many-Body perturbation theory approach to computing  $\beta$ -Decay Parameters 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. 59-89. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-68314-6>
2. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Dubrovskaya Yu.V., Theoretical studying excited states spectrum of the ytterbium within the optimized relativistic many-body perturbation theory. Photoelectronics. 2020. Vol.29. P.118-125
3. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kuznetsova A.A., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Advanced Laser-Photoionization Scheme of Separation of Heavy Isotopes in the Gases Separator Devices. Physics of Aerodispersed Systems. 2021. Vol.59. P. 173-183. <https://doi.org/10.18524/0367-1631.2021.59.227379>
4. Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Serga I.N. and Svinarenko A.A. Relativistic Quantum chemistry and Spectroscopy of some kaonic atoms: Hyperfine and

- Strong interaction effects. 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 Theor. Chemistry and Physics, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 91-110.  
<https://doi.org/10.1007/978-3-030-68314-6>
5. Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N., *Relativistic Quantum Chemistry and Spectroscopy of Kaonic Atomic Systems with Accounting for Radiative and Strong Interaction Effects*. 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.33-50.
  6. Cherkasova I.S., Ternovsky V.B., Nesterenko A.A., Mironenko D.A., *Theoretical studying spectral characteristics of Zn-like ions on the basis of relativistic perturbation theory Photoelectronics*. 2020. Vol.29. P.156-160.
  7. Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Vitavetskaya L.A., Ternovsky V.B., Serga I.N., *Quantum Chemistry and Spectroscopy of Pionic Atomic Systems With Accounting for Relativistic, Radiative, and Strong Interaction Effects* . *Advances in Quantum Chemistry* (Elsevier). 2019. Vol.78. Ch.9. P.193-222;  
<https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.003>\*
  8. Ternovsky V.B., *Theoretical studying Rydberg states spectrum of the uranium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory*. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.39-45.
  9. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Romanenko E., Zaichko P.A., *Spectroscopy of Rydberg Atoms in a Black-body Radiation field: Ionisation Rates and Effective Lifetimes*. *Journal of Physics: C. Series* (IOP, London). 2019. Vol.1289. P. 012024. [doi:10.1088/1742-6596/1289/1/012024](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1289/1/012024)\*
  10. Glushkov A.V., Cherkasova I.S., Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., *Theoretical studying spectral characteristics of Ne-like ions on the basis of optimized relativistic many-body perturbation theory*. *Photoelectronics*. 2019. Vol.28. P.75-82.
  11. Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Dubrovskaya Yu.V. and Serga I.N., *Parity non-conservation effect in heavy atomic systems within relativistic many-body perturbation theory: Advanced data*. *Journal of Physics: C. Series* (IOP, London). 2019. Vol.1289. P. 012025.  
[doi:10.1088/1742-6596/1289/1/012025](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1289/1/012025)\*
  12. 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.
  13. Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Plyetskaya E.K., *Relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field*. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.121-130.
  14. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Kvasikova A.S., Ignatenko A.V., Kuznetsova A.A., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B., *Non-Linear Chaotic Dynamics of*

- Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field and Laser Systems // Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Advances in Concepts and Applications, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer). 2017. Vol.30. P.169-180.
15. Kuznetsova A.A., Glushkov A.V., Gurskaya M.Yu., Buyadzhi A.A., Ternovsky V.B., Optimized relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field: Sensing spectral parameters. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2018. Vol.15. N4. P.50-57.
  16. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Spectroscopy of Rydberg atoms and relativistic quantum chaos. Odessa: TES, 2018. 152P.
  17. Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Ternovsky E.V., Mironenko D.A., Smirnov A.V., Advanced computational approach to studying Rydberg and autoionization resonances in spectra of lanthanides: Ytterbium. *Journal of Physics: C. Series (IOP, London)*. 2018. Vol.1136. P. 012010. [doi:10.1088/1742-6596/1136/1/012010\\*](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1136/1/012010)
  18. Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Cherkasova I.S., Mironenko D.A., Theoretical studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory: doubly excited valence states. *Photoelectronics*. 2018. Vol. 27. P.113-120.
  19. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurskaya M.Yu., Kuznetsova A.A., Spectroscopy of radiative decay processes in heavy rydberg alkali atomic systems . *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 Marvani (Springer). 2018. Vol.31. P.229-241.
  20. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Smirnov A.V., Kuznetsova A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., An advanced laser photoionization separation scheme for radioactive isotopes and products of atomic energetics: Uranium and the transuranium elements. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2017. Vol.14. N4. P.83-93.
  21. 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)
  22. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Smirnov A.V., Gauge-invariant relativistic perturbation theory approach to determination of energy and spectral characteristics for heavy and superheavy atoms and ions: Review. *Photoelectronics*. 2017. Vol.26. P.11-28.
  23. 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)\*

24. Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Gurskaya M.Y., Kuznetsova A.A., Ponomarenko E.L., Ternovsky V.B., Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field. *Journal of Physics: C. Series (IOP, London)*. 2017. Vol.810. P. 012047.  
[doi:10.1088/1742-6596/810/1/012047](https://doi.org/10.1088/1742-6596/810/1/012047)\*
25. Khetselius OYu, Zaichko PA, Smirnov AV, Buyadzhi VV, Ternovsky VB, Florko TA, Mansarliysky VF (2017) Relativistic Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Hyperfine Structure and Oscillator Strength Parameters for Some Heavy Element Atoms and Ions. In: Tadjer A, Pavlov R, Maruani J, Brändas E, Delgado-Barrio G (eds) *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology*. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, vol 30. Springer, Cham, pp 271-281.
26. Ternovsky V.B., Gurskaya M.Yu., Svinarenko A.A., Mansarliysky V.F., Theoretical studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances. *Photoelectronics*. 2017. Vol.26. P.103-113.
27. Brusentseva S.V., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Ternovsky V.B., Non-linear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime with accounting the waves reflection, space charge field and dissipation effects. *Photoelectronics*. 2016. Vol.25. P.102-108.
28. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Bashkarev P.G., 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.
29. 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.
30. Florko T.A., Glushkov A.V., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Advanced laser photoionization separation scheme and technology for heavy radioactive isotopes and nuclear isomers. *Photoelectronics*. 2016. Vol.25. P.119-125.
31. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N., Agayar E.V., Ternovsky V.B., Nonlinear chaos-dynamical approach to analysis of atmospheric radon <sup>222</sup>Rn concentration time series. *Journal Indian Academy of Sciences Conference Series*. 2017. Vol.1. №1. P.61-66.  
[DOI: 10.29195/iascs.01.01.0025](https://doi.org/10.29195/iascs.01.01.0025)
32. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Prepelitsa G.P. Geometry of a Relativistic Quantum Chaos: New approach to dynamics of quantum systems in electromagnetic field and some applications. *International Scientific Journal*

- “Proceedings of International Geometry Center”. 2015. Vol.8. N3-4. P.79-85. DOI: <https://doi.org/10.15673/2072-9812.3/2015>\*
33. Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., Duborez A.V., Lepikh Ya.I., Non-linear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime. *Photoelectronics*. 2015. Vol.24. P.77-87.
  34. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Ignatenko A.V., *Numerical Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory*, P.2. Odessa: TES. 2015.
  35. Ternovsky V., *Relativistic Quantum Chemistry of Heavy Elements and Hadronic Atoms* . Abs. of the 24th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine). 2019. P.73.
  36. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Tsudik A.V., Dynamics of non-linear processes in a backward-wave tubes chain: Chaos and strange attractors . Abs. of the 15th International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications” (Lodz, Poland), 2019. P.BIF275.
  37. Khetselius O., Ternovsky V., Mykhailov O., Serga I., Serga R., Electroweak interaction and parity nonconservation in heavy finite Fermi-systems: spin-dependent effects and weak interaction enhancement . Abs. of the 31st Int. Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions - ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. P.298 (TH-056).
  38. Khetselius O., Ternovsky V., NEET and “Shake up” effects in laser electron-gamma-nuclear spectroscopy of multicharged ions . Abs. of the 31st Int. Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC 2019, Deauville (France). 2019. P.481 (FR-060).
  39. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Spectrum of the rydberg states for uranium atom within relativistic many-body perturbation theory. 3th International Conference “Quantum Systems in Physics and Mathematics” (Odessa, Ukraine, December 1-7, 2019). Odessa: OSENU. 2019.
  40. Ternovsky V.B., *Theoretical Studying Spectra of Lanthanides and Actinides Atoms within Relativistic Many-Body Perturbation Theory: Rydberg and Autoionization Resonances*. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII; Kruger Park, South Africa). 2018. P.64.
  41. Ternovsky V.B., Khetselius O.Y., Dubrovskaya Y.V., Vitavetskaya L.A., Spectral Parameters for Hyperfine and Electroweak Interaction and Parity Nonconservation Effect in Heavy Atoms and Nuclei . Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS; Dublin, Ireland). 2018. P.104 (Tu.P.26).
  42. Ternovsky V.B., Mironenko D.A., Glushkov A.V., Ternovsky E.V., Svinarenko A.A., Radiation Transition Probabilities for Heavy Rydberg Atoms within Advanced Relativistic Energy Approach. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS; Dublin, Ireland). 2018. P.129 (We.P.24).

43. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O., Advanced relativistic energy approach to computing the radiation transition probabilities and hyperfine structure constants for heavy Rydberg atoms. Abs. of the 26th International Conference on Atomic Physics (ICAP 2018; Barcelona, Spain). 2018. P.719.
44. Ternovsky V., Advanced computational approach to studying rydberg and autoionization spectra of heavy atoms. Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2018; University of California, Davis, USA). 2018. P.P4.
45. Dubrovskaya Yu., Vitavetskaya L., Khetselius O., Serga I., Ternovsky V., New computational approach to hadronic atomic systems: radiative and strong interaction corrections. Abs. of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2018; University of California, Davis, USA). 2018. P.P14.
46. Svinarenko A.A., Ternovsky V.B., Cherkasova I.S., Mironenko D.A., Antonyuk Ya., Studying spectra of ytterbium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory. Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Eds. A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius, A.A. Svinarenko, V.V.Buyadzhi; Proceedings of the International Conference “Quantum systems in chemistry, physics and mathematics II” (QSCPM-2018). Odessa: OSENU. 2018. P.44-51.
47. Ternovsky V.B., Theoretical Studying Spectra of Lanthanides Atoms Within Relativistic Many-Body Perturbation Theory: Rydberg and Autoionization Resonances. Abs. of the 22rd International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXII; Hunan Province, P.R. China). 2017.
48. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Smirnov A.V., Advanced computational approach to studying Rydberg and autoionization resonances in spectra of heavy lanthanides and actinides. Abs. of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics (Paris, France). 2017. P.204.
49. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Serga I.N., Kvasikova A.S., Relativistic quantum chemistry of heavy elements and hadronic atoms and molecules. Abs. of the 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (Munich, Germany). 2017. P.PO3-254.
50. Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Bunyakova Yu., Ternovsky V.B., New non-linear approach to analysis, modelling and prediction of chaotic variability of atmospheric radioactive radon  $^{222}\text{Rn}$  concentration. Abs. of the Fifth International Conference on Radiation and Application in Various Fields of Research (RAD 2017; Budva, Montenegro). 2017. P.422.
51. Glushkov A.V, Ternovsky V.B., Mironenko D., Buyadzhi A.A., Nonlinear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime. Abs. of the 14th International Conference “Dynamical Systems - Theory and Applications” (Lodz, Poland). 2017. P.BIF319.
52. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., Non-linear dynamics of quantum and laser systems with elements of a

- chaos: Advanced computational code. Abs. of the 28<sup>th</sup> IUPAP Conference on Computational Physics (Gauteng, South Africa). 2016. P.6, 86 (ID-111).
53. Ternovsky V.B., Advanced relativistic energy approach to computing the radiation transition probabilities for heavy rydberg atoms. Abs. of the International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology” (Odessa, Ukraine, August 11-13, 2016). Odessa: OSENU. 2016. P.37.
54. Ternovsky V., Relativistic Energy Approach and Perturbation Theory in Description of Spectral Parameters of Heavy Atomic Systems. Abs. of the 24th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIV; Odessa, Ukraine). 2019. P.63.

## АНОТАЦІЯ

*Терновський В.Б.* Релятивістська спектроскопія важких атомів з урахуванням обмінно-кореляційних та радіаційних ефектів. - 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 та астрономія). - Одеський державний екологічний університет МОН України, Одеса, 2021.

