

ТЕРНОВСЬКИЙ Валентин Борисович

д-р фіз.-мат. наук, доцент,

Національний університет «Одеська морська академія»

ORCID ID: 0000-0002-4402-4157

Україна

СУЧАСНІ ПІДХОДИ В ТЕОРЕТИЧНІЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ ВАЖКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

Дослідження енергетичних, радіаційних, спектроскопічних властивостей важких нейтральних і сильно іонізованих атомів (так званих багатозарядних іонів) має принципове фундаментальне значення в багатьох областях атомної фізики (теорія атомних спектрів, спектроскопія, теорія спектральних ліній), астрофізики, фізики плазми, фізики лазерів тощо. До теперішнього часу, з огляду на величезне значення, яке відіграє атомна спектроскопія, була розроблена досить велика кількість різних методів розрахунку енергетичних і спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомів та іонів, з урахуванням в тій чи іншій мірі кореляційних, релятивістських, а також радіаційних (останні особливо важливі для важких атомів та важких іонів високої кратності іонізації) ефектів.

До числа найбільш широко використовуваних і досить популярних методів, перш за все, слід віднести метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока (ХФ), Дірака-Фока (ДФ) в одно- і багатоконфігураційному наближенні, відносно новий метод мега-ДФ, методи нерелятивістської та релятивістської теорії збурень (ТЗ) по $1/Z$ (Z – заряд ядра атома), ТЗ з модельним потенціалом нульового наближення, з ХФ або ДФ нульовим наближенням, метод псевдопотенціалу, метод функціонала щільності, наближення випадкових фаз в нерелятивістському та релятивістському варіантах, метод одно- і багатоканального квантового дефекту та ін.

Зрозуміло, що розвиток методів розрахунку постійно супроводжувався появою відповідних чисельних кодів програмних комплексів (PC). В останнє десятиліття серйозним проривом стало створення і використання в багатьох лабораторіях PC на основі різних версій ДФ, в т.ч. так званого методу мега-ДФ, ДФ-Брейт («AS»-packages, «Hartree-Fock», «MCHF», «Dirac»-package, «Beta-package», «QED», «FAS», «GRASP», «BERTHA»), а також «Superstructure», «Cowan-ISCAN», «Superatom-ISCAN», Cowan code, Hullac, MCDF, RMBPT).

На основі зазначених методів і РС для багатьох атомів та іонів були розраховані енергетичні, радіаційні та спектроскопічні властивості (спектри, енергії рівнів, ймовірності радіаційних переходів, оже-переходів, перерізи збудження, іонізації, зіткнень, ширини радіаційного та автоіонізаційного розпаду, штарківських та зееманівських резонансів та ін.). Ці розрахунки мають велике значення для вивчення і розуміння спектрів багатьох атомів та іонів, а також різноманітних радіаційних процесів з їх участю.

Але практично всі традиційні методи, включаючи навіть досить просунуті в теоретичному та особливо обчислювальному відношенні методи, незважаючи на визнані переваги, мають ті чи інші недоліки. Особливо їх недосконалість проявляється при виконанні розрахунків характеристик атомів в сильних зовнішніх електромагнітних полях, розрахунків спектру високозбуджених, автоіонізаційних станів, що лежать в області континууму, в тому числі, в присутності зовнішніх електричного та лазерного полів і т.д. Як наслідок, зазначені методи у переважній більшості характеризуються низькою точністю, причому помилка обчислень може перевищувати кілька тисяч зворотних см^{-1} . Зокрема, теоретичні дані можуть відрізнятися від експериментальних у декілька разів (тобто різниця може досягати кілька сотень відсотків).

Крім цього, серйозні труднощі виникають під час розрахунків атомних спектрів з урахуванням кореляційних ефектів методом накладення конфігурацій, ефекту суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах у повному багатоконфігураційному наближенні Хартрі-Фока ($H\Phi=HF$) або його релятивістському варіанту, а саме, Дірака-Фока ($D\Phi=DF$).

Як відомо, при розрахунках складних атомів та іонів, а також рідбергівських та автоіонізаційних станів атомних систем вкрай важливого значення набуває коректне прецизійне урахування таких специфічних обмінно-кореляційних ефектів, наприклад, швидке «розмазування» вихідного стану по неозорому набору конфігурацій, ефект суттєво некулонівського групування рівнів у рідбергівських спектрах, тиск континууму і т.д. Необхідність акуратного урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів в прецизійній теорії багатеелектронних атомів передбачає систематичний розгляд різних класів обмінно-кореляційних поправок та їх послідовне систематичне обчислення з використанням фейнманівської техніки діаграм. Проте в рамках вище згаданих методів ці ефекти не допускають адекватного опису енергетичних і спектроскопічних характеристик.

