

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

/



Кузнєцова Ганна Олександрівна

УДК 539.184: 539.192

**ТЕОРЕТИЧНА СПЕКТРОСКОПІЯ СКЛАДНИХ АТОМНИХ СИСТЕМ В
ІНТЕНСИВНОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ**

01.04.05 – оптика та лазерна фізика

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

ОДЕСА – 2021

Дисертацією є рукопис.

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

Науковий консультант: 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 і прикладної фізики Національного авіаційного університету (м. Київ), Заслужений діяч науки і техніки України

доктор фізико-математичних наук, професор Усов Валентин Валентинович, професор кафедри технологічної і професійної освіти Південно-Українського національного педагогічного університету

доктор фізико-математичних наук, професор Шевчук Володимир Гаврилович, професор кафедри загальної фізики і фізики тепло-енергетичних і хімічних процесів Одеського національного університету ім. І.І. Мечникова

Захист відбудеться “30” вересня 2021 р. о 14³⁰ 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 “30” серпня 2021р.

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



О.Ю. Хецеліус

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Сучасна теоретична оптика та спектроскопія атомних систем, лазерна фізика та суміжні фізичні галузі характеризуються бурхливим розвитком, пов'язаним, з одного боку, з безпрецедентним прогресом сучасних експериментальних методів та технологій завдяки появі інтенсивних та над інтенсивних джерел когерентного лазерного випромінювання імпульсів от декількох десятків фемтосекунд до одиниць піко секунд і можливостями досягнення пікових інтенсивностей від 10^{19} Вт/см² до перспективних релятивістських та вище $\sim 10^{24}$ Вт/см² (мова тут йде насамперед про сучасні типи лазерів на вільних електронах, таких як TESLA, XFEL тощо), активному використанню методів beam-foil спектроскопії, магнітно-оптичних пасток з отриманням одиничних рідбергівських атомів, колайдерної та прискорювальної техніки тощо. Природно такий прогрес призвів до відкриття цілої низки унікальних оптичних явищ, ефектів, у тому числі, відкриття нового стану речовини, а саме, рідбергівської матерії, отримання і відкриття унікальних властивостей бозе-конденсату у парах рідбергівських атомів лужних елементів, отримання фонтанів холодних рідбергівських атомів, виявлення ефектів незберігання парності у атомно-ядерних системах, з'ясування властивостей анапольного ядерного моменту, варіацій фундаментальних сталих (наприклад, сталої тонкої структури), бездисипативного загасання осциляцій Рабі в квантовому полі резонатора, або колапсу Каммінгса, субвипромінювання Діке, фіксації нетривіальних процесів в одноатомних мазерах, унікальних багатофотонних явищ та ефектів квантової оптики і атомної спектроскопії, взагалі групи нових нелінійних ефектів кооперативної лазерної електрон-альфа-бета-гамма-ядерної спектроскопії атомів та молекул, а також Оже, автоіонізаційної, NEEC, NEET квантової оптики та спектроскопії. Важливо зазначити, що часто основою для всіх нових унікальних фізичних явищ та оптичних ефектів є абсолютно нетривіальна, природно досить складна динаміка різноманітних атомних систем, у тому числі, в рідбергівських станах, гібридних квантових систем, важких систем з ярко вираженою некулонівською фізикою рідбергівських спектрів в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному полі, а також полі теплового (black-body radiation, BBR) випромінювання.

Докладний аналіз сучасного розвитку теоретичних методів квантової механіки, квантової електродинаміки, оптики та спектроскопії атомів у інтенсивних електромагнітних полях, показує, що не дивлячись на їх досить велику кількість (від спрощених моделей типу кулонівського наближення та методу квантового дефекту, залежних від часу методів самоузгодженого поля типу Дірака-Фока (DF), Хартрі-Фока (HF) тощо до більш потужних методів типу різних версій R-, S- матричного формалізму, методу зв'язаних кластерів, методів розв'язання комплексного рівняння Шредінгера та Дірака, комплексного потенціалу та обертання комплексних координат, методу функцій Гріна та інших) більшість з них описують енергетичні, радіаційні та спектральні характеристики атомних систем і ансамблів з адекватною точністю тільки переважно

у досить слабких та середньої інтенсивності полях, фактично за умови справедливості наближень типу квазікласичного, або методу асимптотичних фаз, коли відповідні резонанси в атомних спектрах досить добре відокремлені один від одного.

У випадку сильних електромагнітних полів (з виникненням явищ релятивістського квантового оптичного хаосу, сильної міжрезонансної взаємодії), у дослідженнях складних багатоелектронних або суттєво релятивістських атомних класичних систем, або гібридних квантових систем виникають принципово нові класи проблем, обумовлені як сильно польовими ефектами типу феномену факторіального зростання Дайсона, суттєво некулонівською фізикою рідбергівських систем, та/або традиційні факторами внаслідок недостатньо прецизійного рівня одночасного урахування релятивістських, обмінно-поляризаційних та радіаційних (на рівні квантової електродинаміки) ефектів, невиконання принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках амплітуд радіаційних процесів, повільної збіжністю ряду теорії збурень (ТЗ) для енергії, недостатньою оптимізації базисів релятивістських орбіталей, накінець, неврахування в сучасних квантових або КЕД теоріях нетривіальних температурних факторів і т.і.

Можна констатувати, що на сьогодні в сучасній атомній оптиці та спектроскопії атомних (ядерних, молекулярних) систем є гостра необхідність розвитку принципово нових адекватних методів та теорії опису їх характеристик в сильних зовнішніх електромагнітних полях; оскільки відповідні прецизійні дані є принципово потрібними для таких галузей та додатків як атомна, лазерна, ядерна фізика та квантова електроніка, фізика плазми, астрофізика, оптика і спектроскопія бозе-конденсату у парах рідбергівських атомів, фонтанів холодних рідбергівських атомів, оптика та термодинаміка рідбергівської матерії, теорія оптичних (атомних) стандартів частоти, атомних годинників, радіаційних машин Карно, квантова оптика, інформатика, криптографія, квантовий комп'ютинг, нарешті, розробки сучасних ефективних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів та ядерних ізомерів, побудова принципово нових лазерних, разерних, гразерних та мазерних систем на нових фізичних принципах та з використанням нових квантово-гібридних систем.

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 (2011–2021): ”Квантово-механічні методи розрахунку атомно-молекулярних систем у зовнішніх електричному і лазерному полях. Нелінійні селективні фотопроекти в атомах і молекулах”, “Квантово-механічні методи розрахунку ядерних, атомних і молекулярних систем у зовнішніх електричному, магнітному і лазерному полях. Динамічний хаос в атомних і мультіосциляторних системах”, “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, 2014–2018pp.), “Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної, молекулярної спектроскопії”, № держр. 0116U002097, 2016–2020pp.), “Розрахунок енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів та багатозарядних іонів на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень” (2019–2023), “Розвиток та застосування хаос-геометричних та квантово-динамічних методів дослідження спектрів і динаміки лазерних систем та приладів надвисокочастотної електроніки” (2019–2023), а також проектів фундаментальних досліджень МОН України “Прогнозування стану і безпеки навколишнього середовища з урахуванням антропогенного, радіоактивного забруднення, радіаційно-екологічних наслідків аварій на АЕС: Нові моделі і технології” (№ держр. 0115U000632, 2015–2017pp.), “Комплекс нових стохастично-гідродинамічних та атомно-діагностичних моделей моніторингу антропогенного забруднення атмосфери промислових міст та “Green City” технологія” (№ держр. 0117U000622, 2017–2019pp.).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є розробка теоретичних основ нової релятивістській спектроскопії багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному полі, а також полі теплового випромінювання з одночасним послідовним урахуванням релятивістських, фотон-кореляційних, обмінно-поляризаційних ефектів на основі формалізму релятивістської операторної теорії збурень, енергетичного формалізму та калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фок-слетеровським нульовим наближенням.

Для досягнення мети дослідження були сформульовані такі завдання:

- розвинути новий послідовний релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому постійному електричному полі (DC ефект Штарка) довільної сили;
- розробити новий послідовний підхід до обчислення енергій та ширин штарківських резонансів для атомів у зовнішньому постійному електричному полі (DC ефект Штарка) довільної сили;
- розвинути нову процедуру розрахунку матричних елементів (амплітуд) операторів на базисах хвильових функцій, згенерованих у нульовому наближенні теорії збурень типу Дірака-Фока-Слетера;
- розробити новий послідовний суттєво релятивістський підхід до розрахунку фундаментальних енергетичних та спектроскопічних параметрів атомних систем, у тому числі, атомних поляризуємостей, який базується на формалізмі багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера та прецизійним урахуванням важливих обмінно-кореляційних ефектів;
- провести розрахунки енергій та ширин штарківських резонансів в спектрі атому літію, натрію, калію, рубідію, цезію;

– виконати ретельну перевірку й пошук можливості реалізації ефекту повного скейлінгу в залежностях наведених енергій і ширин підпорогових, і біля порогових штарковських резонансів від наведеної напруженості;

– провести розрахунки енергій та ширин автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрах рідкоземельних атомів Yb, Gd, Tm, й з'ясувати динаміку під впливом зовнішнього електричного поля;

– провести розрахунки енергій, амплітуд радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризованостей для низки атомів лужних елементів, інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm);

– розвинути новий релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка) довільної сили і провести детальне вивчення динаміки іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з різноманітними параметрами;

– розробити нову релятивістську схему розрахунку швидкості іонізації високо збудженого атома в світловому та електричному полях;

– розвинути нову релятивістську *ab initio* теорію визначення енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик, у тому числі, швидкостей іонізації атомів, VBR зсувів частот атомних переходів (в атомних годинниках) з урахуванням основних обмінно-поляризаційних ефектів як поправок другого та вище порядків ТЗ;

– провести розрахунки величин радіаційних ширин рівнів, ефективного часу життя, швидкості VBR-іонізації, коефіцієнту штарківського зсуву k , параметру VBR зсуву β частот атомних переходів для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів атомів лужних елементів Na, K, Rb, Cs для різних температур $T=77, 300, 600\text{K}$;

Об'єкт дослідження – теоретична атомна оптика і спектроскопія, багатоелектронні атомні системи, рідбергівські атоми.

Предмет дослідження – теоретична спектроскопія та квантова динаміка атомних систем в зовнішніх інтенсивних електричному, електромагнітному полях, полі теплового випромінювання.

Методи дослідження: методи квантової оптики та атомної спектроскопії, класичної та квантової механіки, оптики, квантової електродинаміки, квантової теорії випромінювання; методи математичної фізики, методи обчислювальної та комп'ютерної математики тощо.

Наукова новизна отриманих результатів, насамперед, пов'язана з розвитком нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії, а саме, теоретичної релятивістської спектроскопії багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному, а також полі теплового VBR випромінювання з одночасним, послідовним урахуванням релятивістських, фотон-кореляційних, обмінно-поляризаційних ефектів, а також ефектів суттєво некулонівського групування рівнів в рідбергівських спектрах, й включає такі аспекти:

1). Вперше в теоретичній атомній спектроскопії розвинутий новий релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому електричному полі (ДС ефект Штарка) *будь-якої сили* на основі релятивістської операторної теорії збурень і багаточастинкової релятивістської ТЗ з *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетеру, у т.ч., новий релятивістський метод розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів для атомів у зовнішньому постійному електричному полі (ДС ефект Штарка) довільної сили у наближенні “distorted waves”.

2). Вперше в теоретичній спектроскопії атому у зовнішньому електричному полі для побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення в межах релятивістського енергетичного підходу використовується фундаментальний принцип мінімізації енергетичного функціонала, який представляє собою внесок фактично так званих колективних ефектів, які описуються групою багаточастинкових обмінно-поляризаційних діаграм другого (в атомній теорії збурень ТЗ) або четвертого (в квантово-електродинамічній КЕД ТЗ) порядку.

3). Вперше представлено новий суттєво релятивістський підхід до розрахунку атомних поляризуємостей на основі формалізму багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера DFS та максимальною прецизійним урахуванням важливих обмінно-поляризаційних ефектів як ефектів другого та вище порядків ТЗ з використанням узагальненої релятивістської процедури штурмовських розкладань та методу релятивістських функції Гріна для ефективного урахування континууму при обчисленні сум другого порядку ТЗ.

4). Вперше із спектроскопічною точністю представлені дані (частина отримана взагалі вперше) для енергій та ширин штарківських резонансів в спектрі атому Li в рідбергівських станах з $n=15$, $n_1, n_2=0, 1; 13, 14$; $m=0$ при напруженостях електричного поля $\varepsilon=2100, 2500$ В/см; Na при $\varepsilon=3.59$ кВ/см і $n_1=22-26$ ($n_2=0, 1$; $m=0$); в атомі Rb при $\varepsilon=2.189, 6.416$ кВ/см і $n_1=18-23$ ($n_2=0-2$; $m=0$); атомі K при $\varepsilon=3.59$ кВ/см, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1$; $m=0, 1$) і в атомі Cs при $\varepsilon=2.25, 8.25$ кВ/см і $n_1=16-22$ ($n_2=0-2$; $m=0$) і показано, що суттєве значення для досягнення адекватної точності має урахування обмінно-поляризаційних ефектів особливо для атомів та квантових станів, де величина квантового дефекту є суттєвою.

5). Вперше уточнені границі ефекту скейлінгу в залежностях наведених енергій $\varepsilon_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ і ширин $\gamma_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ як підпорогових, так і біляпорогових штарківських резонансів від наведеної напруженості електричного поля $F=\tilde{n}^4 \varepsilon$ для атомів водню та лужних елементів Na, K, Rb, Cs, Fr, що уточнює класичні результати Попова та інш., причому для важких атомів цезію та францію цей ефект виявлений вперше нами.

6). Вперше із спектроскопічною точністю представлені дані для енергій та ширин автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі рідкоземельного атому Yb, зокрема, автоіонізаційних резонансів, які розпадаються за схемою $4f^{13}6s^27nl \rightarrow 4f^{14}6skl$; відкрито нове явище суттєвого уширення резонансів, їх інтенсивної взаємодії для станів $4f^{13} [{}^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2, 4f^{13}$

$[^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{13}[^2F_{7/2}]6s^2nd$ для різних значень величини напруженості електричного поля $F=0-150$ В/см; показано, що відмінна згода для параметрів рідбергівських, автоіонізаційних штарківських резонансів ітербію $4f^{13}6s^2np$, $4f^{13}6s^2nf$ з $n>20$, $J=2^-$, $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=13-19$) в енергетичному інтервалі 22220–22405 см^{-1} та резонансів $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ в ($n=28-36$) в енергетичному інтервалі 71665–71745 см^{-1} з даними прецизійних експериментів з багатофотонної іонізаційної спектроскопії Jong-hoon Yi et al (2001) обумовлена прецизійним урахування обмінно-поляризаційних поправок й використанням оптимізованих базисів орбіталей тощо.

7). Вперше теоретично показано, що ширини автоіонізаційних рідбергівських резонансів в Gd, які збуджуються в межах 3-ступінчастої лазерно-іонізаційної схеми Letokhov et al з основного стану $4f^7 5d 6s^2 9D_2^0$ в $4f^7 5d 6s 6p^9 D_4^0$ стан і далі в $4f^7 5d 6s 7s^9 D_4^0$ стан в енергетичному інтервалі 6300–6100 А, зокрема, резонанс на довжині хвилі 6133.5 А відчувають радикальні зміни (в рази) із зростанням напруженості електричного поля (як приклад, змінення ширини резонансу 6133.5 А в Gd від $\Gamma=0,074$ см^{-1} до $\Gamma=0.34$ см^{-1} (експеримент $\Gamma=0.35$ см^{-1}) при $F=100$ В/см.

8). Вперше із спектроскопічною точністю представлені дані для параметрів автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі складного атома тулію Tm, зокрема, ширин та енергій рідбергівських станів $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)ns[5/2]$, ($n=25, 26$), які змішуються під впливом зовнішнього електричного поля напруженості до 150 В/см з резонансними станами протилежної парності $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)np_{1/2}[5/2]$ ($n=25, 26$) і для шуканих резонансів відкрито явище гігантського розширення резонансів.

