

На правах рукописи

Корюкина Елена Владимировна

***Ab initio* методы расчета влияния электрических
полей на спектральные и электрические свойства
атомов, ионов и двухатомных молекул**

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Томск – 2013

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», на кафедре физики плазмы.

Официальные оппоненты:

Казарян Мишик Айразатович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, отдел люминесценции, ведущий научный сотрудник

Шаповалов Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра теоретической физики, заведующий кафедрой

Широков Игорь Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Омский государственный технический университет», кафедра комплексной защиты информации, профессор

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва

Защита состоится 19 декабря 2013г. в 14 часов 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.267.07, созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан 3 сентября 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Ивонин
Иван Варфоломеевич

Актуальность темы

Научный и практический интерес исследований влияния электрических полей на спектральные и электрические свойства атомов, ионов и молекул определяется, прежде всего, широким кругом фундаментальных и прикладных задач теоретической физики, физики плазмы, астрофизики и молекулярной спектроскопии. Знание закономерностей в поведении сдвигов и расщепления атомных и ионных энергетических уровней, вероятностей спонтанных переходов, времен жизни энергетических уровней и интенсивностей спектральных линий требуется при проведении диагностики плазмы, при исследовании атмосферы звезд, а также при разработке технологий создания новых источников излучения. Теоретическое исследование электрических свойств двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях необходимо для выдвижения физически корректной концепции поведения функций мультипольных моментов двухатомных молекул во всем диапазоне изменения межъядерного расстояния. Функции мультипольных моментов используются в колебательной спектроскопии, при изучении атомно-молекулярных комплексов и при исследовании отклика молекул на внешнее электрическое поле. Расчет спектральных и электрических свойств атомов и молекул требует надежных и эффективных методов вычислений. Наиболее точными методами расчета являются *ab initio* методы, в основе которых лежит решение уравнения Шредингера в рамках теории возмущений. Разработка новых *ab initio* методов является сложной задачей, требующей, в дополнение к выводу уравнений нового метода, создания пакетов компьютерных программ, реализующих алгоритм предлагаемого метода. Кроме того, поскольку в теории возмущений расчеты проводятся с использованием базиса невозмущенных функций, весьма существенным является вопрос о качестве базиса и о критериях выбора оптимального набора базисных функций. Такие критерии, основанные на принципе минимакса, сформулированы и применены в диссертации.

Следует отметить, что на момент начала научных исследований, проводимых в диссертации, теоретический анализ динамического эффекта

Штарка в полях лазерного излучения проводился в рамках нестационарной теории возмущений¹. В случае возмущения атомов оптическими лазерами были получены формулы, определяющие зависимость атомных штарковских сдвигов от напряженности электрического поля в аналитическом виде, однако аналитические зависимости сдвигов от частоты поля, от заряда ядра и от электронной структуры атома получить не удалось. При этом область применимости полученных формул ограничивалась следующими допущениями: возмущение полем должно быть много меньше расстояния между соответствующими невозмущенными уровнями, энергетические уровни являются изолированными, рассматриваются только ридберговские атомы². Однако к тому времени стали появляться источники возбуждения, генерирующие электрические поля в других, по сравнению с лазерами, диапазонах напряженности и частоты поля (в частности, высокочастотные лампы и спиновые светодиоды). Кроме того, и в астрофизике, и при проведении диагностики плазмы, и в технологиях создания источников излучения возникла настоятельная потребность получения различных закономерностей в поведении спектральных свойств атомов и ионов в электрических полях с частотой и напряженностью, изменяющимися в широких диапазонах. Таким образом, возникла необходимость создания унифицированного *ab initio* подхода, дополняющего теорию возмущений, позволяющего провести расчет спектральных свойств любых атомов и ионов в электрических полях различной напряженности и частоты, а также выявить закономерности в поведении спектральных свойств атомов и ионов.

Электрические свойства молекул обусловлены электростатическим взаимодействием зарядов ядер и электронов, образующих молекулу, и характеризуются мультипольными моментами. В адиабатическом приближении

¹ Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Динамический штарковский сдвиг атомных уровней // Успехи физических наук. 1999. Т. 169. № 7. С.753–772.

² Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле. М: Энергоатомиздат, 1978. С. 288.

Рапопорт Л. Б., Зон Б. А., Манаков Н. Л. Теория многофотонных процессов в атомах. М: Атомиздат, 1978. С. 182.

мультипольные моменты двухатомных молекул являются функцией межъядерного расстояния R . Существующие *ab initio* методы позволяют провести высокоточные расчеты функций мультипольных моментов в окрестности равновесных межъядерных расстояний и при больших R , однако в принципе не дают возможности рассчитать эти функции при $R \rightarrow 0$. На малых межъядерных расстояниях функции мультипольных моментов рассчитываются не очень точными полуэмпирическими методами, корректность которых каждый раз требует дополнительной проверки. Вопрос о закономерностях в поведении функций мультипольных моментов на малых межъядерных расстояниях, о смене полярности химической связи в молекулах не обсуждался в связи с отсутствием *ab initio* методов расчета в этой области R . Таким образом, возникла необходимость в развитии *ab initio* метода расчета функций электрических мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях, поиске закономерностей в поведении функций мультипольных моментов и исследовании электрических свойств двухатомных молекул на основании проведенных расчетов.