Зазначені проблеми суттєво загострюються у випадку проведення розрахунків спектрів важких і надважких атомних систем або таких істотно релятивістських систем, як важкі багатозарядні іони. Й головною тут стає відома із самого початку розвитку квантової механіки атомів та молекул проблема побудови оптимізованого одноквазічастинкового наближення, яке генерує відповідно оптимальні (оптимізовані) базиси електронних (адронних у випадку адронних атомів) хвильових функцій, або орбіталей¹.

Використання в традиційних методах базисів, які генеруються в нульовому наближенні методів самоузгодженого поля типу звичайних ХФ, ДФ, спрощених версій методу функціоналу густини (ФГ) та аналогічних, у розрахунках різноманітних констант елементарних електронно-атомних процесів (розсіювання електронів на атомах, процеси зіткнень, спектри автоіонізаційних та рідбергівських станів, процеси фотозбудження, фотоіонізації тощо) часто призводить до відмінностей в результатах в кілька разів. Фундаментальна причина цього недоліку пов'язана з обов'язковістю побудови оптимізованого одноквазічастинкового уявлення, в рамках якого генеруються оптимальні максимально чисті базиси векторів станів.

Згідно із положеннями квантової електродинаміки, як єдиної послідовної теорії електромагнітних взаємодій, фізичні характеристики природно не повинні залежати від калібрування потенціалів електромагнітного поля або фотонного пропагатору. Але, як показує багаточисельний досвід атомних розрахунків, при проведенні конкретних обчислень виявляється, що внески окремих порядків ТЗ фактично залежать від калібрування фотонного пропагатору, причому шукана калібрувальна неінваріантність є наслідком наближеного урахування саме багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів, що також свідчить про низьку якість обчислюваних базисів електронних хвильових функцій.

Доречно нагадати класичний приклад прояву порушення принципу калібрувальної інваріантності в атомній спектроскопії, а саме, відомий факт розбіжності значень сил осциляторів, ймовірностей радіаційних переходів, радіаційних ширин, розрахованих за формулами «довжини», «швидкості», «прискорення». Аналогічна картина має місце й для перерізів збудження².

1 Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Ignatenko A.V., Numerical Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory, P.2. Odessa: TEC. 2015. 179 P.

2 Glushkov A., Ivanov L. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions. Journa Physics Letters A, 1992. Vol. 170 (1). P.33-38.

Точність збігу цих величин вважається ключовим показником якості розрахунку і, відповідно, якості генерації базису хвильових функцій нульового наближення. В результаті такі популярні методи атомних розрахунків, як методи самоузгодженого поля, ХФ, ДФ, а також досить ефективні в обчислювальному відношенні методи ФГ, та популярні в окремих задачах методи модельного потенціалу і псевдо-потенціалу або дають результати, які мають не зовсім адекватну спектроскопічну точність, або вони взагалі не пристосовані для масових розрахунків атомних констант складних багатоелектронних атомів, іонів, у т.ч. багатозарядних іонів.

Важливо зазначити, що в останні роки набули суттєвого розвитку дійсно ефективні методи типу мега-ДФ, різні версії релятивістської ТЗ, квантово-електродинамічної (КЕД) ТЗ, однак і вони вимагають виконання акуратного одночасного високоточного врахування всіх груп релятивістських, обмінно-кореляційних, ядерних та радіаційних ефектів, особливо при вивченні характеристик важких атомів та іонів, а також потребують використання серйозних обчислювальних ресурсів.

Серед ефективних способів подолання вище згаданих складнощів можна зазначити підхід, запропонований в роботі³, який полягає у побудові оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в теорії релятивістського атома (відповідно, передбачається коректне врахування багаточастинкових кореляційних ефектів).

Інші альтернативні методи та схеми побудови ефективного одноквазічастинкового наближення включають метод натуральних орбіталей Девідсона, підхід Dietz-He⁴, який базується на використанні варіаційно отриманих рівнянь типу ХФ (так звані g-ХФ рівняння), які можна вважати більш раціональними, ніж у звичайній схемі ХФ. Наприклад, у відомому підході Рудзікаса-Каняускаса в рамках амплітудної схеми розрахунку сил осциляторів калібрувальна постійна використана в якості підгінного параметру⁵. Проте, за винятком відомої теоретичної непослідовності, цей підхід в ряді важливих випадків не забезпечує спектроскопічну точність розрахунку.