9). На прикладі акуратних релятивістських розрахунків амплітуд (матричних елементів) радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризуємостей для низки атомів лужних елементів та інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm) показано принципове значення для отримання адекватної точності опису прецизійного, одночасного урахування релятивістських, одно-та багато-квазічастинкових обмінно-поляризаційних, ефектів, у т.ч., ефекту суттєво некулонівського групування рівнів, використання оптимізованих з точки зору виконання фундаментального принципу калібрувальної інваріантності базисів релятивістських квазічастинкових хвильових функцій.

10). Вперше в теоретичній атомній спектроскопії викладено новий релятивістський підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка) будь-якої сили на основі формалізму релятивістської операторної ТЗ та багаточастинкової релятивістської ТЗ оптимізованим ab initio нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера з використанням концепції квазістаціонарних, квазіенергетичних станів і елементів методу комплексного обертання координат.

11). Вперше в рамках нового релятивістського підходу реалізовано нову схему розрахунку характеристик іонізації багатоелектронних атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка), яка приводить до стаціонарної задачі на власні значення і власні вектори енергетичної матриці A (з розглядом кількох флоківських зон) з використанням оптимізованих базисів, згенерованих в рамках релятивістської операторної ТЗ і де власні стани є фактично резонансами розсіювання при комплексній енергії: $E \rightarrow E - i\Gamma/2$.

12). Вперше у послідовному релятивістському наближенні отримані нові дані для характеристик іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$ ат. од., частота $\omega/2\pi=8.87$ ГГц, $\omega/2\pi=15$ ГГц, $\omega/2\pi=36$ ГГц, зокрема, залежностей ймовірності іонізації P від амплітуди поля, значень ефективного квантового числа n^* і часу взаємодії «атом-поле» (причому для атому тулію представлені взагалі вперше в літературі) з виявленням суттєво нерегулярної структури змін спектрів квазіенергій при зміні амплітуди поля, спектра Флоке, зростанням впливу багатофотонних резонансів на зв'язок між групою майже вироджених власних станів системи «атом-поле», автоіонізаційними резонансами та континуумом.

13). Вперше представлено нову релятивістську схему розрахунку швидкості іонізації високо збуджених атомів в одночасно світловому та електричному полях (на прикладі атомів рубідію в електричних полях з напруженістю до 30 кВ/см) на основі апарату релятивістської операторної ТЗ (ROPT) та формалізму багаточастинкової релятивістської ТЗ (RMBPT) з оптимізованим ab initio нульовим локальним наближенням, і надані конкретні оцінки щодо енергетики оптимальних схем методу селективної фотоіонізації атомів з іонізацією імпульсним електричним полем, автоіонізацією через високо розташовані рідбергівські стани, вузькі автоіонізаційні резонанси, які можуть бути ефективно використані в надто актуальних сучасних задачах лазерного поділення ізотопів та ядерних ізомерів.

14). Вперше представлена нова релятивістська ab initio теорія визначення енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик (швидкостей іонізації, АС штарківського зсуву, VBR зсувів частот атомних переходів в атомних годинниках, додаткових VBR ширин, обумовлених ефектом змішування атомних станів зовнішнім електричним полем) на основі узагальненого температурно-залежного релятивістського енергетичного підходу і S-матричного формалізму Gell-Mann та Low, калібрувально-інваріантної методології Glushkov-Ivanov, КЕД теорії атому водню Solov'yev-Labzowsky-Plunien, з використанням виразу для фотонного пропагатора типу Donoghue-Holstein, який містить й теплову частину, яка враховує відомий планківський частотний розподіл для фотонів теплового резервуару.

15). В межах нового релятивістського підходу до визначення характеристик рідбергівських атомів у полі VBR випромінювання вперше розроблені та реалізовані ефективні і максимально послідовні процедури перевірки виконанням принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках радіаційних

амплітуд (ширин), мінімізації калібровочно-неінваріантних ΔE_{niv} внесків у радіаційні ширини атомних рівнів, узагальнена схема Dirac-Fock-Slater-Sturm для урахування станів континуума, коректного урахування основних обмінно-поляризаційних ефектів як поправок другого та вище порядків ТЗ, у тому числі, ефектів поляризаційної взаємодії через поляризуємий остов, взаємодії з фотонним вакуумом через остов, некулонівського групування рідбергівських рівнів, тиску континууму тощо.

16). Вперше із спектроскопічною точністю представлені дані для величин радіаційних ширин рівнів, ефективного часу життя, швидкості VBR-іонізації, коефіцієнту штарківського зсуву k , параметру VBR зсуву β частот атомних переходів для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів атомів лужних елементів Na, K, Rb, Cs для температур $T=77, 300, 600$ K в широкому інтервалі змінення величини головного квантового числа $n=10-90$ і показано, що, зокрема, для рідбергівських станів з $n=20-40$ спостерігається відхилення результатів квазікласичних та модельних розрахунків від експерименту, що пов'язано з неврахуванням принципово важливих внесків досить складних обмінно-поляризаційних ефектів, які в нашій теорії враховані достатньо коректно разом з використанням оптимізованих базисів релятивістських орбіталей.

Практичне значення одержаних результатів. Представлені в роботі нові методи опису енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик складних атомних систем в інтенсивних зовнішніх DC електричному, AC електромагнітному полях, а також полі теплового випромінювання і наведені на їх основі багаточисленні конкретні дані для відповідних характеристик безумовно мають бути корисно використані при розв'язанні численних прикладних задач сучасної атомної, ядерної та молекулярної оптики, фізики гібридних квантових систем, фізики лазерів, разерів, гразерів, резонаторів та рідбергівських мазерів, та квантової електроніки, астрофізики, астроспектроскопії, фізики Сонця, атмосфери та полярних сьйв, плазмохімії та фізики астрофізичної, лабораторної, лазерної, ультрахолодної та криогенної плазми тощо. Слід особливо підкреслити суттєве прикладне значення отриманих результатів для таких нових напрямків сучасної теоретичної фізики, оптики як фізика, оптика і спектроскопія бозе-конденсату у парах рідбергівських атомів, фонтанів холодних рідбергівських атомів, оптика та термодинаміка нового стану речовини, а саме, рідбергівської матерії.

Слід додати, що представлені результати безпосередньо є важливими й для розвитку принципово нових експериментальних методів лазерної спектроскопії, магнітно-оптичних пасток, техніки детектування сигналів НВЧ випромінювання на квантовому рівні чутливості, оптичних (атомних) стандартів частоти, атомних годинників, й на кінець, побудови нових квантових стандартів для вимірювання фундаментальних сталих (їх варіацій), тестування фундаментальних фізичних постулатів, побудови атомно-радіаційних машин Карно, сумісних задач у квантовій оптиці, інформатиці, криптографії, квантовому комп'ютингу, інтерферометрії, і накінець, для розробки сучасних ефективних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів з використанням рідбергівсь-

ких, автоіонізаційних, штарківських резонансів, а також побудови принципово нових автоіонізаційних лазерних систем короткохвильового діапазону з використанням вузьких резонансів, а також принципу силової автоіонізації.

Особистий внесок здобувача. Всі наукові результати, представлені в дисертації, положення та висновки, що становлять основний зміст дисертації, отримані авторкою самостійно. Основу дисертаційної роботи складають публікації у високо рейтингових міжнародних фахових журналах та виданнях, зокрема, видавництва Springer, IOP, Intech (входять до науково-метричних баз Scopus and Web of Science), фахових виданнях України та інш. [1–64]. У більшості з цих публікацій авторка особисто формулювала задачі, обґрунтовувала вибір об'єктів досліджень, розвивала теорії, виконувала обчислення і формулювала основні висновки. У статтях [3, 4, 24, 25] авторка спільно з науковим консультантом проф. А. Глушковим О.В. брала участь у постановці задачі, проведенні розрахунків, інтерпретації отриманих результатів, підготовці публікацій.

У публікаціях [18, 24, 25] автор приймала участь у проведенні розрахунків, інтерпретації отриманих результатів, частковій підготовці публікацій та доповідей для конференцій. В [2, 12, 10, 17] автору належать тільки дані, які стосуються виключно спектроскопії атомних систем в електричному, або електромагнітному полі. Взагалі, всі представлені в роботі методи та результати, що мають безпосереднє відношення до теоретичної спектроскопії атомних систем в інтенсивному зовнішньому DC електричному полі, змінному AC електромагнітному полі, а також полі теплового VBR випромінювання з урахуванням як обмінно-поляризаційних, так й фотон-кореляційних ефектів, отримані авторкою особисто та складають основи нового наукового напрямку в сучасній атомній оптиці та спектроскопії.

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

– International Conference on Quantum Theory: Reconsideration of Foundations-6 (Linnaeus Univ., Linnaeus, Sweden, 2012), XVIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Paraty-Rio de Janeiro, Brasil, 2013), 20th Central European Workshop on Quantum Optics (Stockholm, Sweden, 2013), International Symposium on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (Odessa, Ukraine, 2015), International Conference on Quantum Geometry, Dynamics and Spectroscopy (Odessa, Ukraine, 2015), International Nuclear Physics Conference (Adelaide, Australia, 2016), 8th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2016; Kielce, Poland, 2016), 13th SPARC Topical Workshop Jagiellonian University (Kraków, Poland, 2016), 23rd 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), 28th 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), 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists Munich, Germany, 2017), 29th 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), 15th 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; *член оргкомітету*), IV International Conference “Advances in Atomic, Nuclear and Laser Optics and Spectroscopy” (Odessa, Ukraine, 2020),

а також та наукових семінарах інституту математики, фізики та інформатики і науково-дослідного інституту фізики Одеського національного університету ім. І. Мечникова, Національного університету “Одеська політехніка”, Одеського державного екологічного університету (ОДЕКУ), а також Технічних університетів 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 у 63 наукових публікаціях, зокрема, 1 колективній монографії, 34 статтях у високо рейтингових міжнародних та вітчизняних фахових журналах та виданнях, зокрема видавництва Springer, IOP, Intech (у тому числі, тих, що входять до науково-метричних баз Scopus та/або Web of Science) та 28 тезах і матеріалах доповідей на міжнародних наукових конференціях, конгресах, 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 342 сторінок, обсяг основного тексту - 266 сторінок. Робота ілюстрована 26 рисунками та містить 55 таблиць. Список використаних джерел складає 303 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

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

В першому розділі охарактеризований сучасний стан розвитку теоретичної оптики та спектроскопії атомів. Для адекватного розуміння ключових фундаментальних проблем сучасної фізики атомних систем в інтенсивних та понад інтенсивних зовнішніх полях електромагнітного випромінювання дуже важли-

вим є наявність відповідних прецизійних послідовних теоретичних підходів розрахунку енергетичних та спектральних параметрів атомів, у тому числі, енергій та ширин штарківських, зеєманівських, рідбергівських, автоіонізаційних резонансів, а також розробка нових високо точних підходів до опису динаміки та спектроскопії атомів у певних фізичних умовах, обумовлених потребами нових сучасних фізичних додатків. В рамках огляду ретельно розглянуті якісні аспекти спектроскопії атомів в однорідному електричному (електромагнітному) полі, наданий аналіз основних теоретичних методів розрахунку енергетичних, спектральних та радіаційних характеристик атомів в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному полях, а також полі теплового VBR випромінювання, зокрема, проаналізовані найбільш послідовні та популярні методи розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів в спектрах атомів в електричному, або електромагнітному полях. Серед шуканих методів слід згадати такі методи як різноманітні версії звичайної ТЗ, в яких, як правило, обмежуються лише поправками низьких порядків, далі різні схеми підсумовування розбіжних рядів ТЗ для атома в полі (Паде, Бореля та інші), ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення, а також з наближенням Хартрі-Фока (ХФ) або Dirac-Fock (DF) наближенням, нерелятивістські підходи, що базуються на прямому чисельному розв'язанні рівняння Шредингера, модель Келдиша, її модифікації, методи Floquet, Dalgano-Lewis, WKB, R-, K-матричні методи, метод квантового дефекту, метод комплексного потенціалу, метод обертання комплексних координат тощо.

Більшість прямих методів розрахунку атомів у змінному полі фактично базується на формалізмі квазістаціонарних, квазіенергетичних станів (QQES), методі комплексного обертання координат (CCR; цей метод отримав широке використання й раніше успішно застосовувався в різних задачах квантової механіки на квазістаціонарні стани, наприклад, задачах про атом водню в статичних полях, задачі обчислення амплітуд розсіювання електрона на атомі водню, ряді молекулярних задач і т.і.), спрощених версіях операторної ТЗ Glushkov-Ivanov, методі функцій Гріна тощо.

В цілому слід зазначити, що для переважної частини методів опису взаємодії атомів з електромагнітним полем до ключових недоліків слід віднести недостатньо швидка збіжність відповідних рядів ТЗ, феномен Дайсона для полів високої інтенсивності, взагалі невисоку точність розрахунку матричних елементів операторів, невиконання фундаментального принципу калібрувальної інваріантності, використання неоптимальних базисів орбіталей, недостатньо повне й прецизійне урахування складних багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч., ефектів поляризаційної взаємодії з фотонним вакуумом через атомний остов, некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах із появою нової нелінійної фізики у випадку важких систем тощо, плюс додатково фотон-кореляційних та сильно-польових ефектів

В другому розділі викладені теоретичні основи нового послідовного релятивістського підходу до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому електричному полі (DC ефект Штарка) довільної сили, який базується на релятивістській операторній теорії збурень і апараті багаточастинко-

вої релятивістської ТЗ з ab initio локальним DFS нульовим наближенням, і відповідно нового методу обчислення енергій та ширин ДС штарківських резонансів у наближенні “distorted waves”. При наявності інтенсивного електричного поля напруженості F повний гамільтоніан релятивістської N -електронної атомної системи запишеться у вигляді:

$$H = \sum_i \{h(r_i) + zF\} + \sum_{i>j} V(r_i r_j) \quad (1)$$

де h_i - одночастинковий гамільтоніан, який містить кулонівський потенціал ядра ($-Z/r$), декотрий потенціал $V_C(r)$ – самоузгодженого поля, який імітує потенціал електронної хмари. Одноквазічастинковий гамільтоніан має вигляд:

$$H = \alpha c p + \beta c^2 - \frac{Z}{r_i} + V_C(r) + Fz, \quad (2)$$

де α - матриці Дірака, Z – заряд ядра, c – швидкість світла.

Фактично на базисі власних функцій (2) далі з використанням стандартних рецептів розвивається апарат релятивістської ТЗ з оператором збурення, який містить просто релятивістський потенціал міжелектронної взаємодії за виключенням компенсаційного члену з потенціалом $V_C(r)$. Базис містить функції (для опису станів певної симетрії з моментом J та парністю P), напр., дірак-фок-слетерівського (DFS) типу:

$$\Psi_{PJ}^{a,M} = 1/r \begin{pmatrix} F(r)Y_{l'}^M(n, \sigma) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3a)$$

$$\Psi_{PJ}^{b,M} = 1/r \begin{pmatrix} 0 \\ iG(r)Y_{l'}^M(n, \sigma) \end{pmatrix}, \quad (3b)$$

і далі виконується діагоналізація відповідного (2) гамільтоніану. Елементарний аналіз показує, що ненульовими будуть матричні елементи гамільтоніану (2) тільки між станами з однаковими M_J . Загальний релятивістський підхід для атому в електричному полі включає чисельне розв'язання системи стандартних діраківських рівнянь. Відповідні ширини штарківських резонансів визначаються квадратом матричного елемента від повного гамільтоніану атому в електричному полі; для розрахунку ширини Γ конкретного квазістаціонарного стану в нижчому порядку використовуються власні функції гамільтоніану нульового наближення, зокрема, функції пов'язаного стану і функції стану розсіювання з однією і тією ж власною енергією. Для спрощення обчислювальної процедури, однорідне електричне поле, згідно з ідеологією операторної ТЗ Glushkov-Ivanov (J.Phys. B: At.Mol.Opt.Phys., 1993) замінюється полем форми:

$$F(t) = \varepsilon(t) = \frac{1}{t} \varepsilon \left[(t - \tau) \frac{\tau^4}{\tau^4 + t^4} + \tau \right] \quad (4)$$

з досить великим τ (напр., $\tau=1.5t_2$). Функція $F(t)$ практично збігається з константою ε у внутрішньо бар'єрній області руху ($t < t_2$, друга точка повороту) і зникає при $t \gg t_2$. Мініміально прийнятне значення τ , яке не впливає на кінцеві результати, підбирається чисельно. Крім чисто технічної зручності, випадок асимптотично зникаючого поля уявляється більш реалістичним з фізичної точ-

ки зору. На асимптотиках маємо справу з вільним (без електричного поля) рухом електрона (ефективне хвильове число: $k=[E/2+\varepsilon\tau/4]^{1/2}$). Енергетичний спектр станів розсіювання розташований в області $(\varepsilon\tau/2, +\infty)$ (нагадаємо, в однорідному полі маємо $(-\infty, +\infty)$). Повний гамільтоніан H атома в однорідному електричному полі не має зв'язаних стаціонарних станів. У операторній ТЗ гамільтоніан нульового наближення визначається таким чином, щоб його спектр якісно відтворював спектр повного гамільтоніану. При цьому також спектр власних енергій гамільтоніану нульового наближення H_0 , в протилежність повному H , включає енергії стаціонарних станів.