Перечисленная выше совокупность нерешенных проблем и назревших задач в области теоретической физики, спектроскопии плазмы и молекулярной спектроскопии, их практическая значимость в различных областях науки и техники, решения этих проблем, предлагаемые в диссертации – все это вместе определяет актуальность исследований данной диссертации.

Для решения поставленных задач в диссертации сформулированы и развиты два новых *ab initio* метода, которые дают возможность провести теоретическое исследование влияния электрических полей на спектральные и электрические свойства атомов, ионов и двухатомных молекул. Предложенные методы реализованы в трех пакетах компьютерных программ. На основании расчетов, проведенных в рамках предложенных методов, впервые выявлены закономерности в поведении спектральных характеристик атомов и ионов благородных газов в циркулярно поляризованном электрическом поле, а также закономерности в поведении функций дипольных моментов двухатомных

молекул. Полученные результаты, интересные с теоретической точки зрения, имеют многочисленные практические приложения.

Цели и задачи исследования

1. Определение критериев выбора оптимального базиса невозмущенных функций для атомов и ионов. Реализация алгоритма нахождения оптимального набора базисных функций в пакете программ. Проверка эффективности этих критериев.
2. Построение *ab initio* метода расчета спектров излучения атомов и ионов в переменном электрическом поле, свободного от ограничений, присущих теории возмущений. Реализация алгоритма сформулированного метода в пакете компьютерных программ.
3. Поиск закономерностей в поведении спектральных свойств атомов и ионов благородных газов в циркулярном электрическом поле: динамического эффекта Штарка, вероятностей переходов, времен жизни и интенсивностей спектральных линий.
4. Построение *ab initio* метода расчета функций электрических мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях. Реализация алгоритма сформулированного метода в пакете компьютерных программ.
5. Исследование электрических свойств двухатомных молекул в рамках предложенного *ab initio* метода. Поиск закономерностей в поведении функций дипольного момента двухатомных молекул.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту

1. Сформулированы критерии выбора оптимального набора базисных функций, обеспечивающих корректные расчеты спектральных и электрических свойств атомов и ионов. Алгоритм поиска оптимальных

базисных функций реализован в пакете программ MINMAX. Эффективность критериев выбора проверена в расчетах спектральных свойств как невозмущенных атомов и ионов, так и атомов в статическом электрическом поле.

2. Сформулирован и развит *ab initio* метод расчета спектров излучения любых атомов и ионов в переменном электрическом поле. Предложенный метод, основанный на диагонализации матрицы энергии атома/иона в электрическом поле, свободен от ограничений, присущих теории возмущений, и позволяет проводить расчеты спектральных свойств атомов и ионов в многоуровневом приближении. Алгоритм этого метода реализован в пакете программ StarkD.
3. На основании расчетов в рамках метода диагонализации матрицы энергии, впервые установлены закономерности в поведении динамического эффекта Штарка для атомов и ионов благородных газов, возникающие при изменении напряженности и частоты циркулярного электрического поля, а также при изменении заряда ядра. Выявлена и изучена зависимость поведения сдвига и расщепления энергетических уровней от их электронной структуры и смешивания штарковских состояний. Установлена зависимость направления сдвигов штарковских состояний рассматриваемых атомов и ионов в электрическом поле от их электронной конфигурации.
4. Найдены закономерности в поведении вероятностей спонтанных переходов между штарковскими состояниями атомов благородных газов при изменении параметров электрического поля, а также при увеличении заряда ядра атома. Показано, что распределение вероятностей переходов в электрическом поле упорядочено по магнитному квантовому числу M . Установлена классификация поведения этих вероятностей в зависимости от электронной структуры штарковских состояний, между которыми происходят переходы.
5. Определены закономерности в поведении вероятностей спонтанных переходов между энергетическими уровнями атомов благородных газов в

зависимости от изменения параметров электрического поля. Получена формула полиномиальной зависимости этих вероятностей от напряженности электрического поля. Впервые проведены расчеты времен жизни атомных уровней и интенсивностей линий в спектрах излучения атомов в переменном циркулярном электрическом поле.

6. Сформулирован и развит *ab initio* метод расчета функций электрических мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях. Предложенный метод, основанный на модели объединенного атома и формализме неприводимых тензорных операторов, реализован в мультиязычном пакете программ DipolF.
7. В рамках предложенного *ab initio* метода расчета функций мультипольных моментов на малых межъядерных расстояниях установлены зависимости в поведении функций дипольных моментов двухатомных молекул от межъядерного расстояния и заряда ядра объединенного атома, формирующего молекулу. Установлены периодические свойства этих функций на малых межъядерных расстояниях. Сформулированы правила смены полярности двухатомных молекул. Построена физически корректная концепция поведения функций дипольных моментов двухатомных молекул во всем диапазоне изменения межъядерного расстояния.