Дисертаційна робота присвячена розробці розвитку прецизійної релятивістської теоретичної спектроскопії важких звичайних та екзотичних (каонних) атомних систем, розвитку основ нового формалізму комбінованої релятивістської теорії збурень (ТЗ) RMBPT з оптимізованим Dirac-Fock-Breit (ODF) нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу для розрахунку енергетичних, радіаційних, спектроскопічних характеристик важких атомів з прецизійним урахуванням релятивістських, ядерних ефектів та радіаційних КЕД поправок. На основі адіабатичного формалізму Gell-Mann & Low розвинуті основи нової калібрувально-інваріантної (QI) версії енергетичного підходу до прецизійного опису радіаційних та випромінювальних характеристик важких атомів з використанням формалізму QI ТЗ RMBPT з ODF й прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч. поляризаційної міжквaziчастинкової взаємодії, ефектів її екранування, ефектів швидкого “розмазування” вихідного стану по незоромому набору конфігурацій, суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиску та обліку станів континууму в межах узагальненої релятивістська ODF версії методу штурмовських розкладань. З використанням методу функцій Гріна з комплексною енергією та методу узагальненого радіаційного потенціалу типу Flambaum-Ginges FGRP розвинуто послідовний непертурбативний підхід до опису радіаційних КЕД поправок для важких атомів. Отримані результати розрахунку енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик групи важких атомних систем, у т.ч., енергій, ймовірностей, сил осциляторів E1 переходів  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  та E2 переходу  $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  в одноразово іонізованому атомі Hg<sup>+</sup>, енергій рівнів конфігурацій  $np^2$ ,  $npn's$  ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) та ймовірностей переходів  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$ , (лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) важкого атому свинцю, енергій рівнів та ймовірностей переходів та сил осциляторів

$4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2}$ ,  $4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{9/2,7,2}$  атому Eu I, спектру низько розташованих рівнів елемента ніхонія  $^{278}_{113}Nh$ , енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl, зокрема, конфігурацій  $7s$ ,  $6p_{1/2}$ ,  $7p_{1/2}$ ,  $6p_{3/2}$ ,  $7p_{3/2}$ ,  $6d_{3/2}$ ,  $6d_{5/2}$ ; енергії і сили осциляторів переходів  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6 < n < 30$ ),  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8 < n < 30$ ). Показано, що внесок за рахунок поляризації остову досягає 30% від значення сили осцилятора; величина QI внеску в радіаційну ширину складає долі проценту на відміну від усіх існуючих методів сучасної атомної спектроскопії, для яких внесок досягає 5-50%). Отримані дані для енергій рівнів конфігурацій  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  Yb, сил осциляторів переходів, зокрема,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , енергії, ширини автоіонізаційних резонансів (AR)  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}[^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ , енергії та ширини збуджених, у т.ч. AR Tm  $4f^{-1}_j\ 6s(J12)nsnp[J]$  з  $n=25-50$ , наведені значення енергій, ширин AR

$$4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J], \quad 4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J], \quad 4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)np_j[J], \quad 4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J],$$

$4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (розпад яких проходить як по стандартному каналу Бейтлера-Фано (BFD), так й новому для сучасної атомної спектроскопії каналу реорієнтаційного типу ROD, або по обидва каналам одночасно), а також дані по загальним радіаційним ширинам для станів  $4f_j^{-1}6s_{1/2}(J')n_R1_Rj_R[J]$  ( $j, J', j_R, J=1/2-5/2$ ; наведені дані для енергій орбіталей для урану  $^{92}U$ ), енергій рівнів для вищих членів різних рідбергівських серій. На основі стандартного атомно-спектроскопічного тесту на гладкість показано, що наведені у літературі (фактично єдині дані групи Solarz et al. [Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory]) дані по вказаним рідбергівським серіям  $^{92}U$  містять певні неточності. Системно виявлені унікальні особливості в AR спектроскопії Yb, Tm, U (взагалі узагальнено важких атомів типу лантанодів та актиноідів, урану тощо), пов'язані з аномально малими ширинами AR, що може бути пояснено складною некулонівською енергетикою відповідних атомних систем і одночасно дає суттєві переваги при пошуку нових оптимальних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів (той же уран, плутоній і т.і.).