Для розрахунку ширини Γ конкретного квазістаціонарного стану в нижчому порядку ТЗ є необхідним знання функцій зв'язаних станів Ψ_{Eb} та функцій станів розсіювання Ψ_{Es} з однією і тією ж власною енергією. Уявна частина енергії (що визначає ширину резонансу) для певного стану в нижчому порядку ТЗ має вигляд:

$$\text{Im } \delta E = \frac{\Gamma}{2} = \pi \langle \Psi_{Eb} | H | \Psi_{Es} \rangle, \quad (5)$$

з повним гамільтоніаном H . Зрозуміло, функції Ψ_{Eb} і Ψ_{Es} передбачаються нормованими відповідно на одиницю і виконується умова $\delta(k-k')$. В пр.2.3 викладені теоретичні основи нового формалізму релятивістської багаточастинкової ТЗ багатоелектронної атомної системи з нульовим DKS наближенням; потенціал самоузгодженого поля має вигляд:

$$V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{nuc}}(r) - \int_0^{\infty} dr' \frac{\rho(r')}{r_{>}} + x_{\alpha} \left[\frac{81}{32\pi^2} r\rho(r) \right]^{1/3}, \quad (6)$$

де ρ – електронна густина, x_{α} – числовий параметр.

Для підвищення точності описання атомних характеристик також в одноквазічастинковому наближенні використовується кореляційний потенціал типу Гуннарсона-Лундквіста, який добре зарекомендував себе в розрахунках спектроскопічних властивостей атомів, а також молекул. Також в пр.2.3 і далі 2.4 коротко викладені узагальнена процедура побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення в рамках релятивістського енергетичного підходу (з використанням умови мінімізації енергетичного функціонала, який представляє собою внесок фактично групи багаточастинкових обмінно-поляризаційних діаграм другого порядку), і новий релятивістський підхід до розрахунку атомних поляризуємостей, який базується на формалізмі багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим ab initio локальним DFS нульовим наближенням, релятивістській процедурі штурмовських розкладань, та методі релятивістських функції Гріна для ефективного урахування континууму при обчисленні сум другого порядку ТЗ.

В третьому розділі представлені результати розрахунку різноманітних енергетичних та спектральних параметрів багатоелектронних атомів в DC електричному полі довільної сили; зокрема, представлені дані (частина отримана взагалі вперше) для енергій та ширин штарківських резонансів в спектрі атому Li в рідбергівських станах з $n=15$, $n_1, n_2=0, 1; 13, 14$; $m = 0$ при напруженостях

електричного поля $\varepsilon=2100, 2500$ В/см, Na при $\varepsilon=3.59$ кВ/см і $n_1=22-26$ ($n_2=0, 1$; $m=0$), в атомі Rb при $\varepsilon=2.189, 6.416$ кВ/см $n_1=18-23$ ($n_2=0-2$; $m=0$), атомі K при $\varepsilon=3.59$ кВ/см, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1$; $m=0, 1$) і в атомі Cs при $\varepsilon=2.25, 8.25$ кВ/см і $n_1=16-22$ ($n_2=0-2$; $m=0$). В якості ілюстрації в таблиці 1 представлені результати (в ат.од.) розрахунку власних значень комплексної енергії $2s$ стану атому літію (енергій, ширин) в залежності від напруженості електричного поля. Для порівняння представлені також дані Sahoo-Но обчислень методом комплексного потенціалу (CAP), дані Meng et al методом комплексних координат з використанням В-сплайнових апроксимацій (В-CR), та дані Themelis-Nicolaidis, отримані на рішення комплексного рівняння Шредінгера (CESE).

Таблиця 1. Власні значення комплексної енергії $2s$ стану літію в залежності від напруженості електричного поля. (див. текст)

Li $2s$	В-CR	CAP	Наші дані	В-CR	CAP	CESE	Наші дані
F (a.u.)	E_r (a.u.)	E_r (a.u.)	E_r (a.u.)	$\Gamma/2$ (a.u)	$\Gamma/2$ (a.u)	$\Gamma/2$ (a.u)	$\Gamma/2$ (a.u)
0.0050	-0.20009	-0.20019	-0.20012	-	7.20[-9]	4.65[-11]	5.23[-10]
0.0055	-0.20052	-0.20062	-0.20055	3.80[-10]*	7.45[-9]	7.77[-10]	5.45[-10]
0.0060	-0.20100	-0.20109	-0.20103	3.74[-9]*	8.85[-9]	7.99[-9]	4.94[-9]
0.0065	-0.20151	-0.20161	-0.20154	2.49[-8]*	3.14[-8]	5.66[-8]	3.16[-8]
0.0070	-0.20207	-0.20217	-0.20211	1.24[-7]*	1.61[-7]	3.00[-7]	1.52[-7]
0.0075	-0.20268	-0.20277	-0.20272	4.87[-7]	4.83[-7]	1.26[-6]	5.08[-7]
0.0080	-0.20333	-0.20342	-0.20336	1.57[-6]	1.48[-6]	4.37[-6]	1.73[-6]
0.0090	-0.20477	-0.20486	-0.20480	1.05[-5]	1.05[-5]	3.41[-5]	1.21[-5]
0.0100	-0.20642	-0.20651	-0.20645	4.50[-5]	4.77[-5]	1.72[-4]	4.81[-5]
0.0125	-0.21147	-0.21155	-0.21149	4.76[-4]	4.68[-4]	2.95[-3]	4.96[-4]
0.0150	-0.21749	-0.21754	-0.21751	1.78[-3]	1.76[-3]	1.82[-2]	1.83[-3]
0.0175	-0.22393	-0.22397	-0.22394	4.03[-3]	4.06[-3]	6.35[-2]	4.24[-3]

Аналіз даних показує, що положення (енергії) штарківських резонансів, розраховані на основі нашої релятивістської операторної ТЗ, досить добре корелюють з теоретичними даними, отриманими іншими методами, зокрема, CESE та В-CR. Зовсім інша картина має місце у випадку порівняння ширин відповідних резонансів. Розрахунок CAP для ширини стану $2s$ при напруженості $F < 0,0060$ ат.од. дає систематично більші значення, ніж отримані CESE, В-CR та в межах нашої теорії. Наші значення ширин резонансу вищі за відповідні дані В-CR і відповідно трохи менші за значення, отримані в рамках методу CESE для всіх напруженостей електричного поля, що розглядалися. Для ілюстрації можливостей розвинутого підходу наведемо результати обчислень штарківських зсувів високо розташованих станів атома Na: d станів з головним квантовим числом $n=9,15$; розрахунок зсуву E стану 15^2D для напруженості електричного поля 3 кВ/см дав значення 40.01 см⁻¹ (релятивістська операторна ТЗ), відповідно до експерименту Kleppner et al шуканий зсув склав 40.2 см⁻¹; далі наш розрахунок штарківського зсуву стану 9^2D для напруженості елект-

ричного поля 2 кВ/см дав значення 19.9 см^{-1} , що добре узгоджується з даними Letokhov et al 20.2 см^{-1} . Аналогічні висновки слідує й у випадку порівняння наших теоретичних даних по енергіям та ширинам штарківських резонансів для Na при $\varepsilon=3.59 \text{ кВ/см}$ і $n_1=22-26$ ($n_2=0, 1$; $m=0$), в атомі Rb при $\varepsilon=2.189, 6.416 \text{ кВ/см}$ $n_1=18-23$ ($n_2=0-2$; $m=0$), атомі K при $\varepsilon=3.59 \text{ кВ/см}$, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1$; $m=0, 1$) і в атомі Cs при $\varepsilon= 2.25, 8.25 \text{ кВ/см}$ і $n_1=16-22$ ($n_2=0-2$; $m=0$) з деякими наявним для певних станів експериментальними результатами.

Докладний аналіз та обробка перелічених даних, а також аналогічних даних для атому водню дозволив виконати ретельну перевірку наявності так званого ефекту скейлінгу в залежностях наведених енергій $\varepsilon_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ і ширин $\gamma_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ як підпорогових, так і біляпорогових штарківських резонансів від наведеної напруженості електричного поля $F=\tilde{n}^4 \varepsilon$ для атомів водню та лужних елементів Na, K, Rb, Cs, Fr; показано, що для розглянутих атомів та відповідних квантових станів дійсно досить чітко спостерігається феномен скейлінгу, причому для важких атомів цезію та францію цей ефект виявлений вперше нами. Далі в пр. 3.6 представлені результати розрахунків характеристик автоіонізаційних, штарківських резонансів в електричному полі для важких атомів Gd, Yb. Тм. Для атому Yb розглянуті резонанси в спектрі, які розпадаються за схемою $4f^{13}6s^27nl \rightarrow 4f^{14}6skl'$. Відповідні розрахунки дозволили відкрити феномен суттєвого уширення резонансів, їх інтенсивної взаємодії для станів $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nd$ для різних значень величини напруженості електричного поля $F=0-150 \text{ В/см}$; для ілюстрації в табл. 2 представлені наші дані для величин ширин автоіонізаційних станів Γ (в см^{-1}) для рідкоземельного атому Yb $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nd$ для різних значень напруженості електричного поля $F(\text{В/см})$. Слід зазначити, що коли автоіонізаційний резонанс має аномально малу ширину, вже в слабкому електричному полі, змішуючись з резонансом протилежної парності із значно більшою шириною, його ширина істотно змінюється.

Таблиця 2. Наші дані для ширини автоіонізаційних станів Γ (в см^{-1}) для Yb $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nd$ для різних значень напруженості електричного поля $F(\text{В/см})$.

AC		$4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$		$4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$	
		n=26	n=30	n=26	n=30
Γ	$F=0$	0.809D-0	0.698D-0	0.609D-0	0.518D-0
Γ	$F=50$	2.258D-0	1.957D-0	1.718D-0	1.469D-0
Γ	$F=100$	4.288D-0	3.719D-0	3.2869D-0	2.828D-0
Γ	$F=150$	7.317D-0	6.509D-0	5.778D-0	4.846D-0

На рис.1 наведена залежність іонного струму для атома гадолінію від довжини хвилі λ_3 лазера при трьохступінчастому збудженні в області 6110–6240

A (експеримент Letokhov et al). Відокремлений унікальний вузький автоіонізаційний резонанс на довжині хвилі лазера 6133.5 cm^{-1} .

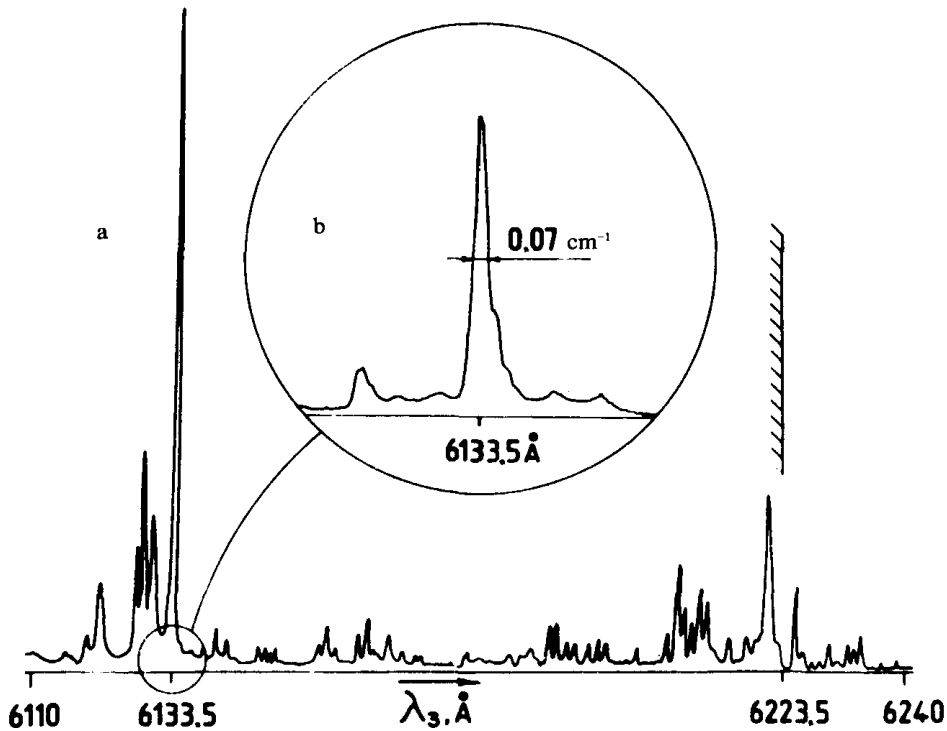


Рис.1 Експериментальна залежність іонного струму для атома Gd від довжини хвилі λ_3 лазера на трьохступінчастому збудженні в області 6110–6240 Å; унікальний аномально вузький автоіонізаційний резонанс в атомі Gd на довжині хвилі лазера 6133.5 cm^{-1}

Згідно з даними класичного експерименту Letokhov et al ширина автоіонізаційного резонансу дорівнює 0.07 cm^{-1} . Отримане нами значення ширини автоіонізаційного резонансу в рамках багаточастинкової релятивістської ТЗ з ab initio нульовим локальним DKS наближенням з урахуванням обмінно-поляризаційних ефектів $G_2=0.074 \text{ cm}^{-1}$ дуже добре узгоджується зі значенням, отриманим в експерименті: $G_1=0.07 \text{ cm}^{-1}$; аналогічне значення в рамках релятивістської ТЗ з ab initio локальним DKS нульовим наближенням без урахування обмінно-кореляційних ефектів (практично на рівні одноконфігураційного Дірака-Фока-Слетера) $G_3=1.1 \text{ cm}^{-1}$. Ще більш цікавою і абсолютно нестандартною є динаміка розпаду автоіонізаційних резонансів в спектрі атома Tm в електричному полі, для якої відкритий унікальний ефект гігантського розширення резонансів так званого реорієнтаційного типу в досить слабких електричних полях. Для атому Tm є характерною наявність двох пар близько розташованих меж іонізації (з вакансіями в $4f^{14}$ остові: $4f_{7/2}^{-1}$, $4f_{5/2}^{-1}$), яка обумовлює два основних типи автоіонізаційного розпаду (Vidolova-Angelova-Ivanov, 1991), а саме канал розпаду Бейтлера-Фано (BFD) та канал розпаду реорієнтаційного типу (ROD)

$$f_{\frac{5}{2}}^{-1} 6s_{\frac{1}{2}}(J_{12})nl \rightarrow f_{\frac{7}{2}}^{-1} 6s_{\frac{1}{2}}[J_{12'}] + \varepsilon I_l j_l \quad (\text{BFD})$$

$$n > 7 \quad J_{12} = 2; 3 \quad J_{12'} = 3; 4$$

$$f_j^{-1} 6s_{\frac{1}{2}}(J_{12})nl \rightarrow f_j^{-1} 6s_{\frac{1}{2}}[J_{12'}] + \varepsilon I_l j_l \quad (\text{ROD})$$

$$n > 25 \quad J_{12} = 3 \quad J_{12'} = 2; 4 \quad j = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$$

На противагу добре відомому в атомній спектроскопії стандартному каналу розпаду BFD, реорієнтаційний канал ROD є абсолютно нетривіальним і фактично відповідає низькоенергетичному процесу, при якому зберігаються одноелектронні квантові числа атомного остова атома тулію: $4fj^{-1} 6s_{1/2}$. Важливо відзначити, що ROD розпад може мати як монопольний, так і квадрупольний характер у сенсі мультипольного розкладання потенціалу міжчастинкової взаємодії.