Научная новизна и практическое значение результатов

Все основные результаты, выносимые на защиту, получены впервые. Расчеты спектральных свойств атомов и ионов в электрических полях циркулярной поляризации (с пакетами программ MINMAX и StarkD), проведенные *ab initio* методом, предложенным в диссертации, являются частью исследований в рамках гранта INTAS–01–0200. В дальнейшем полученные теоретические результаты могут быть широко использованы в практических приложениях: для определения напряженности электрического поля внутри разряда, для диагностики плазмы (определение температуры электронов, MSE-

диагностика и т.д.). Знание зависимости штарковских сдвигов от частоты электрического поля необходимо при экспериментальных исследованиях влияния параметров поля на оптические характеристики высокочастотных ламп. В астрофизике спектры атомов и ионов в электрических полях требуются для определения светимости звезд, давления в их атмосфере, а также при изучении процесса эволюции молодых звезд. Вероятности спонтанных переходов необходимы для расчета времен жизни уровней атомов/ионов и интенсивностей спектральных линий в электрическом поле. Наконец, теоретические вероятности переходов нужны как входные данные при решении уравнений баланса заселенностей. *Ab initio* метод, предложенный для расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях, восполняет отсутствие точных теоретических методов расчета этих функций при $R \rightarrow 0$ и представляет самостоятельную теоретическую ценность. В практических приложениях предложенный подход позволяет получить корректные функции дипольных моментов для всех $R \in [0, \infty)$, необходимые при расчетах колебательных спектров молекул и межмолекулярных сил, при исследовании атомно-молекулярных комплексов, а также при расчете отклика двухатомных молекул на влияние внешнего электрического поля.

Полученные результаты и разработанные методы могут найти применение в исследованиях по теоретической молекулярной спектроскопии, физике плазмы и астрофизике, проводимых в Физическом институте им. П.Н. Лебедева (Москва), Институте общей физики РАН (Москва), Институте теоретической физики и астрономии (Вильнюс), Институте атомной физики и спектроскопии (Рига), Институте лазерной физики СО РАН (Новосибирск), Институте сильноточной электроники СО РАН (Томск), Институте оптики атмосферы СО РАН (Томск), Томском государственном университете, Московском государственном университете, а также в других вузах и организациях, где ведутся работы по тематике представленной диссертации.

Апробация работы

Все основные результаты диссертации докладывались на научных семинарах в Томском государственном университете; в Институте теоретической физики и астрономии, г. Вильнюс, Литва; в Институте атомной физики и спектроскопии, г. Рига, Латвия; в Университете им. Поля Сабатье, г. Тулуза, Франция; в Университете Бургундии, г. Дижон, Франция.

Результаты исследований были представлены на международных конференциях: 3rd International Congress on Radiation Physics, High current Electronics, and Modification of Materials, Томск, Россия, 17–21 сентября 2012; Progress In Electromagnetics Research Symposium – PIERS2012, Москва, Россия, 19–23 августа 2012; Progress in Electromagnetics Research Symposium – PIERS2011, Сучжоу, Китай, 12–16 сентября, 2011; International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications, Вильнюс, Литва, 21–24 сентября, 2010; 16th International Symposium on High Current Electronics, Томск, Россия, 19–24 сентября, 2010; Progress in Electromagnetics Research Symposium – PIERS2010, Сиань, Китай, 22–26 марта, 2010; XXXVII Zvenigorod Conference On Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion, Звенигород, Россия, 8–12 февраля, 2010; XVI International Symposium «Atmospheric and Ocean Optics. Atmospheric Physics», Томск, Россия, 12–15 октября, 2009; Progress in Electromagnetics Research Symposium – PIERS2009, Пекин, Китай, 23–27 марта, 2009; 15th International Symposium on High Current Electronics, Томск, Россия, 21–26 сентября, 2008; XV International Symposium «Atmospheric and Ocean Optics. Atmospheric Physics», Красноярск, Россия, 22–29 июня, 2008; VIII International Conference «Atomic and Molecular Pulsed Lasers», Томск, Россия, 10–14 сентября, 2007; XIII Joint International Symposium «Atmospheric and Ocean Optics. Atmospheric Physics», Томск, Россия, 26–30 июня, 2006; 7th International Conference «Atomic and Molecular Pulsed Lasers», Томск, Россия, 12–16 сентября, 2005; XXXII Zvenigorod Conference on Plasma Physics and Controlled Thermonuclear Fusion, Звенигород, Россия, 14–18 февраля, 2005; 7th International

Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Томск, Россия, 25–29 июля, 2004; 10th International Symposium on the Science and Technology of Light Sources, Тулуза, Франция, 18–23 июля, 2004; VI International Conference «Atomic and Molecular Pulsed Lasers», Томск, Россия, 15–19 сентября, 2003; XVI Conference on Fundamental Atomic Spectroscopy, Москва, Россия, 1–4 декабря, 1998; 32nd EGAS Conference, Вильнюс, Литва, 4–7 июля, 2000; 5th International Workshop «Autoionization phenomena in atoms», Дубна, Россия, 12–14 декабря, 1996.