Треба визнати, що в розрахунках спектрів важких і надважких атомних систем проблема коректного одночасного врахування релятивістських,

3 Glushkov A. V., Malinovskaya S. V., Svinarenko A. A., Chernyakova Yu. G. Cooperative laser-electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multi-charged ion in laser field. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2004. Vol. 99. N 5. P.889-893.

4 Buyadzi V. V., Zaichko P. A., Gurskaya M. Y., Kuznetsova A. A., Ponomarenko E. L., Ternovsky V. B. Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field. *Journal of Physics: C. Series (IOP, London)*, 2017. Vol. 810. P.012047.

5 Grant I. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules*/ Grant I. Oxford: Oxford Univ. Press, 2007. 650 P.

радіаційних, а також ядерних й кореляційних ефектів набуває виняткового значення. Очевидно, що фундаментальна прецизійна теорія, що претендує на опис зі спектроскопічною точністю енергетичних і спектральних параметрів важких і надважких атомів та іонів (у т.ч. рівнів енергії, сил осциляторів, параметрів надтонкої структури і т.д.), повинна адекватно враховувати весь набір релятивістських, радіаційних (зокрема, власно-енергетичний внесок лембівського зсуву та внесок за рахунок поляризації вакууму, включаючи КЕД поправки вищих порядків квантово-електродинамічної теорії збурень, а також двохпетльові поправки Källen-Sabry порядку та Wichmann-Kroll порядку), ядерних ефектів (включаючи скінченний розмір ядра, ефекти Bohr-Weisskopf и Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow та ін.), складних обмінно-кореляційних поправок (включаючи поправки в наближенні випадкових фаз, поляризацію остову, екрануючі ефекти, поправки Бракнера, тиск континууму тощо).

Розвиток нових напрямків в галузі атомної оптики і спектроскопії, лазерної фізики та квантової електроніки, таких як прецизійна спектроскопія важких і надважких атомів і багатозарядних іонів, новітні астрофізичні дослідження, імпульсні методи нагріву в експериментах з керованого термоядерного синтезу, створення принципово нових схем лазерів в ВУФ, а також подальше вдосконалення та розвиток нових експериментальних технологій, у тому числі з використанням нових лазерних технологій, прискорювачів й т.і., обумовлює нагальну потребу вирішення актуальних і важливих завдань атомної оптики і лазерної фізики на принципово новому релятивістському рівні теоретичної послідовності і спектроскопічної точності. Одним з таких завдань є подальший розвиток релятивістської теоретичної прецизійної спектроскопії багатоелектронних атомів та іонів.

Теоретичні основи одного з найбільш послідовних за теперішнього часу підходів щодо вирішення проблеми побудови оптимізованого одноквазічастинкового уявлення в теорії релятивістського атома були закладені в серії робіт Glushkov-Ivanov-Ivanova⁶, в яких розвинена нова процедура побудови калібрувально інваріантних базисів релятивістських орбіталей (тобто базисів електронних хвильових функцій). Новий підхід заснований на застосуванні фундаментального принципу мінімізації калібрувально-неінваріантного внеску поляризаційних діаграм четвертого порядку КЕД ТЗ в енергію системи. Для його реалізації використаний

6 Buyadzhi V. V., Zaichko P. A., Gurskaya M. Y., Kuznetsova A. A., Ponomarenko E. L., Ternovsky V. B. Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atomic systems in a Black-body radiation field. Journal of Physics: C. Series (IOP, London), 2017. Vol. 810. P. 012047.

апарат КЕД ТЗ та адіабатичний формалізм Гелл-Мана-Лоу. Послідовна версія релятивістського калібрувально-інваріантного підходу Glushkov-Ivanov-Ivanova найбільш повно відповідає задачі обчислення енергетичних, радіаційних і спектроскопічних характеристик важких атомів та іонів з одночасним, прецизійним урахуванням релятивістських, кореляційних, ядерних, КЕД поправок.

У перших оригінальних версіях підходу Glushkov-Ivanov-Ivanova використовувались спрощені процедури оптимізації базисів, зокрема, автори обмежувалися початково лише воднеподібним наближенням при визначенні класу функцій для опису електронної густини в атомі. Далі розроблялися версії з чисельною генерацією оптимальних базисів поза рамками воднеподібного наближення⁷. Також заслуговує уваги підхід, в якому для розв'язання задач з'ясування ефекту лазерного посилення і кінетики заселення рівнів в плазмі Ne-, Ni-подібних іонів використана схема з доповненням базису дискретних станів рівняння Дірака штурмовським доповненням для врахування станів континууму (підхід Ivanov-Ivanova)⁸.