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(l - a_i a_j)}{r_{ij}} \quad (7)$$

Для уявної частини енергії шукане розкладання є

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\cos \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2), \quad (7a)$$

(J - функція Бесселя першого роду, $(\lambda) = 2\lambda + 1$), а відповідна для дійсної частини потенціалу релятивістської межчастинкової взаємодії:

$$\frac{\cos|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_{<}) J_{-\lambda-1/2}(|\omega|r_{>}) P_{\lambda}(\cos \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \quad (7b)$$

Важливо зазначити, що стани з $J_{12}=2; 4$ не можуть розпадатися по каналу ROD. Проте, їх змішування з станами, що розпадаються за типом ROD, може значно посилити монопольний ROD розпад останніх. В таблиці 3 представлені наші (на основі релятивістської операторної ТЗ та багаточастинкової ТЗ з локальним DKS нульовим наближенням) енергії та ширини автоіонізаційних рідбергівських резонансів $4f^{43} 7/2 6s_{1/2}(3)ns[5/2]$ ($n=25-30$), які змішуються під впливом зовнішнього електричного поля з резонансними станами протилежної парності $4f^{43} 7/2 6s_{1/2}(3)np_{1/2}[5/2]$ ($n=25, 26$) в спектрі атому тулію Tm. В результаті для атому Tm при збільшенні напруженості поля до 150 В/см реалізується унікальний феномен гігантського уширення аномально вузьких автоіонізаційних резонансів, причому за порядком величини ефект уширення складає майже два порядки. Природу унікальної для класичної атомної спектроскопії вузькості (напр., в атомах лужних елементів, інертних газів, типові значення ширин аналогічних станів є десятки та сотні см^{-1}) ширин рідбергівських резонансів в рідкоземельних атомах, на наш погляд, слід безпосередньо пов'язувати з унікальними властивостями і нелінійною енергетикою електронних оболонок таких атомів. Вказаний феномен може знайти унікальне застосування у багатьох актуальних задачах квантової електроніки, лазерної фізики та їх прикладних додатків, у т.ч., в лазерно-фотоіонізаційних схемах поділення важких ізотопів резонансів, зокрема, атомів лантаноїдів та актиноїдів.

Таблиця 3. Автоіонізаційні ширини Γ та енергії E (см^{-1}) станів $\text{Tm } 4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)ns, np$, які зміщуються з резонансами $4f^{13}_{7/2,5/2}6s_{1/2}(3)np, ns$ для різних значень електричного поля $\varepsilon = F$ (В/см)

Стан		$4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)25s[5/2]$	$4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)25p_{1/2}[5/2]$
E	$\varepsilon = 0$	49855	49865
Γ	$\varepsilon = 0$	1.217D-05	1.227D-01
Γ	$\varepsilon = 50$	1.204D-04	1.226D-01
Γ	$\varepsilon = 100$	4.307D-04	1.223D-01
Γ	$\varepsilon = 150$	9.381D-04	1.218D-01
Стан		$4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)26s[5/2]$	$4f^{13}_{7/2}6s_{1/2}(3)26p_{1/2}[5/2]$
E	$\varepsilon = 0$	49755	49766
Γ	$\varepsilon = 0$	1.016D-05	1.022D-01
Γ	$\varepsilon = 50$	1.003D-04	1.021D-01
Γ	$\varepsilon = 100$	4.108D-04	1.020D-01
Γ	$\varepsilon = 150$	9.181D-04	1.016D-01

Дійсно, шукані автоіонізаційні стани, які довго живуть, можуть бути ефективно використані в методі багатоступінчатої селективної фотоіонізації атомів. Ще одна перспективна область застосування пов'язана із побудовою нового класу так званих автоіонізаційних лазерних систем, в основі яких лежить тривалий час життя відповідних рідбергівських автоіонізаційних резонансів і так званий принцип силової автоіонізації. В пр.3.7 далі представлені результати релятивістських розрахунків на основі багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим ab initio нульовим з локальним DKS нульовим наближенням одноквазічастинкових nlj енергій ($l=0-2, j=1/2-3/2$), амплітуд (матричних елементів) радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризованостей для низки атомів лужних елементів та інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm), наданий аналіз отриманих даних, а також докладне порівняння з результатами розрахунків на основі найбільш потужних альтернативних теоретичних підходів (метод зв'язаних кластерів, багаточастинкова ТЗ з RHF, DF^{SD} нульовими наближеннями). Як ілюстрація в таблиці 4 представлені експериментальні та теоретичні значення статичних поляризованостей, зокрема, Kr (1S), Xe (1S), Rb ($5s^2S$), Cs($6s^2S$)) в основному стані, розраховані на основі нашої нової релятивістської ТЗ (RMBPT) з оптимізованим DKS нульовим наближенням із імплементованою релятивістською схемою штурмівських розкладань, а також результати кулонівського наближення, методу квантового дефекту, варіаційної техніки Девідсона, методу квантового дефекту, методу Дірака-Кона-Шема (ДКШ) із схемою штурмівських розкладань (без оптимізації і урахування кореляцій і з оптимізацією (ДКШ -opt.) та

урахуванням ключових обмінно-кореляційних поправок), а також time-dependent теорії функціоналу густини (TDDFT) з наступними кореляційними функціоналами: B3LYP [Becke-Lee-Yang-Parr], SVWN [Slater-Vosko-Wilk-Nusair]), далі методу багаточастинкової ТЗ з ДФ нульовим наближенням (враховані одно-і двічі збуджені SD конфігурації; T3DF^{SD}) і накінець релятивістської версії методу Дірака-Фока-Штурма (ДФШ).

Таблиця 4. Значення статичних поляризованостей Kr (¹S), Xe (¹S), Rb (5s²S), Cs(6s²S) в основному стані (в атомних од.; див. текст)

	Kr (¹ S)	Xe (¹ S)	Rb (5s ² S)	Cs (6s ² S)
Експеримент	17.07 (~1%)	27.06 (~1%)	318.8(1) 319.8±2	400.8(6) 401(0/6)
Coulomb Approximation	-	-	314	394
Hartree-Fock	-	-	314	394
T3-Hartree-Fock	16.5	27.0	-	-
variational technique of Davison+quantum defect	-	-	350.4	446.5
T3DF ^{SD}	-	-	318.6 316.4	399.9 401.5
Dirac-Fock-Sturm	16.6	26.9	318.9	401.5
ДФШ	-	-	355	448
ДФШ (opt)	-	-	324	408
TDDFT – SVWN	-	-	-	-
TDDFT – B3LYP	-	-	-	-
Наші дані	17.2	27.6	318.1	400.6

Неважко зрозуміти, що в тих методах, де імплементовано ту чи іншу схему штурмовських розкладань, і акуратно враховуються обмінно-кореляційні ефекти, точність розрахунку певно буде вище. Далі представлені дані для статичної поляризованості рідкоземельних атомів Tm, Yb, які відносяться до класу суттєво складних релятивістських багатоелектронних систем. Основна конфігурація атома Yb – 4f¹⁴6s² ¹S. Основна конфігурація атома Tm - 4f¹³6s² ²F. У таблиці 5 представлені теоретичні значення статичної поляризованості (в ат.од.) Yb, Tm: наші значення, отримані на основі релятивістської ТЗ- DFS (RMBPT-DKS), а також дані розрахунків на основі залежної від часу теорії функціоналу густини (ФГ=DFT) Dalgarno et al, методу зв'язаних кластерів Buchachenko et al, методу штурмовських орбіталей ДКШ (без та з оптимізацією) Glushkov et al, методу «Configuration interaction (CI) - Perturbation Theory» (CIPT) Dzuba, методу «CI -2-order many-body perturbation theory (MBPT)» Zhi-Ming Tang та інших.

Таблиця 5. Експериментальні та теоретичні значення статичної поляризованості (ат.од.) атомів Yb, Tm; (див. текст)

(Yb) Метод/ Експеримент	147.1 (19)
Метод залежної від часу теорії ФГ; Dalgarno et al	157.3
Метод кластерних зв'язків; Buchachenko et al	147.0
Метод штурмовських ДКШ орбіталей	169.3
(без та з оптимізацією; Glushkov et al);	154.8
Config. Interaction- Perturbation Theory—CIPT method	143.0
Config. Interaction (CI) -2-order many-body PT (MBPT)	135.3
Наші дані, RMBPT-DKS	145.8
(Tm) Метод/ Експеримент	129.6 (16)
Метод залежної від часу теорії ФГ; Dalgarno et al	161.4
Метод кластерних зв'язків; Buchachenko et al	152.0
Метод штурмовських ДКШ орбіталей	173.3
(без та з оптимізацією; Glushkov et al);	162.7
Config. Interaction- Perturbation Theory—CIPT method	166.7
Наші дані, RMBPT-DKS	139.8

Слід зазначити, що в нашому методі акуратно реалізуються такі важливі фактори, як виконання принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках відповідних матричних елементів, коректний ступінь урахування складних обмінно-кореляційних (насамперед, ефекту поляризації остову) ефектів, а також генерується досить оптимальне одноквазічастинкове представлення в межах багаточастинкової релятивістської RMBPT-DKS; відповідно, наші значення поляризованостей знаходяться у досить прийнятній згоді з прецизійними експериментальними даними, також як й відповідні дані Dalgarno et al, отримані в рамках залежної від часу теорії ФП, Buchachenko et al і ін. методом кластерних розкладів, де урахування обмінно-кореляційних ефектів виконано досить повно і коректно.

В четвертому розділі викладені теоретичні основи нового релятивістського підходу до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка) довільної сили, який базується на апараті релятивістської операторної ТЗ (РОПТ), формалізмі багаточастинкової релятивістської ТЗ (RMBPT) з оптимізованим ab initio нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера з використанням концепції квазістаціонарних, квазіенергетичних станів і елементів методу комплексного обертання координат. Динаміка релятивістського багатоелектронного атома в змінному АС електромагнітному полі з амплітудою $F_0(t)$ та частотою ω $F(t) = F_0(t) \cos(\omega t)$ визначається на основі розв'язання задачі визначення власних значень Флоке і відповідно вирішення системи незалежних від часу диференціальних рівнянь:

$$\{\alpha c p + \beta c^2 + V_{at}(r)\} |\Psi_{E_j}^k\rangle + (z F_0 / 2) \{ |\Psi_{E_j}^{k+1}\rangle + |\Psi_{E_j}^{k-1}\rangle \} = (E_j + k\omega) |\Psi_{E_j}^k\rangle, \quad k \in Z \quad (8)$$

де k – це кількість фотонів, якою атомна система обмінюється з електромагнітним полем.

Фактично зовнішнє поле фактично індукує зв'язок всіх атомних станів, «одягнених» к фотонами зі станами, «одягненими» відповідно $(k-1)$ і $(k+1)$ фотонами. Відповідні власні стани є фактично резонансами розсіювання при комплексній енергії $E \rightarrow E - i\Gamma/2$ (ширина резонансу $\Gamma = \text{Im}E > 0$), які зручно згідно із стандартною процедурою ідентифікуються як полюса оператора резольвенти гамільтоніану H . У конкретних розрахунках характеристик атомних систем в АС електромагнітному полі зручно використовувати ймовірність виживання системи $P_{surv}(t)$ та ймовірність іонізації $P_{ion}(t) = 1 - P_{surv}(t)$; остання може бути визначена як:

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{E_j} w_j \exp(-i\Gamma_j t), \quad (9)$$

з w_j визначальними перекриваннями функції початкового стану атома з власними векторами $|E_j\rangle$ системи «атом плюс електромагнітне-поле». Важливо зазначити, що природно повна діагоналізація матриці відповідно (8) являє собою досить складну задачу і звичайно виконується для певної кількості флоківських зон. В пр.4.4 викладені чисельні результати вивчення динаміки іонізації атомів в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$ ат.од, частота $\omega/2\pi=8.87, 15, 36$ ГГц і розраховані залежності ймовірності іонізації. В таблиці 6 надані дані нашого розрахунку (Th.1) ймовірності іонізації атому літію, підготовленого спочатку в станах з орбітальним кутовим моментом $l_0=0$, проекцією моменту $m_0=0$ і значеннями головного квантового числа $n=51,55,63$, залежно від амплітуди поля $F=(1.6-3.1) \cdot 10^{-9}$ ат.од. (інші параметри поля: частота: $\omega/2\pi=36$ ГГц; часу взаємодії атома з полем: $t=2000 \cdot 2\pi/\omega$). Для амплітуди поля: $F=3.1 \cdot 10^{-9}$ ат.од. і аналогічних станів, зокрема, головним квантовим числом $n=51,55,63$, наведені також результати чисельних розрахунків (Th.3) Ignatenko, (Th.4) Glushkov et al, отриманими в рамках нерелятивістської операторної ТЗ в комбінації з нерелятивістським методом модельного потенціалу, а також результати (Th.2) Krug-Buchlienter, отриманими на основі прямого чисельного розв'язання нерелятивістського рівняння Шредінгера з використанням процедури обертання комплексних координат.

Таблиця 6. Значення ймовірності іонізації атомів Li в станах з $l_0=0, m_0=0$ і $n_0=51-63$ для амплітуди поля: $F=1.6-3.1) \cdot 10^{-9}$ ат.од. (частота: $\omega/2\pi=36$ ГГц)

	Th.1	Th.1	Th.1	Th.1	Th.1	Th.1	Th.2	Th.3	Th.4
n_0	$F= 1.6$	$F= 2.0$	$F= 2.3$	$F=2.5$	2.8	3.1	3.1	3.1	3.1
51	0,069	0,081	0,094	0,112	0,129	0,171	-	-	0,168
55	0,078	0,091	0,108	0,121	0,138	0,153	-	0,148	0,151
63	0,154	0,184	0,431	0,425	0,455	0,589	0,590	0,584	0,587

Важливим моментом є порівняння результатів розрахунку порогових значень амплітуди поля $F_{10\%}$ (при яких має місце 10% іонізація атомів) з експериментальними. За визначенням, цей параметр може бути розрахований на основі даних щодо залежності ймовірності іонізації від амплітуди елетромагнітного поля для різних значень часу взаємодії “атом – поле”.

Порівняння теоретичних та експериментальних даних (Walther et al), зокрема, для атому рубідію, показує, що релятивістські теорії дають у певній мірі більш точні результати, які краще узгоджуються з експериментальними результатами, у порівнянні з нерелятивістськими (також й емпіричними) моделями навіть з використанням фізично коректних в даній задачі (для атомів лужних елементів) наближень квантового дефекту і модельного потенціалу. Представлені в роботі дані по іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-80$) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, частота $\omega/2\pi=8.87, 15, 36$ ГГц (до речі, для атому тулію відповідні дані отримані взагалі вперше) характеризуються, з одного боку, монотонним зростанням (природно для різних станів, швидкість зростання є різною) ймовірності іонізації, з іншого боку, наявністю локальних порушень її безперервного зростання, а також антиперерізів сусідніх флоківських станів в спектрі квазіенергій при зміні амплітуди поля F ; з фізичної точки зору, ускладнення іонізаційної динаміки супроводжується суттєвим ускладненням структури спектра Флоке, зростанням впливу багатофотонних резонансів на зв'язок між зв'язаними дискретними станами при даній амплітуді поля, ускладненням зв'язку між групою майже вироджених власних станів системи «атом-поле», автоіонізаційними резонансами та континуумом. Для атому тулію, у порівнянні з атомами лужних елементів відповідна динаміка взаємодії іонізації представляється ще більш складною. Прецизійне урахування як релятивістських, так й обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч. ефектів суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах з обов'язковою оптимізацією базисів релятивістських рідбергівських орбіталей стає принципово необхідним. В пр.4.5 представлена нова релятивістська схема розрахунку швидкості іонізації високо збудженого атома в світловому та електричному полі одночасно. Конкретні дані отримані для характеристик розпаду станів з квантовими числами $n=8, \dots, 16$ и $m=0, n_2=n-1$ атому рубідію в залежності від напруженості електричного поля. Імовірність автоіонізаційного розпаду W природно дається повним потоком ймовірності через площину, перпендикулярну осі z (напрямок поля). Класична оцінка для W визначається відомим квантово-механічним співвідношенням (Н-подібне наближення):

$$W = 1/n^3 (4/\epsilon n^2)^{2n_2+m+1} [1/n_2!(n_2+|m|)!] \exp\{-2/3\epsilon n^3 + 3(n-2n_2-|m|-1)\} \quad (10)$$

При рішенні задачі іонізації рідбергівського атома імпульсом електричного поля для розрахунку ймовірності розпаду стану Ψ_{nlm} необхідна у відповідному поданні $\{\Psi_{n_1 n_2 m}\}$ діагоналізація матриці оператора взаємодії з полем $V=Fz$ виду:

$$W(nlm) = \sum_{n_2} (a_{n_1 n_2}^{nlm})^2 W(n_1 n_2 m), \quad (11)$$

де $W(n_1 n_2 m)$ – ймовірності розпаду станів $\psi(n_1 n_2 m)$, розраховані, наприклад, в рамках операторної ТЗ для сталого електричного поля; a – коефіцієнти розкладання функцій $\psi(nlm)$ по параболічним функціям $\psi(n_1 n_2 m)$. В таблиці 7 представлені розраховані нами значення характеристик штарківських станів атома Rb, які швидко розпадаються при $F=30$ кВ/см. Аналіз даних показує, що всі наведені значення із зростанням квантового числа n зростають, причому в більш адекватному релятивістському наближенні це зростання виражене більш різко, ніж в нерелятивістській теорії.