Исследования по теме диссертационной работы были поддержаны грантом РФФИ № 3533 и грантом INTAS–01–0200.

Публикации

Результаты диссертации опубликованы в 30 научных статьях в ведущих российских и зарубежных журналах, входящих в перечень ВАК [1–4, 6–12, 16–23, 25–29, 31, 32, 34, 38–40], и в 10 сборниках трудов международных конференций [5, 13–15, 24, 30, 33, 35–37].

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, разбитых на параграфы (разделы) и заключения. Она содержит 51 таблицу и 104 рисунка. Список литературы включает в себя 218 наименований. Общий объем диссертации составляет 287 страниц.

Содержание работы

В первой главе рассматриваются проблемы выбора оптимального набора базисных функций, необходимого при расчетах спектральных и электрических свойств атомов, ионов и двухатомных молекул. При решении уравнения

Шредингера *ab initio* методами, в качестве базисных выбираются волновые функции невозмущенных систем, полученные вариационными методами. Вариационные методы делятся на два класса: численные методы (метод Хартри-Фока³) и аналитические методы (прямые вариационные методы с ортогональными и неортогональными внутри конфигурации орбиталями⁴). Известно, что при невозможности удовлетворения всех необходимых условий ортогональности, накладываемых на полные волновые функции, метод Хартри-Фока расходится. Во избежание расходимости, вводят приближения, связанные с тем или иным замораживанием остова, или переходят к прямым вариационным методам. В прямых вариационных методах отсутствует проблема расходимости, однако даже соблюдение всех требуемых условий ортогональности не гарантирует, что рассчитанные значения полных энергий возбужденных состояний являются верхними границами к соответствующим собственным значениям гамильтониана. Это может привести к коллапсированию энергетических уровней. Таким образом, необходим критерий, позволяющий выбрать оптимальный согласованный набор волновых функций, который бы гарантировал верхние границы для рассчитываемых энергий возбужденных состояний и обеспечивал выбор приближения, наилучшим образом описывающего спектральные характеристики рассматриваемых систем. Целью первой главы является нахождение критериев выбора оптимального базиса волновых функций, удовлетворяющего этим требованиям. Базисные функции, удовлетворяющие найденным критериям, и рассчитанные с ними энергии используются в расчетах спектральных и электрических свойств атомов, ионов и двухатомных молекул во всех последующих главах диссертации.

В разделах 1.1 и 1.2 рассматриваются метод Хартри-Фока и прямые вариационные методы. Проводится анализ причин расходимости и

³ Froese-Fischer Ch. The Hartree-Fock method for atoms. New-York: Wiley, 1978. P. 326.

⁴ Юцис А. П., Савукина А. Ю. Математические основы теории атома. Вильнюс: Мокслас, 1973. С. 479.

коллапсирования энергетических уровней в этих методах, рассматриваются способы решения возникших проблем.

В разделе 1.3 в качестве обобщения вариационных методов предложен метод минимакса. Показано, что прямые вариационные методы с любым типом замораживания остова являются частными случаями метода минимакса. Алгоритм этого метода реализован в пакете программ MINMAX, описанном в разделе 1.4. В рамках пакета возможен расчет спектральных характеристик атомов и ионов как в нерелятивистском приближении, так и в релятивистском приближении Брейта-Паули.

В разделе 1.5, на основании сформулированных и доказанных теорем, в качестве критерия выбора оптимального базисного набора невозмущенных волновых функций предложен принцип минимакса. Для обоснования использования этого принципа проводится сравнительный анализ результатов расчета спектров изоэлектронных рядов He и Li, полученных методом Хартри-Фока, прямым вариационным методом и методом минимакса при различных замораживаниях остова. На основании анализа сделан вывод, что принцип минимакса позволяет из всех имеющихся наборов базисных функций выбрать оптимальный согласованный набор, который гарантирует для рассчитываемых энергий верхние уточняемые границы к соответствующим собственным значениям гамильтониана и позволяет наиболее адекватно описать как полные энергии, так и другие спектральные характеристики рассматриваемых атомов и ионов.

В разделе 1.6 проводится проверка эффективности предложенного критерия выбора оптимального базиса функций. Проверка проводилась на примере расчетов сил осцилляторов для синглетных $P-D$ и $S-P$ переходов изоэлектронного ряда He, при расчете автоионизационных состояний изоэлектронного ряда He, а также при расчете различных характеристик атомов He и Ne при возмущении статическим электрическим полем. Во всех рассмотренных случаях оказалось, что базисный набор волновых функций,

определенный согласно критерию, предложенному в главе 1, позволяет наиболее адекватно описать различные характеристики атомов и ионов.

В заключительном разделе резюмируются результаты, полученные в главе 1 [1–10].