Розвинуто новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку їх спектрів та спектроскопічних характеристик на основі рівнянь Klein-Gordon-Fock (каон) та Dirac (електронна підсистема) з одночасним урахуванням ядерних, релятивістських, радіаційних ефектів та ефектів сильної каон-ядерної взаємодії в рамках модифікованого методу оптичного потенціалу. Наведені дані для енергій 8i-7h, 8k-7i, 7h-6g переходів для азоту, енергетичних, спектроскопічних характеристик каонного вольфраму  $^{184}W$ , свинцю  $^{207}Pb$  та урану  $^{238}U$ . Розвинуто новий релятивістський підхід до розрахунку параметрів  $\beta$ -розпаду (дозволені переходів) важких систем, який базується на формалізмі RMBPT-ODF. Отримані дані по характеристикам серії  $\beta$ -розпадів  $^{63}Ni \rightarrow ^{63}Cu$ ,  $^{106}Ru \rightarrow ^{106}Rh$ ,  $^{155}Eu \rightarrow ^{155}Gd$ ,  $^{241}Pu \rightarrow ^{241}Am$  тощо; наведені чисельні дані по функції Фермі (FF) для  $\beta$ -розпаду при виборі різних визначень функції, оцінки впливу вибору виду атомного поля та впливу урахування обмінно-кореляційних ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру на характеристики  $\beta$ -розпаду, значення FF та інтегральної FF.



*Ключові слова:* релятивістська спектроскопія, енергетичні та спектроскопічні характеристики, важкі атоми та іони, релятивістська теорія збурень, оптимізований метод Дірака-Фока, ядерні, обмінно-кореляційні, радіаційні ефекти.

## ABSTRACT

*Ternovsky V.B.* Relativistic spectroscopy of heavy atoms with accounting for exchange-correlation and radiation effects. - Qualification work as a manuscript.

Dissertation for the degree of Doctor of Science in Physics and Mathematics in speciality 01.04.05 – optics and laser physics (104 - Physics and Astronomy). - Odessa State Environmental University of MES of the Ukraine, Odessa, 2021.

The dissertation is devoted to the development of precision relativistic theoretical spectroscopy of heavy ordinary and exotic (kaonic ) atomic systems, the development of the basics of the new formalism of the combined relativistic perturbation theory (PT) RMBPT with optimized Dirac-Fock-Breit (ODF) and generalized energy approach for calculation of energy, radiation, spectroscopic characteristics of heavy atoms with precise consideration of relativistic, nuclear effects and radiation KED corrections. Based on the adiabatic formalism of Gell-Mann & Low, the basics of a new gauge-invariant (GI) version of the energy approach to the precision description of the radiation QED characteristics of heavy atoms using the formalism GI RMBPT with ODF and precision-accounting are developed. including polarization inter-quasiparticle interaction, shielding effects, effects of rapid “smearing” of the initial state over an opaque set of configurations, essentially non-Coulomb grouping of levels in the Rydberg spectra, pressure and accounting of continuum states within the generalized relativistic method of the ODF version. Using the method of Green's functions with complex energy and the method of generalized radiation potential of the Flambaum-Ginges type, a consistent non-perturbative approach to the description of radiation QED corrections for heavy atoms has been developed. The results of calculation of energy, radiation and spectroscopic characteristics of the group of heavy nuclear systems, incl. , energies, probabilities, forces of oscillators E1 transitions  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ ,  $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$  and E2 transitions  $5d^96s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$  in a single ionized Hg + atom, energies of levels of configurations  $np^2$ ,  $n\bar{p}n'$ 's ( $n=6$ ,  $n'=7$ ) and transition probabilities  $6p^{23}P_J \rightarrow 7s^3P_J^o$ , (Лінії 2833.9, 3684.5, 4059A) of the lead atom, energies of levels and probabilities of transitions and oscillator strengths  $4f^7(^8S)6s^2\ ^8S_{7/2}$   $4f^7(^8S)6s6p\ ^8P_{5/2,7,2,9,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s7p\ ^8P_{5/2,7,2}$ ,  $4f^7(^8S)6s8p\ ^8P_{9/2,7,2}$  Eu I atom, the spectrum of low-lying levels of the element  $^{278}_{113}Nh$ , transition energies, oscillator forces and the probabilities of radiation transitions in the spectrum of the thallium atom Tl, in particular, conf.  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6<n<30$ ),  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8<n<30$ );; energy and power of transition oscillators  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2nd^2D_{3/2}$  ( $6<n<30$ ),  $6s^26p^2P_{1/2}-6s^2ns^2S_{1/2}$  ( $8<n<30$ ); It is shown that the contribution due to the polarization of the frame reaches 30% of the value of the oscillator power; the value of the QI contribution to the radiation width is a fraction of a percentage in contrast to 5-50% of all existing methods of modern atomic spectroscopy). Data obtained for