Таблиця 7. Характеристики швидкого розпаду збуджених станів атому Rb (напруженість електричного поля 30 к В/см; $n=8-12$)

n	8	9	10	11	12
$E, \text{см}^{-1}$	31906	32230	32459	32617	32764
n_2^*	5.8	7.0	8.0	8.9	9.0
a_s^2	<10(-6)	<10(-5)	<10(-5)	6·10(-5)	0.029
a_p^2	10(-5)	4·10(-5)	0.0006	0.003	0.20
a_d^2	0.001	0.0044	0.019	0.051	0.013

Далі проведений порівняльний аналіз параметрів елементарних процесів збудження і іонізації для лужних атомів (Na, Rb, Cs), досліджених в серії експериментів Letokhov et al і надані конкретні оцінки та рекомендації щодо елементів оптимальних схем методу селективної фотоіонізації атомів в DC і AC електричному полях та набори їх характеристик з іонізацією імпульсним електричним полем, які можуть бути ефективно використані в надто актуальних сучасних задачах лазерного поділення ізотопів та ядерних ізомерів.

В п'ятому розділі викладені основи нової релятивістської ab initio теорії визначення енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик, у тому числі, швидкостей іонізації атомів, AC штарківського зсуву, VBR зсувів частот атомних переходів (в атомних годинниках), додаткових VBR ширин, обумовлених ефектом змішування атомних станів електричним полем. Побудована теорія суттєво спирається на відомий релятивістський енергетичний підхід, який базується на S-матричному формалізмі Gell-Mann та Low, калібрувальнo-інваріантній процедурі Glushkov-Ivanov з використанням фотонних пропагаторів типу Donoghue-Holstein, який включає теплову частину, що враховує відомий планківський частотний розподіл для фотонів теплового резервуару. Релятивістська багатоелектронна атомна система описується в рамках формалізму ТЗ RMBPT-DKS з потенціалом міжчастинкової взаємодії, який враховує ефект запізнювання і брейтівську магнітну взаємодію у нижчому порядку за параметром сталої тонкої структури (див. також (7)). В рамках енергетичного підходу енергетичний зсув ΔE^{BBR} атомного рівня при наявності, крім спонтанного ка-

налу радіаційного розпаду, також і каналу розпаду внаслідок дії VBR випромінювання, стає температурно-залежним, і може бути представлений як:

$$\Delta E^{BBR}(T) = E^{BBR}(T) - i \frac{\Gamma^{BBR}(T)}{2}, \quad (12)$$

Повна ширина атомного рівня у VBR полі визначається спонтанною шириною (із-за взаємодії з полем фотонного вакууму) і VBR-індукованої ширини:

$$\Gamma_{nl}^{tot} = \Gamma_{nl}^{sp} + \Gamma_{nl}^{BBR}(T), \quad (13)$$

а величина ефективного часу життя певного стану атому:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \Gamma_0 + \Gamma_{BBR} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{BBR}}, \quad (14)$$

Далі застосовується стандартна техніка релятивістського енергетичного формалізму з використанням адіабатичної формули Gell-Mann and Low з електродинамічною матрицею S розсіювання, яка стандартним чином розкладається в ряд ТЗ. В температурно-залежній теорії фотонний пропагатор визначається вже у вигляді типу Donoghue-Holstein (DH)

$$D_{\mu\nu}^{DH}(x_1, x_2) = \frac{g_{\mu\nu}}{2\pi i r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i|\omega|r_{12} - i\omega(t_1 - t_2)} d\omega - \frac{g_{\mu\nu}}{\pi r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} n_{\beta}(|\omega|) \sin|\omega| e^{-i\omega(t_1 - t_2)} d\omega, \quad (15)$$

і фактично є сумою частини, що відповідає нульовій температурі D^0 , та теплової частини $D_{\mu_1\mu_1}^{\beta}$, яка враховує відомий планківський частотний розподіл для фотонів теплового резервуару:

$$n_{\beta}(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\omega}{k_B T}} - 1}, \quad \omega > 0 \quad (16)$$

$$n_{\beta}(\omega) = 0, \quad \omega < 0$$

На відміну від всіх робіт із спектроскопії атомів в VBR полі, уявна і дійсна частина енергетичного зсуву розраховуються з використанням температурно-залежного фотонного пропагатору, але при цьому ми зберігаємо загальне визначення фотонного пропагатору як суму членів з поперечною (T) і поздовжньою (L) частинами як [1]: $D = D_T + CD_L$, де C – калібрувальна стала.

При формулюванні нашої нової теорії суттєво використані КЕД теорія атому водню в VBR полі (Labzowsky et al, 2015), і калібрувально-інваріантна версія енергетичного підходу в теорії релятивістського атома (Glushkov-Ivanov, 1992; Glushkov, Adv. Quant.Ch., 2019). Для уявної частини енергетичного зсуву загальний вираз приймає форму:

$$\text{Im} \Delta E_{\alpha}^{\beta} = e^2 \sum_{E_n > E_{\alpha}} \left[\frac{1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2}{r_{12}} n_{\beta}(\omega_{n\alpha}) \sin \omega_{n\alpha} r_{12} \right]_{anna} + e^2 \sum_{E_n > E_{\alpha}} \left[\frac{1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2}{r_{12}} n_{\beta}(\omega_{an}) \sin \omega_{an} r_{12} \right]_{anna} \quad (17)$$

а для дійсної частини енергетичного зсуву в нашій теорії маємо вираз, аналогічний виразу КЕД теорії атому водню (Labzowsky et al, 2015):

$$\text{Re}\Delta E_a^\beta = \frac{4e^2}{3\pi} \sum_n \int_0^\infty n_\beta(\omega) \omega^3 |\langle a|\vec{r}|n\rangle|^2 \frac{\omega_{an}}{\omega_{na}^2 - \omega^2} d\omega, \quad (18)$$

і далі для АС штарківського зсуву має вигляд:

$$\text{Re}\widetilde{\Delta E}_a^\beta = -\frac{4e^2}{3\beta^2\pi} \sum_n |\langle a|\vec{r}|n\rangle|^2 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \frac{\tilde{\omega}_{na}}{\beta^2 \tilde{\omega}_{na}^2 - x^2}. \quad (19)$$

де квадрату амплітуди переходу в дипольному наближенні в нашій теорії відповідає матричний елемент релятивістського оператора:

$$|\langle a|\vec{r}|n\rangle|^2 \sim V_{ijkl}^{|\omega|} = \iint dr_1 dr_2 \Psi_i^*(r_1) \Psi_j^*(r_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \exp(-r_{12}) (\Psi_k^*(r_2) \Psi_l^*(r_1)), \quad (20)$$

для якого у подальшому використані розкладання типу (7). Аналогічні вирази можуть бути отримані для атомної системи в ВВР полі й у випадку урахування членів із поздовжньою (L) частиною D_L , які відповідають калібрувально-неінваріантним внескам в температурно-залежній теорії ВВР іонізації. Це дозволило вперше в спектроскопії рідбергівських атомів у ВВР полі реалізувати ефективні процедури перевірки виконання принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках радіаційних амплітуд (ширин), мінімізації калібрувально-неінваріантних ΔE_{minv} внесків у радіаційні ширини атомних рівнів, коректного урахування основних обмінно-поляризаційних ефектів, у т.ч., ефектів поляризаційної взаємодії через поляризуємий остов, взаємодії з фотонним вакуумом через остов, некулонівського групування рідбергівських рівнів, тиску континууму тощо. Для урахування обмінно-поляризаційної взаємодії квазі-частинок в системі з декількома частинками у відповідні матричні елементи, напр., до оператора радіаційного переходу типу (18) додавався релятивістський 2-квазічастинковий поляризаційний оператор $V_{pol}^{\text{Rel}}(r_1, r_2|\theta)$, вперше введеним в роботі Glushkov (Sov. Phys. J., 1990), і узагальнюючий відповідний нерелятивістський аналог Ivanova et al (Phys.Scripta, 1985). В пр.5.4 представлені результати розрахунків величин радіаційних ширин рівнів, ефективного часу життя, швидкості ВВР-іонізації, коефіцієнту штарківського зсуву k , параметру ВВР зсуву β частот атомних переходів для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів атомів лужних елементів Na, K, Rb, Cs для температур $T=77, 300, 600$ К в широкому інтервалі змінення величини головного квантового числа $n=10-90$. В таблиці 8 представлені результати наших тестових розрахунків на основі (RMBPT-DKS) часу життя для групи nS станів в спектрі калію, а також відповідні експериментальні дані Hart-Atkinson (Exp) і результати альтернативних теорій: DF, PTDF^{SD} – багаточастинкова ТЗ з DF нульовим наближенням

Safronova et al, релятивістський метод Дірака-Фока-Штурма (версія Glushkov-Zaichko; DFSZ), теорія модельного потенціалу (Hart-Atkinson, Theodosiou).

Таблиця 8. Значення часу життя (нс) для nS станів атома К (див. текст)

Рівень	DF	PTDF ^{SDc}	MP	DFSZ	Our	Exp.
5s _{1/2}	40.3	42.5	42.5	41.9	40.3	-
6s _{1/2}	78.2	81.4	88	87.4	86.7	88±2
7s _{1/2}	143.4	148.8	158	156.2	155.1	155±6
8s _{1/2}	241.6	250.7	264	248.6	245.2	238±4
9s _{1/2}	379.3	393.6	414	392.8	39.5	384±14
10s _{1/2}	563.2	584.7	614	581.9	579.4	575±26
11s _{1/2}	797.4	828.9	872	825.5	820.1	783±50
12s _{1/2}	982.0	1034.6	1191	1124.6	1121.8	1148±42

В таблиці 9 представлені результати нашого розрахунку величини ефективного часу життя для температур $T=300, 600$ К для різноманітних рідбергівських nS, nP, nD станів (змінюється в інтервалі 50–80) важкого атому цезію Cs.

Аналіз наведених вище в таблицях даних для ефективного часу життя різноманітних рідбергівських nS, nP, nD станів (змінюється в інтервалі 10–90) для атомів рубідію і цезію при температурах $T=77, 300, 600$ К показує, що поперше, є достатньо прийнятне узгодження теорії з деякими наявними даними, розрахованими на основі квазікласичного наближення Veterov et al (2009). З іншого боку, для певних станів із значеннями квантового числа від 20 до 45, особливо для S станів, починає проявлятися досить суттєва різниця між квантовими даними, експериментальними даними і результатами квазікласичних розрахунків, що насамперед пов'язано з неврахуванням в цих розрахунках принципово важливих обмінно-поляризаційних ефектів, які в нашій теорії враховані достатньо коректно. Перелічені фактори особливо критично проявляються у значеннях загальної швидкості VBR іонізації для рідбергівських nS, nD станів Rb, Cs. В роботі також представлені наші дані для залежності загальної швидкості VBR іонізації для рідбергівських nD станів атому цезію. В таблиці 10 представлені експериментальні і теоретичні значення коефіцієнту штарківського зсуву k (в 10^{-10} Гц/(В/м)² (для переходів між компонентами надтонкої структури основного стану): Th1 – лінеаризований coupled-cluster метод; Th2 –метод ТЗ з екранованою кулонівською взаємодією; Th3 – наша теорія

RMBPT-DKS. Аналіз показує, що теоретичні дані досить прийнятно корелюють друг з другом.

Як найбільш важливий компонент, методи містять процедури урахування ефектів кореляції, хоча конкретні схеми урахування відрізняються.

Таблиця 9. Значення ефективного часу життя для nS , nP , nD ($n=50-80$) рідбергівських станів Cs для температур $T=300, 600$ К (див текст)

n	T=300 K			T=600 K		
	S _{1/2}	P _{1/2}	D _{3/2}	S _{1/2}	P _{1/2}	D _{3/2}
		P _{3/2}	D _{5/2}		P _{3/2}	D _{5/2}
50	63.548	101.73	94.884	40.958	58.734	55.742
		101.07	93.034		58.458	55.702
55	81.379	128.21	116.54	51.116	70.226	68.337
		124.43	116.31		70.005	68.144
60	101.56	151.03	142.75	63.221	84.650	82.712
		150.31	142.28		84.342	82.599
65	124.14	179.43	170.64	76.358	99.144	98.214
		178.29	170.27		99.097	98.121
70	149.11	210.87	201.99	90.863	115.36	114.87
		209.48	200.61		115.62	114.65
75	176.51	244.00	234.45	106.62	133.86	132.85
		242.59	234.30		133.34	132.07
80	206.35	280.44	270.11	123.57	152.63	152.21
		278.90	269.49		151.55	152.11

Таблиця 10. Значення коефіцієнту штарківського зсуву k (див. текст)

²³ Na	3s (F = 2 - F = 1)	Th1	-0.1285
		Th3	-0.126
		Exp	-0.124(3)
⁸⁷ Rb	5s (F = 2 - F = 1)	Th1	-1.272
		Th2	-1.240
		Th3	-1.226
		Exp	-1.23(3)
¹³³ Cs	6s (F = 2 - F = 1)	Th1	-2.271
		Th2	-2.260
		Th3	-2.245
		Exp1	-2.271(4)
		Exp2	-2.05(5)

ВИСНОВКИ

Розвинені в роботі нові підходи, методи та моделі і отримані на їх основі оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії, зокрема, теоретичної релятивістської спектроскопії багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному, а також тепловому VBR полі з одночасним, послідовним урахуванням релятивістських, фотон-кореляційних та обмінно-поляризаційних ефектів, а також ефектів суттєво некулонівського групування рівнів в рідбергівських спектрах.

Основні результати та висновки дисертаційної роботи полягають у наступному:

1. Вперше в теоретичній спектроскопії багатоелектронних атомів в інтенсивному (понад інтенсивному) електричному полі розвинутий новий послідовний релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому електричному полі (DC ефект Штарка) довільної сили, що базується на релятивістській операторній теорії збурень і апараті багаточастинкової релятивістської ТЗ з *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетеру; розроблений новий послідовний підхід до обчислення енергій та ширин штарківських резонансів для атомів у зовнішньому постійному електричному полі (DC ефект Штарка) довільної сили у наближенні збурених хвиль; відповідні ширини штарківських резонансів визначаються квадратом матричного елемента від повного гамільтоніану атомної системи в електричному полі; для розрахунку ширини Γ конкретного квазістаціонарного стану в нижчому порядку визначаються власні функції гамільтоніана нульового наближення, а саме функція пов'язаного і функція стану розсіювання з однієї і тієї ж власною енергією.

2. Вперше в межах релятивістської операторної теорії збурень запропонована нова процедура розрахунку матричних елементів (амплітуд) операторів на базисах хвильових функцій, згенерованих у нульовому наближенні ТЗ типу Дірака-Фока-Слетера, яке містить потенціал взаємодії із зовнішнім полем; для побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення в межах релятивістського енергетичного підходу використовується фундаментальний принцип мінімізації енергетичного функціонала, який представляє собою внесок фактично так званих колективних ефектів, які описуються групою багаточастинкових обмінно-поляризаційних діаграм другого (в атомній теорії збурень ТЗ) або четвертого (в квантово-електродинамічній КЕД ТЗ) порядку.

3. Вперше розроблено новий послідовний суттєво релятивістський підхід до розрахунку фундаментальних енергетичних та спектроскопічних параметрів атомних систем, у тому числі, атомних поляризуємостей, який базується на формалізмі багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера та прецизійним урахуванням важливих обмінно-поляризаційних ефектів як ефектів другого та вище порядків ТЗ, узагальненій релятивістській процедурі штурмівських розкладань

а також методі релятивістських функції Гріна для ефективного урахування безперервного спектру (континууму) при обчисленні сум другого порядку ТЗ.