Во второй главе сформулирован и развит *ab initio* метод расчета спектров излучения атомов и ионов, находящихся под воздействием переменного электрического поля. При стандартном подходе к расчету динамического эффекта Штарка в лазерных полях используется нестационарная теория возмущений со всеми присущими ей ограничениями. Цель данной главы – построение *ab initio* метода расчета спектров излучения атомов и ионов в переменных электрических полях, свободного от ограничений теории возмущений, пригодного в широком диапазоне изменения параметров электрического поля. Такой метод, названный методом диагонализации матрицы энергии в электрическом поле, и был сформулирован в данной главе. Оптимальный базис невозмущенных функций $\varphi_k^{(0)}(r)$ и энергии $E_n^{(0)}$, необходимые при проведении расчетов в рассматриваемой главе, определяются согласно критериям, сформулированным в главе 1.

В разделе 2.1 сформулированы основные положения, лежащие в основе предлагаемого метода расчета. Для циркулярного электрического поля напряженности F и частоты ω нестационарное уравнение Шредингера записывается в виде

$$i \frac{\partial \psi_n(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0(\vec{r}) - F(x \cos \omega t \pm y \sin \omega t)) \psi_n(\vec{r}, t), \quad (1)$$

где $H_0(\vec{r})$ – гамильтониан невозмущенной системы, ψ_n – волновая функция n -того состояния системы в электрическом поле. В случае циркулярной поляризации поля, в рамках приближения вращающейся волны⁵, возможен переход от нестационарного уравнения Шредингера к стационарному

$$\hat{Q}\varphi(\vec{r}) = \varepsilon\varphi(\vec{r}), \quad \hat{Q} = (\hat{H}_0 - \omega\hat{J}_z \pm F\hat{D}_x), \quad \varphi(\vec{r}, t) = \exp(-i\varepsilon t)\varphi(\vec{r}), \quad (2)$$

⁵ Бункин Ф. В., Прохоров А. М. Возбуждение и ионизация атомов в сильном поле излучения // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1964. Т. 46. вып. 3. С. 1091-1097.

где \hat{J}_z есть z -компонента оператора углового момента, D_x – x -компонента оператора дипольного момента, ε и $\varphi(\vec{r}, t)$ есть квазиэнергия и волновая функция квазиэнергетического состояния атома/иона в электрическом поле во вращающейся системе координат. Стандартный способ решения уравнения (2) – использование стационарной теории возмущений. Однако в стационарной теории возмущений существуют присущие ей ограничения, проблемы сходимости рядов и т.д. Вместо использования стационарной теории возмущений, в диссертации решение уравнения (2) находится методом диагонализации матрицы энергии с элементами

$$Q_{mn} = E_n^{(0)}\delta_{mn} - \omega M\delta_{mn} \pm F \langle \varphi_m^{(0)} | D_x | \varphi_n^{(0)} \rangle, \quad (3)$$

где $E_n^{(0)}$ – энергия n -того состояния атома/иона в отсутствие электрического поля, M – магнитное квантовое число. После диагонализации матрицы \hat{Q} с элементами (3) волновая функция n -того состояния системы с квазиэнергией ε_n во внешнем электрическом поле во вращающейся системе координат имеет вид

$$\varphi_n(\vec{r}, t) = e^{-i\varepsilon_n t} \sum_k C_{nk}(\omega, F) \varphi_k^{(0)}(r). \quad (4)$$

В исходной системе координат средняя энергия n -того состояния задается выражением

$$\bar{E}_n = \langle \psi_n(\vec{r}, t) | H(\vec{r}, t) | \psi_n(\vec{r}, t) \rangle = \varepsilon_n + \omega \langle \varphi_n(\vec{r}) | \hat{J}_z | \varphi_n(\vec{r}) \rangle, \quad (5)$$

откуда следует, что \bar{E}_n не зависит от времени и имеет смысл средней энергии системы в электрическом поле. Для расчета матричных элементов оператора D_x в (3) разработан экономичный метод, в котором исправлены недостатки метода Бейтса-Дамгаард. Как следует из приведенных выражений (1)–(5), процедура диагонализации матрицы энергии \hat{Q} позволяет получить энергии и волновые функции рассматриваемой системы в переменном электрическом поле циркулярной поляризации, при этом на частоту и напряженность электрического поля не накладываются никакие ограничения.

В разделе 2.2 приведен вывод формул для расчета спектральных характеристик атомов/ионов в электрическом поле: вероятностей спонтанных переходов между штарковскими состояниями

$$A(JM \rightarrow J'M') = \frac{4\omega_{JM,JM'}^3}{3\hbar c^3} |D_{JM,JM'}|^2, \quad (6)$$

$$D_{JM,JM'} = \sum_q \sum_{ij} C_i^{(JM)*} C_j^{(J'M')} (-1)^{J_i - M_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -M_i & q & M_j \end{pmatrix} \langle \gamma_i J_i \| D \| \gamma_j J_j \rangle, \quad (7)$$

времен жизни атомных/ионных состояний и интенсивностей спектральных линий в циркулярно поляризованном электрическом поле. Последние характеристики рассчитываются по формулам

$$\tau_J = \frac{1}{\sum_{J'} A(J \rightarrow J')}, \quad I(JM \rightarrow J'M') = N_{JM} A(JM \rightarrow J'M') \omega_{JM,JM'}, \quad (8)$$

$$A(J \rightarrow J') = \frac{\sum_{MM'} A(JM \rightarrow J'M')}{2J+1}. \quad (9)$$

Расчеты всех спектральных характеристик (6) – (9) проводятся с энергиями и волновыми функциями, полученными в разделе 2.1.