Свій розвиток фундаментальна прецизійна теорія отримала завдяки подальшим дослідженням, на основі яких розвинуто теоретичні основи нового ефективного методу комбінованої релятивістської калібрувально-інваріантної багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим Dirac-Fock-Breit нульовим наближення (RMBPT-ODF) та узагальненого релятивістського енергетичного підходу⁹. Розвинутий підхід у порівнянні зі стандартними неоптимізованими релятивістськими методами дозволяє отримати більш точні дані як по енергіях, так й амплітудам та ймовірностям радіаційних переходів.

На основі нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної теорії збурень RMBPT-ODF та узагальненого релятивістського енергетичного підходу отримано нові прецизійні дані: інформацію щодо надважкого елемента ніхонія $^{278}_{113}\text{Nh}$ (виконано розрахунок спектру низько розташованих рівнів з урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних та обмінно-кореляційних поправок)¹⁰; дані для

7 Glushkov A. V. Relativistic quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems. Odessa: Astroprint, 2008. 900 P.

8 Глушков О.В. Квазічастковий підхід у теорії функціоналу щільності при кінцевих температурах та динаміка ефективного бозе-конденсату. Український фізичний журнал, 1993. Т.38, № 8. С.152-157.

9 Kuznetsova A. A., Glushkov A. V., Gurskaya M. Yu., Buyadzi A. A., Ternovsky V. B. Optimized relativistic operator perturbation theory in spectroscopy of multielectron atom in an electromagnetic field: Sensing spectral parameters. Sensor Electronics and Microsystem Technologies, 2018. Vol. 15. N 4. P.50-57.

10 Ternovsky V. B., Mironenko D. A., Glushkov A. V., Ternovsky E. V., Svinarenko A. A. Radiation Transition Probabilities for Heavy Rydberg Atoms within Advanced Relativistic Energy Approach. Abs. of the International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS; Dublin, Ireland), 2018. P.129 (We. P. 24).

енергій переходів, сил осциляторів і ймовірностей радіаційних переходів в спектрі атому талію Tl^{11} , дані для енергій рівнів конфігурацій $6p5d$, $6p^2$, $5d^2$, $7s6p$ атому ітербію Yb^{12} , для енергій та ширин збуджених, у т.ч. автоіонізаційних станів атома тулію $Tm\ 4f^{-1}, 6s(J12)nsnp[J]$ з квантовим числом $n=25-50$, прецизійні дані по енергіям рівнів для вищих членів рідбергівських серій урану U^{13} .

Слід зазначити, що нові дані по спектроскопії важких атомів мають велике значення з точки зору теоретичної перевірки нових ефектів на стику традиційної атомної оптики та спектроскопії, а також фізики електрослабких взаємодій, зокрема, пошуку ефектів Нової фізики за межами Стандартної Моделі, з'ясування ролі слабких взаємодій в атомній спектроскопії, вивчення властивостей нового стану речовини, так званої рідбергівської матерії тощо. Крім того, вони мають практичне значення для вирішення задач побудови оптимальних схем лазерного фотоіонізаційного поділення важких, у т.ч. радіоактивних ізотопів та ядерних ізомерів.

Висновок.

Розвинені вперше в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії принципово нові підходи і отримані на їх основі в переважній більшості із спектроскопічною точністю оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в сучасній теоретичній оптиці і спектроскопії важких атомних систем.

DOI: 10.51587/9798-9866-95921-2023-011-219-225

- 11 Ternovsky V. B. Theoretical Studying Spectra of Lanthanides and Actinides Atoms within Relativistic Many-Body Perturbation Theory: Rydberg and Autoionization Resonances. Abs. of the 23rd International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXIII; Kruger Park, South Africa), 2018. P. 64.
- 12 Ternovsky V. B., Svinarenko A. A., Dubrovskaya Yu. V. Theoretical studying excited states spectrum of the ytterbium within the optimized relativistic many-body perturbation theory. Photoelectronics, 2020. Vol. 29. P. 118-125.
- 13 Ternovsky V. B. Theoretical studying Rydberg states spectrum of the uranium atom on the basis of relativistic many-body perturbation theory. Photoelectronics, 2019. Vol. 28. P.39-45.