4. Представлені результати розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів в спектрі атому літію в рідбергівських станах з $n=15$, $n_1, n_2=0, 1; 13, 14$; $m=0$ при напруженостях електричного поля $\varepsilon=2100, 2500$ В/см, а також основного стану атома водню в електричному полі з напруженостями $F=0.04-0.8$ ат.од. (випадок сильного поля); проведено докладне порівняння з наявними даними по резонансам на основі серії методів, зокрема, методу $1/n$ -розкладання, методу комплексних координат з використанням В-сплайнових розкладань, методу комплексного потенціалу, методу розв'язання комплексного рівняння Шредінгера.

5. Представлені результат розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів в рідбергівських атомах лужних елементів, зокрема, в атомі Na при $\varepsilon=3.59$ кВ/см і $n_1=22-26$ ($n_2=0, 1; m=0$), в атомі Rb при $\varepsilon=2.189, 6.416$ кВ/см і $n_1=18-23$ ($n_2=0-2; m=0$), атомі K при $\varepsilon=3.59$ кВ/см, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1; m=0, 1$) і в атомі Cs при $\varepsilon=2.25, 8.25$ кВ/см і $n_1=16-22$ ($n_2=0-2; m=0$); частина даних отримана вперше; порівняння з наявними прецизійними експериментальними даними показує досить високу ефективність і точність нової теорії; показано, що суттєве значення в розрахунках має урахування обмінно-поляризаційних ефектів особливо для атомів та квантових станів, де величина квантового дефекту є суттєвою.

6. Докладний аналіз та обробка результатів розрахунку енергій та ширин штарківських резонансів в рідбергівських атомах лужних елементів дозволили виконати ретельну перевірку наявності так званого ефекту скейлінгу в залежностях наведених енергій $\varepsilon_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ і ширин $\gamma_{cl}(\tilde{n}^4 \varepsilon)$ як підпорогових, так і біляпорогових штарківських резонансів від наведеної напруженості електричного поля $F=\tilde{n}^4 \varepsilon$ для атомів водню та лужних елементів Na, K, Rb, Cs, Fr; показано, що для розглянутих квантових станів та атомів дійсно досить чітко спостерігається феномен скейлінгу, причому для цезію та францію цей ефект виявлений вперше нами.

7. Представлені результати релятивістського розрахунку енергій та ширин автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі рідкоземельного атому Yb, зокрема, автоіонізаційних резонансів, які розпадаються за схемою $4f^{l3}6s^27nl \rightarrow 4f^{l4}6skl$; відкрито феномен суттєвого уширення резонансів, їх інтенсивної взаємодії для станів $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2nd$ для різних значень величини напруженості електричного поля $\varepsilon=0-150$ В/см; представлені дані прецизійного розрахунку рідбергівських, автоіонізаційних штарківських резонансів ітербію $4f^{l3}6s^2np$, $4f^{l3}6s^2nf$ з $n>20$, $J=2^-$), $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=13-19$) в енергетичному інтервалі $22220-22405$ см⁻¹ та резонансів $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{l3} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ в ($n=28-36$) в енергетичному інтервалі $71665-71745$ см⁻¹; отримані дані знаходяться у відмінній узгодженості із даними прецизійних експериментів на основі методу багатофотонної іонізаційної

спектроскопії Jong-hoon Yi et al (2001).

8. Представлені результати розрахунку енергій та ширин автоіонізаційних рідбергівських резонансів в атомі Gd, які збуджуються в межах трьохступінчастої лазерно-іонізаційної схеми Letokhov et al з основного стану $4f^7 5d 6s^2 9D_2^0$ в $4f^7 5d 6s 6p^9 D_4^0$ стан і далі $4f^7 5d 6s 7s^9 D_4^0$ стан в енергетичному інтервалі 6300–6100 А; показано, що ширина автоіонізаційного резонансу на довжині хвилі 6133,5 А в досить слабкому електричному полі збільшується від значення нашої теорії $\Gamma=0,074 \text{ см}^{-1}$ (експериментальне значення $0,07 \text{ см}^{-1}$; значення в теорії без урахування обмінно-кореляційних ефектів $1,1 \text{ см}^{-1}$) до $\Gamma=0.34 \text{ см}^{-1}$ (експеримент $\Gamma=0.35 \text{ см}^{-1}$) в електричному полі 100 В/см.

9. Представлені результати релятивістських розрахунків енергетичних та спектральних параметрів автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі складного атома тулію Tm, зокрема, ширин та енергій рідбергівських станів $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)ns[5/2]$, ($n=25, 26$), які змішуються під впливом зовнішнього електричного поля з резонансними станами протилежної парності $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)np_{1/2}[5/2]$ ($n=25, 26$); відкрито явище гігантського розширення автоіонізаційних резонансів, які змішуються під впливом зовнішнього електричного поля с резонансними станами протилежної парності при збільшенні напруженості електричного поля тільки до 150 В/см, що має величезне значення для розробки сучасних ефективних лазерно-фотоіонізаційних схем поділення важких ізотопів з використанням рідбергівських, автоіонізаційних, штарківських резонансів, а також побудови принципово нових автоіонізаційних лазерних систем короткохвильового діапазону з використанням вузьких резонансів а також принципу силової автоіонізації.

10. Представлені результати релятивістських розрахунків на основі релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим ab initio нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера одноквазічастинкових nlj ($l=0-2$, $j=1/2-3/2$), амплітуд (матричних елементів) радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризуємостей для низки атомів лужних елементів та інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm); аналіз отриманих даних а також докладне порівняння з результатами розрахунків на основі найбільш потужних альтернативних теоретичних підходів (метод зв'язаних кластерів, багаточастинкові ТЗ з RHF, DF^{SD} нульовими наближеннями), показали, по-перше, високу ефективність й точність нового підходу, по-друге, принципове значення для отримання адекватної точності опису прецизійного одночасного урахування релятивістських, одно-та багатоквазічастинкових обмінно-поляризаційних, ефектів, у т.ч. суттєво некулонівського групування рівнів, використання оптимізованих з точки зору виконання фундаментального принципу калібрувальної інваріантності базисів квазічастинкових хвильових функцій.

11. Вперше в спектроскопії багатоелектронних атомів розвинений новий релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка) довільної сили на основі апарату релятивістської операторної

ТЗ та формалізму багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим *ab initio* нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера, а також концепції квазістаціонарних, квазіенергетичних станів і методу комплексного обертання координат.

12. Вперше в рамках нового релятивістського підходу реалізовано нову схему розрахунку характеристик іонізації багатоелектронних атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка), який зводиться до стаціонарної задачі на власні значення і власні вектори енергетичної матриці A (з розглядом кількох флоківських зон) з використанням оптимізованих базисів, згенерованих в рамках релятивістської операторної теорії збурень і де власні стани є фактично резонансами розсіювання при комплексній енергії: $E \rightarrow E - i\Gamma/2$.

13. Вперше у послідовному релятивістському наближенні виконано детальне вивчення динаміки іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, частота $\omega/2\pi=8.87$ ГГц, $\omega/2\pi=15$ ГГц, $\omega/2\pi=36$ ГГц і розраховані залежності ймовірності іонізації P атомів Li, Rb, Tm від амплітуди поля, значення ефективного квантового числа n^* і часу взаємодії «атом-поле»; деякі результати, в тому числі, для атому тулія представлені вперше в літературі; порівняння теоретичних даних по граничним значенням амплітуди поля $F_{10\%}$ (при якому має місце 10% іонізація атомів) з наявними лише для деяких значень n експериментальними даними (Munich group для Rb: $n > 60$, $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, $\omega/2\pi=8.87$ ГГц; Virginia group для Li: $n < 42$, $\omega/2\pi=15$ ГГц) показало в цілому досить добру згоду теорії і експерименту (невеликі відмінності пов'язані з певними обчислювальними похибками).

14. Показано, що динаміка іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, частота $\omega/2\pi=8.87$ ГГц, $\omega/2\pi=15$ ГГц, $\omega/2\pi=36$ ГГц характеризується нерегулярними особливостями, зокрема, одночасно й монотонним зростанням ймовірності іонізації із збільшенням значення головного квантового числа, й антиперерізом сусідніх флоківських станів в спектрі квазіенергій при зміні амплітуди поля F , й різною швидкістю для різних станів із спостереженням також локальних порушень безперервного зростання; з фізичної точки зору, ускладнення іонізаційної динаміки пов'язано із суттєвим ускладненням структури спектра Флоке, зростанням впливу багатофотонних резонансів на зв'язок між пов'язаними дискретними станами при даній амплітуді поля, ускладненням зв'язку між групою майже вироджених власних станів системи «атом-поле», автоіонізаційними резонансами та континуумом.

15. Розроблено нову релятивістську схему розрахунку швидкості іонізації високозбудженого атома в одночасно світловому та електричному полях на основі апарату релятивістської операторної ТЗ (ROPT) та формалізму багаточастинкової релятивістської ТЗ (RMBPT) з оптимізованим *ab initio* нульовим локальним наближенням, й представлені розрахункові дані для характеристик

розпаду станів атому рубідію з квантовими числами $n=8, \dots, 16$ и $m=0$, $n_2=n-1$ в залежності від напруженості електричного поля до 30 кВ/см; запропоновані з конкретними оцінками щодо енергетики елементи оптимальних схем методу селективної фотоіонізації атомів в постійному і змінному електричному полях та набори їх характеристик з іонізацією імпульсним електричним полем, автоіонізацією через високо розташовані рідбергівські стани, вузькі автоіонізаційні резонанси в спектрах багатоелектронних атомів в електричному полі, які можуть бути ефективно використані в надто актуальних сучасних задачах лазерного поділення ізотопів та ядерних ізомерів.

16. Вперше в спектроскопії рідбергівських багатоелектронних атомів в полі теплового VBR випромінювання розвинута нова, послідовна релятивістська ab initio теорія визначення енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик, у тому числі, швидкостей іонізації атомів, АС штарківського зсуву, VBR зсувів частот атомних переходів (в атомних годинниках), додаткових VBR ширин, обумовлених ефектом змішування атомних станів електричним полем; в основі нової теорії лежить узагальнений релятивістський енергетичний підхід, який базується на S-матричному формалізмі Gell-Mann та Low, калібрувально-інваріантній процедурі Glushkov-Ivanov, ЕД результатах Solov'yev-Labzowsky-Plunien, з використанням фотонних пропаторів типу Donoghue-Holstein (суми частини, що відповідає нульовій температурі і теплової частини, яка враховує відомий планківський частотний розподіл для фотонів теплового резервуару), а також нового методу релятивістської багаточастинкової ТЗ RMBPT з оптимізованим ab initio нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетера.

17. В межах нового релятивістського підходу до визначення характеристик рідбергівських атомів у полі VBR випромінювання вперше розроблені та реалізовані ефективні і максимально послідовні процедури перевірки виконанням принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках радіаційних амплітуд (ширин), мінімізації калібровочно-неінваріантних ΔE_{inv} внесків у радіаційні ширини атомних рівнів, узагальнена схема Dirac-Fock-Slater-Sturm для урахування станів континуума, коректного урахування основних обмінно-поляризаційних ефектів як поправок другого та вище порядків ТЗ, у тому числі, ефектів поляризаційної взаємодії через поляризуємий остов, взаємодії з фотонним вакуумом через остов, некулонівського групування рідбергівських рівнів, тиску континууму тощо.

18. Представлені результати релятивістських розрахунків величин радіаційних ширин рівнів, ефективного часу життя, швидкості VBR-іонізації, коефіцієнту штарківського зсуву k , параметру VBR зсуву β частот атомних переходів для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів атомів лужних елементів Na, K, Rb, Cs для температур $T=77, 300, 600$ К; для ряду станів проведено порівняння з даними удосконалених квазікласичних обчислень Vetterov et al, модельних обчислень Kleppner et al, Theodosiou, розрахунків на основі лінеарізованого методу зв'язаних кластерів та методу ТЗ з екранованою кулонівською взаємодією а також даними досить прецизійних експериментів Gallakher-

Cooke (Virginia group), Nascimento et al (São Paulo) та ін., яке свідчить про добре узгодження наших даних з експериментальними; виявлено, що зокрема, для рідбергівських станів з $n=20-40$ спостерігається відхилення результатів квазікласичних та модельних розрахунків від експерименту, що пов'язано з неврахуванням принципово важливих внесків обмінно-поляризаційних ефектів, які в нашій теорії враховані достатньо коректно.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

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

1. *Glushkov, A.V., Ignatenko, A.V., Kuznetsova, A.A., et al.: Nonlinear Dynamics of Atomic and Molecular Systems in an Electromagnetic Field: Deterministic Chaos and Strange Attractors. In: Awrejcewicz J. (Ed.) Series: Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Perspectives in Dynamical Systems II: Mathematical and Numerical Approaches, vol.363, ch.11, pp.11–120. Springer International Publishing (2021). DOI:10.1007/978-3-030-77310-6
2. *Buyadzi, V.V., Ternovsky, E.V., Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A.: Advanced Relativistic Energy Approach in Electron-Collisional and Radiative Spectroscopy of Ions in Plasmas. In: Glushkov, A.V., Khetselius, O.Y., Maruani, J., Brändas, E. (Eds) Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham., vol.33, pp.27–44. Springer (2021). DOI: 10.1007/978-3-030-68314-6 3.
3. Kuznetsova, A.A., Glushkov, A.V., Plisetskaya, E.K.: Theoretical complex energies of Stark resonances in lithium by operator perturbation theory approach. Photoelectronics **29**, 68–77 (2020)
4. *Glushkov, A.V., Ternovsky, V.B., Kuznetsova, A.A., Tsudik, A.V.: Spectroscopy of Rydberg Atomic Systems in a Black-Body Radiation Field. 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, vol. 32, pp. 51–63. Springer (2020).
5. 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 Aerodisperse Systems. **59**, 106–112 (2020)
6. Zaichko, P.A., Kuznetsova, A.A., Tsudik, A.V., Mansarliysky, V.F.: Relativistic calculation of the radiative transition probabilities and lifetimes of excited states for the rubidium atom in a black-body radiation field. Photoelectronics. **29**, 126–133 (2020)
7. *Kuznetsova, A.A., Glushkov, A.V., Ignatenko, A.V., Svinarenko, A.A., Ternovsky, V.B.: Spectroscopy of Multielectron Atomic Systems in a DC Electric Field. Advances in Quantum Chemistry. **78**, 287–306 (2019).