Предложенный теоретический подход пригоден для расчета динамического эффекта Штарка для любых атомов и ионов в циркулярно поляризованном электрическом поле с напряженностью и частотой, изменяющимися в широком диапазоне. Метод диагонализации матрицы энергии может быть легко распространен на случай линейно поляризованного поля, так как линейно поляризованное излучение есть суперпозиция двух циркулярно поляризованных электромагнитных волн с левой и правой поляризацией.

В разделе 2.3 проведен анализ структуры спектров и типов связи атомов и ионов благородных газов. Эти атомы и ионы были выбраны в качестве объектов изучения, поскольку благородные газы широко используются как возбуждаемые среды и буферные газы в различных источниках возбуждения (лазерах, лампах и т.д.), а также часто встречаются в атмосферах звезд.

В разделе 2.4 проведена классификация типов переходов, возможных в атомах и ионах благородных газов, кроме того, в рамках формализма неприводимых тензорных операторов рассчитаны приведенные матричные элементы оператора дипольного момента из (3) и (7) для всех типов LS – LS , LS – JK и JK – JK переходов.

В разделе 2.5 представлено описание пакета программ StarkD, в котором реализован алгоритм метода диагонализации матрицы энергии и дальнейшего расчета спектральных свойств атомов и ионов в переменном циркулярно поляризованном электрическом поле.

В разделе 2.6 проводится проверка корректности предложенного во второй главе метода диагонализации матрицы энергии. Для проверки использовалось сравнение наших расчетных данных с экспериментальными результатами, а также с другими теоретическими расчетами. Сравнение наших данных, рассчитанных методом диагонализации матрицы энергии, и экспериментальных данных⁶, полученных для сдвига и расщепления спектральных линий атома He с длинами волн излучения 587,6 нм и 667,8 нм, показало отличное согласие. Квадратичная зависимость штарковских сдвигов от напряженности электрического поля и отрицательный знак сдвига основных состояний атомов и ионов при включении электрического поля, полученные в наших расчетах, также отлично согласуются с результатами теории возмущений.

В заключительном разделе резюмируются результаты второй главы, опубликованные в работах [11, 12, 16, 17, 19, 23, 24, 36].

Глава 3 посвящена поиску закономерностей в поведении сдвига и расщепления штарковских состояний в спектрах излучения атомов и ионов благородных газов. Единственная закономерность, известная из теории возмущений – линейная или квадратичная зависимость сдвига штарковских состояний атомов и ионов от напряженности электрического поля.

⁶ Frank A. G., Gavrilenko V. P., Kyrie N. P., Oks E. Spectroscopic study of anomalous electric fields in peripheral regions of a current sheet plasma // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2006. Vol. 39. No. 24. P. 5119–5129.

Аналитический вид зависимости поведения штарковских состояний от частоты электрического поля и от заряда ядра неизвестен. Роль взаимодействия энергетических состояний в формировании спектров излучения также не изучалась, так как, в силу сложности, все расчеты проводились максимум в четырехуровневом приближении. Вместе с тем, в последнее время появилась настоятельная потребность в установлении закономерностей в поведении штарковских сдвигов⁷ и вероятностей переходов⁸, и цель данной главы – поиск таких закономерностей для спектров атомов и ионов благородных газов в циркулярно поляризованном электрическом поле. Все расчеты данной главы проведены методом диагонализации матрицы энергии с использованием пакета программ StarkD, описанных в главе 2.

В разделе 3.1 на основании расчетов, проведенных методом диагонализации матрицы энергии, выявлены следующие закономерности в поведении сдвига и расщепления энергетических уровней атомов благородных газов в электрическом поле:

- 1) Установлено наличие связи между электронной структурой атомов и поведением их энергетического спектра в электрическом поле, рассмотрены причины и следствия этой связи;
- 2) F -зависимость. Выявлены закономерности в поведении эффекта Штарка при изменении напряженности электрического поля: квадратичная зависимость штарковского сдвига от напряженности электрического поля (что согласуется с результатами теории возмущений) и монотонная зависимость сдвига и расщепления энергетических уровней от главного квантового числа n внешнего электрона;
- 3) ω -зависимость. Определены закономерности в поведении эффекта Штарка при изменении частоты электрического поля: при слабом смешивании штарковских состояний увеличение частоты приводит к уменьшению сдвига

⁷ Dojčinović I. P., Tapalaga I., Purić J. Stark parameter regularities of neutral helium lines within different spectral series // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2012. Vol. 419. Issue 1. P. 904–912.