energies of configuration levels  $6p5d$ ,  $6p^2$ ,  $5d^2$ ,  $7s6p$  Yb, forces of transition oscillators, in particular,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s6p$ ,  $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 - 4f^{14}6s7p$ , energies, widths of autoionization resonances (AR)  $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ ,  $4f^{14}\ [^2F_{7/2}]\ 6s^2nf[5/2]_2$ , energies and widths excited, including AR Tm  $4f^{-1}_j\ 6s(J12)nsnp[J]$   $3\ n=25-50$ , given values of energies, widths AR  $4f^{13}_j\ 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_j\ 6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_j\ 6s_{1/2}(3)np_j[J]$ ,  $4f^{13}_j\ 6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[J]$ ,  $4f^{13}_j\ 6s_{1/2}(2)np_j[J]$  (decay of which takes place both on the standard Baitler-Fano channel (BFD) and new for the modern atomic spectroscopy of the channel of reorientation type (ROD), or on both channels simultaneously), and also data on total radiation widths for states  $4f^{-1}_j\ 6s_{1/2}(J')n_{R1}j_{R2}[J]$  ( $j, J', j_R, J$ )= $1/2-5/2$ ; Data for orbital energies for uranium 92U), level energies for higher members of different Rydberg series are given. Based on the standard atomic spectroscopic test for smoothness, it is shown that the data in the literature (actually the only data of Solarz et al [Lawrence Livermore Laboratory & Los Alamos Sci. Laboratory]) data on these Riedberg series 92U contain some inaccuracies. Unique features in AR spectroscopy of Yb, Tm, U (generally heavy atoms such as lanthanides and actinides, uranium, etc.) associated with abnormally small widths of AR have been systematically identified, which can be explained by the complex non-Coulomb energy of the corresponding atomic systems. at the same time it gives significant advantages in the search for new optimal laser-photoionization schemes for the separation of heavy isotopes (the same uranium, plutonium, etc.). A new consistent relativistic approach to the calculation of their spectra and spectroscopic characteristics based on the Klein-Gordon-Fock (kaon) and Dirac (electronic subsystem) equations has been developed, taking into account nuclear, relativistic, radiation effects and the effects of strong kaon-nuclear interactions. within the modified method of optical potential. Data for energies of  $8i-7h$ ,  $8k-7i$ ,  $7h-6g$  transitions for nitrogen, energy, spectroscopic characteristics of kaon tungsten  $^{184}W$ , lead  $^{207}Pb$  and uranium  $^{238}U$  are given. A new relativistic approach to the calculation of  $\beta$ -decay parameters is developed. ) heavy systems, which is based on the RMBPT-ODF formalism. The data on the characteristics of the series of  $\beta$ -decays  $^{63}Ni \rightarrow ^{63}Cu$ ,  $^{106}Ru \rightarrow ^{106}Rh$ ,  $^{155}Eu \rightarrow ^{155}Gd$ ,  $^{241}Pu \rightarrow ^{241}Am$  etc . Numerical data on the Fermi function (FF) for beta-decay are given when choosing different definitions of the function, estimating the influence of the choice of the atomic field type, taking into account exchange-correlation effects in discrete and continuous wave functions on  $\beta$ -decay characteristics, FF and integral FF values.

*Key words:* relativistic spectroscopy, energy and spectroscopic characteristics, heavy atoms and ions, relativistic perturbation theory, optimized Dirac-Fock method, nuclear, exchange-correlation, radiation effects.

Підписано до друку 13.08.2021р.  
Обсяг 1,9 авт.арк. Формат 60х84/16  
Тираж 100 прим. Папір офсетний. Зам. № 1313

Надруковано у друкарні видавництва «Астропринт»  
(Свідоцтво ДК № 1373 від 28.05.2003 р.)  
м. Одеса, вул. Разумовська, 21.  
Тел./факс: (0482) 37-14-25, 37-24-26, 33-07-17.  
**[www.astroprint.odessa.ua](http://www.astroprint.odessa.ua); [www.fotoalbom-odessa.com](http://www.fotoalbom-odessa.com)**