8. Kuznetsova, A.A., Glushkov, A.V., Romanenko, E.S., Plisetskaya, E.K.: Spectroscopy of multielectron atom in DC electric field: Relativistic operator perturbation theory. *Photoelectronics* **28**, 32–38 (2019)
9. *Glushkov, A.V., Ternovsky, V.B., Kuznetsova, A.A., Romanenko, E.S, Zaichko, P.A.: Spectroscopy of Rydberg Atoms in a Black-body Radiation field: Ionisation Rates and Effective Lifetimes. *J. Phys.: Conf. Ser.* **1289**, 012024 (2019).
10. *Ignatenko, A.V., Buyadzhi, A.A., Buyadzhi, V.V., Kuznetsova, A.A., Mashkantsev, A.A., Ternovsky, E.V.: Nonlinear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field. *Advances in Quantum Chemistry.* **78** (7), 149–170 (2019). DOI: [10.1016/bs.aiq.2018.06.006](https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.006)
11. Tsudik, A.V., Kuznetsova, A.A., Zaichko, P.A., Mansarliysky, V.F.: Relativistic spectroscopy of heavy Rydberg atomic systems in a black-body radiation field. *Photoelectronics.* **28**, 46–53 (2019)
12. *Buyadzhi, V.V., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A., Ternovsky, E.V., Tkach, T.B.: Advanced Quantum Approach in Radiative and Collisional Spectroscopy of Multicharged Ions in Plasmas. *Advances in Quantum Chemistry.* **78**, 171–191 (2019). DOI: [10.1016/bs.aiq.2018.06.002](https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.002)
13. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A., Gurskaya, M.Yu., Ignatenko, A.V., Makarova, A.O.: Modified operator perturbation theory computational approach to atomic systems in an electric field: DC Stark resonances. *J. Phys.: Conf. Ser.* **1136**(1), 012012 (2018). DOI: [10.1088/1742-6596/1136/1/012012](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1136/1/012012)
14. Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A., Gurskaya, M.Y., Makarova, A.O.: Spectroscopy of multielectron atom in a DC electric field: Modified operator perturbation theory approach to Stark resonances. *Photoelectronics* **27**, 94–102 (2018)
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 Microsyst. Techn.* **15**(4), 50–57 (2018).
16. 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.* **27**, 121–130 (2018)
17. *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. In: Yan A. Wang, Mark Thachuk, Roman Krems, Jean Maruani (Eds) *Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Cham. vol.31.*, pp.229–241. Springer (2018).
18. Glushkov, A.V., Bunyakova, Yu.Ya., Buyadzhi, V.V., Dubrovskaya, Yu.V., Kuznetsova, A.A., Khetselius, O.Yu.: New approach and microsystem technology of advanced non-linear analysis and modelling chaotic environmental radioactivity dynamics. *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* **14**(3), 24–37 (2017)
19. Ternovsky, V.B., Glushkov, A.V., Smirnov, A.V., Kuznetsova, A.A., Khetselius, O.Y., Buyadzhi, V.V.: An advanced laser photoionization separation scheme for ra-

- radioactive isotopes and products of atomic energetics: Uranium and the transuranium elements. *Sensor Electronics and Microsystems Techn.* **14**(4), 83–93 (2017).
20. *Khetselius, O.Y., Glushkov, A.V., Gurskaya, M.Y., Kuznetsova, A.A., Dubrovskaya, Y.V., Serga, I.N., Vitavetskaya, L.A.: Computational modelling parity nonconservation and electroweak interaction effects in heavy atomic systems within the nuclear-relativistic many-body perturbation theory. *J. Phys.: Conf. Ser.* **905**(1), 012029 (2017). DOI: 10.1088/1742-6596/905/1/012029
 21. Dubrovskaya, Yu.V., Kuznetsova, A.A., Kvasikova, A.S., Sakun, T.N.: Spectroscopy of cooperative electron- γ -nuclear effects in multiatomic molecules: molecule XY_4 . *Photoelectronics.* **26**, 55–61 (2017). DOI: 10.18524/0235-2435.2017.26.125990
 22. Kuznetsova, A.A., Ignatenko, A.V., Makarova, A.O., Gurskaya, M.Y., Buyadzhi, A.A.: Nonlinear chaotic dynamics of atomic and molecular systems in an electromagnetic field. In: Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Buyadzhi, V.V. (Eds) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics*, Ser.: *Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*, pp.365–369. Kharkiv: FOP (2017)
 23. 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. *J. Phys.: Conf. Ser.* **810**(1), 012047 (2017). DOI:10.1088/1742-6596/810/1/012047
 24. Kuznetsova, A.A., Dubrovskaya, Yu.V., Glushkov, A.V., Lepikh, Ya.I.: Advanced Green's functions and density functional approach to vibrational structure in the photoelectron spectra of diatomic molecule. *Photoelectronics.* **26**, 78–87 (2017). DOI:10.18524/0235-2435.2017.26.126101
 25. *Glushkov, A.V., Svinarenko, A.A., Khetselius, O.Y., Dubrovskaya, Yu.V., Kvasikova, A.S., Kuznetsova, A.A., Ponomarenko, E.L.: Electrodynamical and Quantum Chemical Modelling of Electrochemical and Catalytic Processes on Metals and Semiconductors: A Review. In: Tadjer, A., Pavlov, R., Maruani, J., Brändas, E., Delgado-Barrio, G. (eds.) *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Advances in Concepts and Applications*, Series: *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Cham., vol.30, pp.159–167. Springer (2017). DOI:10.1007/978-3-319-50255-7_9
 26. *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: Uzunov, D. (ed) *Recent Studies in Perturbation Theory*, pp.131–150 (2017). DOI: 10.5772/intechopen.69102
 27. Ponomarenko, E.L., Kuznetsova, A.A., Dubrovskaya, Yu.V., Bakunina (Mischenko), E.V.: Energy and spectroscopic parameters of diatomics within generalized equation of motion method. *Photoelectronics.* **25**, 114–118 (2016). DOI:10.18524/0235-2435.2016.25.157647
 28. Kvasikova, A.S., Dubrovskaya, Yu.V., Kuznetsova, A.A., Ponomarenko, E.L.: New quantum approach to determination of the molecular spectral constants

- and probabilities for cooperative vibration-rotation-nuclear transitions in spectra of diatomics and the hadronic molecules. *Photoelectronics*. **25**, 141–148 (2016). DOI: 10.18524/0235-2435.2016.25.157668
29. Kuznetsova, A.A.: Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external magnetic field: model potential scheme. *Photoelectronics*. **24**, 134–140 (2015). DOI: 10.18524/0235-2435.2015.24.158179
 30. Kuznetsova, A.A., Kosenko, S.I., Vitavetskaya, L.A., Chernyakova, Yu.G., Seredenko, S.S.: Calculating the radiative vacuum polarization contribution to the energy shift of some transitions in pionic and kaonic nitrogen. *Photoelectronics*. **23**, 119–123 (2014). DOI:10.18524/0235-2435.2014.23.158592
 31. Kuznetsova, A.A., Vitavetskaya, L.A., Chernyakova, Yu.G., Korchevsky, D.A.: Calculating the radiative vacuum polarization contribution to the energy shift of 3p-1s transition in pionic deuterium. *Photoelectronics*. **22**, 108–111 (2013)
 32. Kuznetsova, A.A., Kvasikova, A.S., Shakhman, A.N., Vitavetskaya, L.A.: Calculating the radiative vacuum polarization contribution to the energy shift of 2p-2s transition in m-hydrogen. *Photoelectronics*. **21**, 116–120 (2012). DOI:10.18524/0235-2435.2012.21.206830
 33. Mikhailenko, V.I., Kuznetsova, A.A., Prepelitsa, G.P., Ignatenko, A.V.: Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external magnetic field. *Photoelectronics*. **19**, 89–92 (2010)
 34. Svinarenko, A.A., Mikhailenko, V.I., Kuznetsova, A.A., Mudraya, N.V.: Dynamics of the radiative transitions between Stark sublevels for non-hydrogenic atoms in an DC electric field. *Sensor Electronics and Microsyst. Techn.* **7**(1), 4–9 (2010). DOI:10.18524/1815-7459.2010.1.113970
 35. Mikhailenko, V.I., Kuznetsova, A.A.: Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external electric field. *Sensor Electronics and Microsyst. Techn.* **6**(4) 12–17 (2009). DOI:10.18524/1815-7459.2009.4.116038

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

1. Kuznetsova, A., Svinarenko, A.: Dynamics of the resonant levels of atoms in a laser pulse of nonrectangular form: optical bi-stability and chaos effects. In: Abstracts of the 24 International Workshop “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology QSCP –XXIV”, Odessa, 17–23 August 2019, p.111
2. Glushkov, A.V., Ignatenko, A.V., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A.: Nonlinear dynamics of atomic and molecular systems in an electromagnetic field: Deterministic chaos and strange attractors. In: Abstracts of the 15th International Conference "Dynamical Systems - Theory and Applications", Lodz, 2–5 December 2019. p.MAT269
3. Glushkov, A., Kuznetsova, A., Ternovsky, V.: Stark effect, multiphoton and auto-ionization resonances in spectra of heavy atoms and multicharged ions in a strong electromagnetic field ID. In: Abstracts of the 31st Int Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions – ICPEAC, Deauville, 23–30 July 2019. p.499 (FR-077)

4. Kuznetsova, A.A., Khetselius, O.Y., Glushkov, A.V., Buyadzhi, A.A.: Laser Electron-Gamma-Nuclear Spectroscopy of Atoms and Multicharged Ions: “Shake-Up”, NEEC, NEET Effects. In: Abstracts of the 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII), Kruger Park, 23–29 September 2018. p.54
5. Kuznetsova, A.A., Ternovsky, V.B., Glushkov, A.V., Khetselius, O.Y., Zaichko, P.A.: Spectroscopy of Heavy Rydberg atoms in a Black-Body Radiation Field: Relativistic Theory of Excitation and Ionization. In: Abstracts of the 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII), Kruger Park, 23–29 September 2018. p.65
6. Kuznetsova, A.A., Khetselius, O.Y., Dubrovskaya, Yu.V., Ternovsky, E.V., Svinarenko, A.A.: Hyperfine Structure of a Few-Electron Multicharged Ions with in Relativistic Many-Body Perturbation Theory. In: Abstracts of the 23rd International Workshop on Quantum Systems In Chemistry, Physics, and Biology (QSCP-XXIII), Kruger Park, 23–29 September 2018. p.61.
7. Buyadzhi, V.V., Kuznetsova, A.A., Svinarenko, A.A.: Multi-photon spectroscopy of the Debye plasmas atomic systems in a one- and two-color laser fields. In: Abstracts of the 50th Anniversary Conference of European Group on Atomic Systems, Kraków, 9–13 July 2018. p.95(A34).
8. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A., Makarova, A.O.: Spectroscopy of Heavy Atoms and Nuclei in a Strong Laser Field: Stark effect, Autoionization and Multiphoton Resonances. In: Abstracts of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS), Dublin, 17–22 June 2018. p.103 (Tu.P.25)
9. Khetselius, O.Yu., Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, V.V.: Shake-Up and NEET Effects in Laser Electron-Gamma-Nuclear Spectroscopy of Atoms and Multicharged Ions. In: Abstracts of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS), Dublin, 17–22 June 2018. p.131 (We.P.26)
10. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A., Makarova, A.O.: Advanced computational approach to heavy atoms and nuclei in a strong laser field: DC, AC Stark effect, multiphoton resonances. In: Abstracts of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics, Davis, July 29–August 2 2018. p.P30
11. Ternovsky, E.V., Khetselius, O.Yu., Kuznetsova, A.A., Mironenko, D.A.: Computing Radiative Spectral Parameters of Multicharged Ions within Relativistic Energy Approach and Model Potential Method. In: Abstracts of the XXX IUPAP Conference on Computational Physics Davis, July 29–August 2 2018. p.P33a.
12. Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, A.A., Glushkov, A.V. et al.: Spectroscopy of multielectron atom in a dc electric field: modified operator perturbation theory approach to Stark resonances. In: Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Svinarenko, A.A., Buyadzhi, V.V. (eds.) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics Series: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics, Proceedings of International Conference “Quantum systems in chemistry, physics and mathematics II” (QSCPM-2018)*, OSENU, Odessa, 2018. pp.77–88.
13. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A., Ignatenko, A.V.: Cooperative laser electron-gamma-nuclear phenomena in dynamics and spectroscopy of atoms and

- molecules: Advanced Computational Code. In: Abstracts of the 29th IUPAP Conference on Computational Physics, Paris 9–13 July 2017. p.209. (sciencesconf.org:ccp2017: 158269)
14. Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Kuznetsova, A.A.: Spectroscopy of cooperative laser electron- γ -nuclear processes in atoms, molecules and clusters: New effects in cryogenic molecules. In: Abstracts of the 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Munich, 27 August–1 September 2017. p.PO3-251
 15. Khetselius, O.Yu., Kuznetsova, A.A., Mansarliysky, V.F.: Spectroscopy interatomic potentials, collisional spectral line shift and broadening for molecular pairs “heavy atom – noble gas atom”. In: Abstracts of the 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, 27 August–1 September 2017. p.PO3-253
 16. Kuznetsova, A.A., Mikhailenko, V.I.: Penning and stochastic collisional ionization of atoms in an external magnetic field: Model potential scheme. In: Glushkov, A., Khetselius, O., Buyadzhi, V. (eds.) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics, Ser.: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*, pp.340–345, Kharkiv: FOP Panov A.N. (2017)
 17. Glushkov, A.V., Theophilou, A., Kuznetsova, A.A., Lepikh, Ya., Khetselius, O.Y., Buchko, I.: The Green’s functions and density functional approach to vibrational structure in the photoelectron spectra of molecules: review of method In: Glushkov, A., Khetselius, O., Buyadzhi, V. (eds.) *Advances in Quantum Systems in Chemistry, Physics and Mathematics, Ser.: Progress in Applied Mathematics and Quantum Optics*, pp.257–273, Kharkiv: FOP Panov A.N. (2017)
 18. Ternovsky, V.B., Glushkov, A.V., Ignatenko, A.V., Kuznetsova, A.A., Khetselius, O.Yu., Prepelitsa, G.P., Buyadzhi, V.V.: New nonlinear optics and dynamics of atomic, molecular systems in an electromagnetic field and laser systems with elements of a chaos. In: Abstracts of the XXI International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology, Vancouver, 2–9 July 2016. p.P12
 19. Khetselius, O.Yu., Glushkov, A.V., Gurskaya, M.Yu., Dubrovskaya, Yu.V., Kuznetsova, A.A., Ponomarenko, E.L.: Computational modelling of electroweak interaction effects in atomic and molecular systems within Nuclear-QED perturbation theory. In: Abstracts of the 28th IUPAP Conference on Computational Physics, Gauteng, 10–14 July 2016. p.25 (ID-114)
 20. Glushkov, A.V., Khetselius, O.Y., Kuznetsova, A.A., Dubrovskaya, Y.V., Ponomarenko, E.V.: Vibrational structure and cooperative electron-gamma-nuclear effects in photoelectron spectra within Green’s functions and density functional methods. In: Abstracts of the 23rd International Conference on Spectral Lines Shapes, Torun, 19–24 June 2016. p.164
 21. Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Kuznetsova, A.A., Antoshkina, O.A.: Parity nonconservation in heavy finite Fermi-systems and dynamical enhancement of electroweak interaction. In: Abstracts of the International Nuclear Physics Conference, Adelaide, 11–16 September 2016. p.ID469

22. Glushkov, A.V., Buyadzhi, V.V., Khetselius, O.Yu., Kuznetsova, A.A., Ignatenko, A.A.: Resonance Phenomena in Heavy Nuclei and Multicharged Ions Collisions and AC/DC Stark Effect in Super Strong Laser Field. In: Abstracts of the 5th Heavy Ion Accelerator Symposium for Fundamental and Applied Research; INCP conference Sattelite, Canberra, 18–20 September 2016. p.Tu02
23. Ternovsky, V.B., Kuznetsova, A.A., Gurskaya, M.Yu., Buyadzhi, A.A.: Deterministic chaos and strange attractors in dynamics of Rydberg atomic and molecular systems in an electromagnetic field: Advanced computational approach. In: Abstracts of 14th International Conference "Dynamical Systems — Theory and Applications, Lodz, 11–14 December 2017. p.MAT320
24. Serga, I.N., Kuznetsova, A.A.: Dynamic enhancement and chaos elements in the theory of a nucleus and electron internal conversion in nuclides In: Abstracts of the XX International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology”, Odessa, 23–27 October 2015. p. 80
25. Glushkov, A.V., Kulakli, T.A., Kuznetsova, A.A., Lopatkin, Yu.N., Sakun, T.N.: Multi-photon excitation and dissociation for molecules: effect of the rotational and v-t relaxation and chaos. In: Abstracts of the International Conference “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology”, Odessa, 23–27 October 2015. p. 70
26. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A.: Nuclear Quantum Optics: Strong-field stark effect and multiphoton resonances. In: Abstracts of the 20th Central European Workshop on Quantum Optics, Stockholm 16–20 June 2013. p.P13
27. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A.: Finite Fermi systems in strong external fields: New Quantum Approach. In: Abstracts of the Quantum Theory: Reconsideration of Foundations 6, Växjö, 11–14 June 2012. p.P07
28. Glushkov, A.V., Kuznetsova, A.A.: Energy Approach to atomic and nuclear systems in an intense laser field and resonance phenomena in heavy ions collisions. In: Abstracts of the XVIII International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Paraty–Rio de Janeiro 1-7 December 2013. p.P13

АНОТАЦІЯ

Кузнєцова Г.О. Теоретична спектроскопія складних атомних систем в інтенсивному електромагнітному полі.– Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

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

Дисертація присвячена розвитку теоретичної релятивістської спектроскопії багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому DC електричному, AC електромагнітному полі з одночасним, послідовним урахуванням релятивістських, фотон-кореляційних та обмінно-поляризаційних ефектів, а також ефектів суттєво некулонівського групування рівнів в рідбергівських спектрах. Розвинутий новий релятивістський підхід до розрахунку енергетич-