⁸ Дорохин М.В., Ю.А. Данилов Ю.А. Измерение поляризационных характеристик излучения наногетероструктур. Нижний Новгород: Издательство НижГУ, 2011. С. 85.

и расщепления энергетических уровней; все состояния из ns -конфигурации смещаются в ИК-область спектра, и направление их смещения (за исключением атома He) не зависит от ω ; все рассмотренные состояния из nf -конфигурации смещаются в УФ-область спектра, при увеличении частоты поля, по крайней мере, нижние nf -состояния продолжают сдвигаться в фиолетовую область спектра; направление сдвига np - и nd -состояний может меняться с ростом ω ;

4) Z -зависимость. Установлено, что с ростом Z уменьшается степень смешивания штарковских состояний, и величина сдвига и расщепления атомных уровней. Исследована также зависимость направления сдвига штарковских состояний от заряда ядра.

В разделе 3.2 проведено исследование зависимости поведения сдвига и расщепления энергетических уровней ионов благородных газов Ne^+ , Ar^+ и Kr^+ от их электронной структуры, от параметров электрического поля и от заряда ядра. Установлено, что поведение сдвига и расщепления ионных уровней подчиняется тем же закономерностям, что и поведение атомных уровней, но ионы оказались более чувствительны к воздействию электрического поля. Качественное отличие между поведением атомных и ионных уровней обнаружено только для направления сдвигов np - и nd - штарковских состояний.

В последнем разделе третьей главы резюмируются полученные результаты, опубликованные в работах [12, 15–17, 27, 30, 34, 37–40].

В четвертой главе исследуются закономерности поведения вероятностей спонтанных переходов в спектрах излучения атомов благородных газов в циркулярном электрическом поле. Как и в третьей главе, при поиске закономерностей исследовалась зависимость поведения вероятностей переходов от электронной структуры атома, от параметров электрического поля и от заряда ядра Z . Цель данной главы – поиск вышеуказанных закономерностей. На основании полученных вероятностей переходов были рассчитаны времена жизни атомных уровней и интенсивности спектральных линий в электрическом поле. Для расчетов, проведенных в данной главе, были

использованы волновые функции и штарковские энергии атомов благородных газов, полученные в главе 3 в рамках метода диагонализации матрицы энергии, описанного в главе 2. Все эти расчеты и исследования закономерностей проведены впервые.

В разделе 4.1 обсуждается влияние электронной структуры атомов и смешивания штарковских состояний на поведение вероятностей переходов при изменении напряженности и частоты электрического поля.

В разделе 4.2 изучены закономерности поведения вероятностей переходов $A(JM \rightarrow JM')$ при изменении напряженности электрического поля. На основании расчетов были выявлены следующие закономерности:

- 1) Воздействие электрического поля приводит к появлению запрещенных переходов, чьи вероятности быстро растут с увеличением напряженности электрического поля. Появление запрещенных переходов обусловлено взаимодействием штарковских состояний;
- 2) Поведение вероятностей переходов $A(JM \rightarrow JM')$ при $J \leq J'$ и $J > J'$ отличается. При $J \leq J'$ вероятности всех переходов резко падают с включением электрического поля, а затем мало зависят от изменения F , тогда как при $J > J'$ одна из вероятностей медленно, без скачка, убывает с увеличением F , а остальные ведут себя как в случае с $J \leq J'$;
- 3) При слабом взаимодействии штарковских состояний вероятности $M \rightarrow M'$ переходов либо равновероятны, либо попарно равновероятны, причем увеличение напряженности поля приводит к уменьшению вероятностей переходов. При сильном взаимодействии штарковских состояний все $M \rightarrow M'$ переходы неравновероятны, и при увеличении напряженности поля вероятности переходов могут как возрастать, так и убывать. Для всех рассмотренных переходов включение электрического поля приводит к упорядоченному по M распределению вероятностей переходов;
- 4) С увеличением заряда ядра Z чувствительность вероятностей переходов к изменению напряженности электрического поля уменьшается.

В разделе 4.3 изучены закономерности поведения вероятностей переходов $A(JM \rightarrow JM')$ при изменении частоты электрического поля. Проведенные расчеты позволили выявить следующие закономерности:

- 1) При слабом взаимодействии состояний переходы между ними попарно равновероятны, причем вероятности переходов индифферентны к изменению частоты электрического поля;
- 2) При сильном взаимодействии состояний при низких частотах все переходы неравновероятны, увеличение ω приводит к попарной равновероятности переходов;
- 3) F -зависимости вероятностей переходов $A(JM \rightarrow JM')$, найденные в разделе 4.2, при увеличении частоты электрического поля остаются неизменными.