них характеристик атомів, енергій та ширин штарківських резонансів у зовнішньому постійному електричному полі (ДС ефект Штарка) довільної сили, що базується на релятивістській операторній теорії збурень (ТЗ) і апараті багаточастинкової релятивістської ТЗ з ab initio нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетеру. Запропонована нова процедура розрахунку матричних елементів (амплітуд) операторів на базисах хвильових функцій. Для побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення використовується фундаментальний принцип мінімізації енергетичного функціонала, який представляє собою калібрувальну-неінваріантний внесок в радіаційні ширини. Розроблено новий послідовний суттєво релятивістський підхід до розрахунку поляризуємостей, який базується на формалізмі багаточастинкової релятивістської ТЗ з оптимізованим ab initio нульовим DFS наближенням, релятивістській процедурі штурмовських розкладань, методі релятивістських функції Гріна для урахування безперервного спектру при обчисленні сум другого порядку ТЗ. Представлені дані для енергій та ширин штарківських резонансів в спектрі літію в рідбергівських станах з $n=15$, $n_1, n_2=0, 1$; 13, 14; $m=0$ при напруженостях електричного поля $\varepsilon=2100, 2500$ В/см, а також основного стану атома водню, атому Na при $\varepsilon=3.59$ кВ/см і $n_1=22-26$ ($n_2=0,1$; $m=0$), в атомі Rb при $\varepsilon=2.189, 6.416$ кВ/см і $n_1=18-23$ ($n_2=0-2$; $m=0$), атомі K при $\varepsilon=3.59$ кВ/см, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1$; $m=0, 1$) і в атомі Cs при $\varepsilon=2.25, 8.25$ кВ/см і $n_1=16-22$ ($n_2=0-2$; $m=0$); виконане дослідження ефекту скейлінгу в залежностях наведених енергій і ширин як підпорогових, так і біля порогових штарковських резонансів від наведеної напруженості електричного поля. Представлені нові дані енергій та ширин автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі Yb, у т.ч., автоіонізаційних резонансів, які розпадаються за схемою $4f^{43}6s^27nl \rightarrow 4f^{44}6skl$; відкрито феномен суттєвого уширення резонансів, їх інтенсивної взаємодії для станів $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, які змішуються з резонансами $4f^{43} [^2F_{7/2}] 6s^2nd$ для різних значень $F=0-150$ В/см; представлені дані прецизійного розрахунку рідбергівських, автоіонізаційних штарківських резонансів ітербію $4f^{43}6s^2np$, $4f^{43}6s^2nf$ з $n>20$, $J=2$, $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=13-19$) в енергетичному інтервалі 22220–22405 см^{-1} та резонансів $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ і $4f^{43} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=28-36$) в енергетичному інтервалі 71665–71745 см^{-1} ; отримані дані знаходяться у відмінній узгодженості із даними експериментів на основі методу багатопотонної іонізаційної спектроскопії Jong-hoon Yi et al. Представлені нові дані для енергій, ширин автоіонізаційних рідбергівських резонансів в атомі Gd, які збуджуються в межах трьохступінчастої лазерно-іонізаційної схеми Letokhov et al з основного стану $4f^75d6s^29D_2^0$ в $4f^75d6s6p^9D_4^0$ стан і далі в $4f^75d6s7s^9D_4^0$ стан в енергетичному інтервалі 6300–6100А; показано, що ширина автоіонізаційного резонансу на довжині хвилі 6133,5 А в досить слабкому електричному полі збільшується від значення нашої теорії $\Gamma=0,074$ см^{-1} (експериментальне значення 0,07 см^{-1} ; значення в теорії без урахування обмінно-кореляційних ефектів 1,1 см^{-1}) до $\Gamma=0.34$ см^{-1} (експеримент $\Gamma=0.35$ см^{-1}) в електричному полі 100 В/см. Представлені дані розрахунків параметрів автоіонізаційних, рідбергівських штарківсь-

ких резонансів в спектрі тулію Tm, зокрема, ширин, енергій станів $4f^{13}{}_{7/2}6s_{1/2}(3)ns[5/2]$, ($n=25, 26$), які змішуються електричним полем з резонансними станами протилежної парності $4f^{13}{}_{7/2}6s_{1/2}(3)np_{1/2}[5/2]$ ($n=25, 26$); відкрито явище гігантського розширення автоіонізаційних резонансів, які змішуються під впливом зовнішнього електричного поля с резонансними станами протилежної парності при збільшенні напруженості електричного поля тільки до 150 В/см. Представлені дані розрахунків амплітуд радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризуємостей для атомів лужних елементів та інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm); розвинуто новий релятивістський квантово-механічний підхід до розрахунку енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі (АС ефект Штарка) довільної сили на основі апарату релятивістської операторної ТЗ та формалізму багаточастинкової релятивістської ТЗ (RMBPT) з оптимізованим ab initio DFS нульовим локальним наближенням, а також концепції квазістаціонарних, квазіенергетичних станів. Виконано вивчення динаміки іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі з параметрами: амплітуда поля $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, частота $\omega/2\pi=8.87$ 15 ГГц, 36 ГГц і розраховані залежності ймовірності іонізації P атомів Li, Rb, Tm від амплітуди поля, значення ефективного квантового числа n^* і часу взаємодії «атом-поле». Порівняння теоретичних даних по граничним значенням амплітуди поля $F_{10\%}$ (при якому має місце 10% іонізація атомів) з наявними експериментальними даними (Munich group для Rb: $n>60$, $F=(1.2-3.2)\cdot 10^{-9}$ ат.од, $\omega/2\pi=8.87$ ГГц, і Virginia group для Li: $n<42$, $\omega/2\pi=15$ ГГц) показало в цілому досить добру згоду теорії і експерименту. Показано, що динаміка іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$;) в мікрохвильовому полі характеризується антиперерізом сусідніх флоківських станів в спектрі квазіенергій при зміні амплітуди поля F , локальних порушень безперервного зростання. Розроблено нову релятивістську схему розрахунку швидкості іонізації високозбудженого атома в світловому та електричному полях одночасно й представлені дані для характеристик розпаду станів рубідію з $n=8, \dots, 16$ и $m=0$, $n_2=n-1$ в залежності від напруженості електричного поля до 30 кВ/см; розвинута нова, послідовна релятивістська ab initio теорія визначення швидкостей іонізації атомів, BBR зсувів частот атомних переходів (в атомних годинниках), в основі нової теорії лежить узагальнений релятивістський енергетичний підхід, який базується на S-матричному формалізмі Gell-Mann та Low з використанням фотонних пропагаторів типу Donoghue-Holstein (що містить теплову частину, яка враховує відомий планківський частотний розподіл для фотонів теплового резервуару). Вперше розроблені послідовні процедури перевірки виконання принципу калібрувальної інваріантності при розрахунках радіаційних амплітуд (ширин). Представлені результати розрахунків величин радіаційних ширин рівнів, ефективного часу життя, швидкості BBR-іонізації, коефіцієнту штарківського зсуву k , параметру BBR зсуву β частот атомних переходів для окремих рідбергівських nS , nP , nD станів атомів лужних елементів Na, K, Rb, Cs для $T=77, 300, 600$

К в інтервалі змінення $n=10-90$; для ряду станів проведено порівняння з даними квазікласичних обчислень, на основі coupled cluster методу, а також даними експериментів Gallakher-Cooke, яке свідчить про досить добре узгодження наших даних з експериментальними. Для рідбергівських станів з $n=20-40$ спостерігається відхилення результатів квазікласичних та модельних розрахунків від експерименту, що пов'язано з неврахуванням важливих внесків обмінно-поляризаційних ефектів, які в даній роботі враховані достатньо коректно.

Ключові слова: теоретична релятивістська спектроскопія, атомні системи, радіаційні переходи та іонізація, штарківські резонанси, інтенсивне електромагнітне поле, теплове випромінювання, релятивістська операторна теорія збурень

Kuznetsova A.A. Theoretical spectroscopy of complex atomic systems in an intense electromagnetic field. - 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 theoretical relativistic spectroscopy of multielectron atomic systems in an intense external DC electric, AC electromagnetic field with simultaneous, sequential consideration of relativistic, photon-correlation and exchange-polarization effects as well as effects of significantly non-coulomb level's grouping in Rydberg spectra. A new relativistic approach to the calculation of the energy characteristics of atoms in an external constant electric field (DC Stark effect) of arbitrary strength has been developed, based on the relativistic operator perturbation theory (PT) and the apparatus of a multiparticle relativistic perturbation theory with zero local the Dirac-Fock-Slater DFS approximation.

A new procedure for calculating matrix elements (amplitudes) of operators on the basis of wave functions is proposed. To build an optimized one-particle approximation, the fundamental principle of minimization of the energy functional is used, which is a gauge-non-invariant contribution to the radiation widths. A new consistent essentially relativistic approach to the calculation of energy and spectroscopic parameters of atomic systems, including atomic polarizability, has been developed, which is based on the formalism of a multiparticle relativistic perturbation theory with an optimized ab initio zero local approximation, a generalized relativistic procedure of assault expansions, as well as the method of relativistic Green's functions for efficient consideration of the continuous spectrum when calculating the sums of the PT second order. The results of calculation of energies and widths of Stark resonances in the spectrum of lithium atom in Rydberg states with $n=15$, $n_1, n_2=0, 1; 13, 14; m=0$ at electric field strengths $\varepsilon=2100, 2500, \text{V/cm}$, as well as the ground state of the hydrogen atom, Na atom at $\varepsilon=3.59 \text{ kV/cm}$ and $n_1=22-26$ ($n_2=0, 1; m=0$), in the Rb atom at $\varepsilon=2.189, 6.416 \text{ kV/cm}$ and $n_1=18-23$ ($n_2=0-2; m=0$), in the K atom at $\varepsilon=3.59 \text{ kV/cm}$, $n_1=21-25$ ($n_2=0, 1; m=0,1$) and in the Cs atom at $\varepsilon=2.25, 8.25 \text{ kV/cm}$ and $n_1=16-22$ ($n_2=0-2; m=0$). The presence of the so-called scaling effect in the de-

pendences of the induced energies and the widths of both subthreshold and near-threshold Stark resonances on the induced electric field strength F is studied for hydrogen atoms and alkali elements. There are listed energies and widths of autoionization, Rydberg Stark resonances in the spectrum of rare earth atom Yb, in particular, autoionization resonances, which decay according to the scheme $4f^{13}6s^27nl \rightarrow 4f^{14}6skl'$; it is discovered the phenomenon of significant broadening of resonances, their intense interaction for states $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$, $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$, which are mixed with resonances $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nd$ for different values of the magnitude of the electric field strength $F=0-150$ V/cm; there are listed data of precision calculation of Rydberg, autoionization Stark resonances of ytterbium $4f^{13}6s^2np$, $4f^{13}6s^2nf$ with $n>20$, $J=2$), $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ and $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=13-19$) in the energy range 22220–22405 cm^{-1} and resonances $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2np[5/2]_2$ and $4f^{13} [^2F_{7/2}]6s^2nf[5/2]_2$ ($n=28-36$) in the energy range 71665–71745 cm^{-1} ; the obtained data are in a good agreement with the data of precision experiments based on the method of multiphoton ionization spectroscopy Jong-hoon Yi et al from the ground state to the state and then the state in the energy range 6300–6100Å. The results of calculation of energies and widths of autoionization Rydberg resonances in the Gd atom, which are excited within the three-stage laser ionization scheme by Letokhov et al from the ground state $4f^7 5d 6s^2 9D_2^0$ to the state $4f^7 5d 6s 6p^9 D_4^0$ and then the state $4f^7 5d 6s 7s^9 D_4^0$ in the energy range 6300–6100Å; it is shown that the width of autoionization resonance at a wavelength of 6133.5 Å in a rather weak electric field increases from the value of our theory $G=0.074$ cm^{-1} (experimental value 0.07 cm^{-1} ; theoretical value without accounting the exchange-correlation effects 1.1 cm^{-1}) to $G=0.34$ cm^{-1} (experiment $G=0.35$ cm^{-1}) in an electric field of 100 V/cm. The data of calculations of parameters of autoionization, Rydberg Stark resonances in the spectrum of thulium Tm, widths and energies of states $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)ns[5/2]$, ($n=25, 26$), which mix with resonant states of opposite parity $4f^{13} 7/2 6s_{1/2}(3)np_{1/2}[5/2]$ ($n=25, 26$) in an external electric field; it is discovered the phenomenon of a giant expansion of autoionization resonances with increasing electric field strength only up to 150 V/m, which is of great importance for the development of modern effective laser photoionization schemes for the separation of heavy isotopes. Data of calculations of amplitudes of radiation transitions, oscillator strengths, atomic polarizabilities for alkali elements and inert gases (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), rare earth elements (Yb, Tm) are listed. A new relativistic quantum-mechanical approach to the calculation of characteristics of atoms in an external alternating electromagnetic field (AC Stark effect) of arbitrary strength has been developed on the basis of the relativistic operator perturbation theory and the multi-body relativistic perturbation theory with a local DFS approximation, as well as the concept of quasi-stationary, quasi-energy states. For the first time, a detailed study of the dynamics of ionization of Li, Rb, Tm atoms in the Rydberg states (Li: $n=41-70$; Rb: $n=51-70$; Tm: $n=60-70$) in a consistent relativistic approximation is performed in microwave field with parameters: field amplitude $F=(1.2-3.2) \cdot 10^9$ a.u., frequency $\omega/2\pi=8.87, 15, 36$ GHz and calculated dependences of ionization proba-

bility P for Li, Rb, Tm atoms from the field amplitude, the value of the effective quantum number n^* and the interaction time "atom-field"; comparison of theoretical data on the limit values of the field amplitude $F_{10\%}$ (at which there is 10% ionization of atoms) with available only for some n experimental data (Munich group for Rb: $n > 60$, $F = (1.2-3.2) \cdot 10^{-9}$ a.u., $\omega/2\pi = 8.87$ GHz, and Virginia group for Li: $n < 42$, $\omega/2\pi = 15$ GHz) showed a fairly good agreement between theory and experiment. It is shown that the ionization dynamics of Li, Rb, Tm atoms in the Rydberg states (Li: $n = 41-70$; Rb: $n = 51-70$; Tm: $n = 60-70$) in a microwave field is characterized by irregular features, anti-cross section of neighboring Flocke states in the spectrum of quasi-energies when the field amplitude F changes, and local disturbances of continuous growth are also observed; a new relativistic scheme for calculating the ionization rate of a highly excited atom in light and electric fields is developed and calculation data for the decay characteristics of rubidium atom states with quantum numbers $n = 8, \dots, 16$, and $m = 0$, $n_2 = n - 1$ in depending on the electric field strength up to 30 kV/cm are presented. A new, consistent relativistic ab initio theory of determining the ionization rates of atoms, BBR shifts of atomic transition frequencies (in atomic clocks) has been developed; the new theory is based on a generalized relativistic energy approach based on the Gell-Mann and Low S-matrix formalism using Donoghue-Holstein photon propagators (the sum of the part corresponding to zeroth temperature and the thermal part taking into account the known Planck frequency distribution for photons of the heat reservoir), as well as a new method of relativistic multibody perturbation theory RMBPT. For the first time, effective and maximally consistent procedures for verifying the implementation of the principle of gauge invariance in the calculation of radiation amplitudes (widths) have been developed and implemented. The results of relativistic calculations of the radiation widths of levels, effective lifetimes, BBR-ionization rates, Stark shift coefficient, parameter β for BBR shift of atomic transition frequencies for individual Rydberg nS , nP , nD states of atoms of alkaline elements Na, K, Rb, Cs for temperatures $T = 77, 300, 600$ K are listed in a wide range of change of $n = 10-90$. For a number of states a comparison is made with the data of advanced quasiclassical calculations, calculations based on the coupled cluster method, etc., as well as with the data of quite precise experiments Gallakher-Cooke etc., which indicates good coordination of our data with experimental ones; it is shown that for Rydberg states with $n = 20-40$ there is a deviation of the results of quasiclassical and model calculations from the experiment, which is due to failure to take into account the fundamentally important contributions of exchange-polarization effects, which in this work are sufficiently taken into account.

Key words: theoretical relativistic spectroscopy, atomic systems, radiation transitions and ionization, Stark resonances, intense electromagnetic field, thermal radiation, relativistic operator perturbation theory