В разделе 4.4 рассмотрены закономерности, присущие поведению вероятностей спонтанных переходов между энергетическими уровнями атомов благородных газов. Показано, что вероятности переходов $A(J \rightarrow J')$ убывают с ростом напряженности электрического поля и монотонно зависят от главного квантового числа n электрона из внешней оболочки, с которой происходит переход. При этом рассматриваемые вероятности являются полиномами степени m от напряженности электрического поля

$$A(J - J') = a_0 + a_1 F + a_2 F^2 + \dots + a_m F^m, \quad (10)$$

и степень полинома растет с увеличением частоты электрического поля: $m=3$ при $\omega=100$ МГц, $m=4$ при $\omega \sim 10^4 - 10^5$ МГц и $m=5$ при $\omega \sim 10^7$ МГц.

В разделе 4.5 на основании данных, полученных в разделах 4.1 – 4.4, проведены расчеты времен жизни для ряда уровней атомов He, Ne и Kr. Поскольку времена жизни обратно пропорциональны вероятностям $A(J \rightarrow J')$, они подчиняются тем же закономерностям, что и эти вероятности. Для атома Ne был также проведен расчет интенсивностей спектральных линий $nd^3D_J - 2^3P_{J'}$ при частоте электрического поля $\omega=100$ МГц.

В заключительном разделе резюмируются результаты четвертой главы, опубликованные в работах [13–16, 20, 21, 27, 30, 34, 35].

В главе 5 проводится теоретическое исследование электрических свойств двухатомных молекул. Эти свойства характеризуются электрическими мультипольными моментами и поляризуемостью. Мультипольные моменты индуцируются электрическим полем, порождаемым взаимодействием зарядов ядер и электронов рассматриваемой молекулы. Электрическое поле также вызывает расщепление молекулярных электронных уровней на дважды вырожденные Λ -подуровни, что аналогично статическому эффекту Штарка. В адиабатическом приближении мультипольные моменты двухатомных молекул являются функциями межъядерного расстояния R . Существующие *ab initio* методы позволяют провести высокоточные расчеты функций мультипольных моментов в окрестности равновесных межъядерных расстояний и при больших R , однако эти методы в принципе не дают возможности рассчитать искомые функции при $R \rightarrow 0$. Поэтому при расчете функций мультипольных моментов на малых межъядерных расстояниях используются полуэмпирические методы, корректность которых каждый раз нуждается в дополнительной проверке⁹. Цель пятой главы – развитие *ab initio* метода расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях. Такой квантово-механический подход, основанный на модели объединенного атома и формализме неприводимых тензорных операторов, был сформулирован и развит в данной главе. В рамках предложенного метода удалось установить закономерности поведения функций дипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях и сформулировать корректную концепцию поведения этих функций во всем диапазоне изменения межъядерного расстояния. При расчете матричных элементов оператора $2t$ -польного момента использовалась классификация переходов и формулы расчета матричных элементов оператора дипольного момента, приведенные в разделе 2.4. Невозмущенные функции объединенных атомов, рассчитанные

⁹ Buldakov M. A., Cherepanov V. N. The semiempirical dipole moment functions of the molecules HX ($X = F, Cl, Br, I, O$), CO and NO // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2004. Vol. 37. No. 19. P. 3973–3986.

методом Хартри-Фока, удовлетворяют критерию выбора оптимального базиса функций, предложенного в главе 1.

В разделе 5.1 сформулирован и развит *ab initio* метод расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях. В нерелятивистском приближении гамильтониан, описывающий состояние двухатомной молекулы с ядрами a и b , находящимися на расстоянии R , при $R \rightarrow 0$ задается в виде

$$H = H_U + V, \quad (11)$$

где H_U – гамильтониан невозмущенной системы (объединенного атома с зарядом ядра $Z_U = Z_a + Z_b$), а V – оператор возмущения, вызванного взаимодействием электронов с ядрами

$$V = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{Z_U}{r_i} - \frac{Z_a}{r_{ai}} - \frac{Z_b}{r_{bi}} \right\}. \quad (12)$$

В адиабатическом приближении функция $2t$ -польного момента $O^{(t)}(R)$ для молекулы, находящейся в n -том состоянии, есть среднее значение оператора мультипольного момента $O^{(t)}$

$$O^{(t)}(R) = O_{nn}^{(t)} + 2 \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} O_{nm}^{(t)}}{E_n^{(u)} - E_m^{(u)}}, \quad O^{(t)} = -\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i^t + \sum_{a=1}^v Z_a \mathbf{R}_a^t. \quad (13)$$

После представления операторов V и $O^{(t)}$ как неприводимых тензорных операторов, окончательное выражение для расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул, находящихся в состоянии $n \equiv {}^{2S+1}\Lambda$, при малых межъядерных расстояниях принимает вид

$$O^{(t)}(R) = A \cdot (\alpha_n L_n \| O^{(t)} \| \alpha_n L_n) + 2 \cdot \sum_{m \neq n} \frac{B_1 (\alpha_n L_n \| V^{(0)} \| \alpha_m L_m) (\alpha_m L_m \| O^{(t)} \| \alpha_n L_n) - \sum_k B_2 (\alpha_n L_n \| V^{(k)} \| \alpha_m L_m) (\alpha_m L_m \| O^{(t)} \| \alpha_n L_n)}{E_n^{(u)} - E_m^{(u)}}. \quad (14)$$

В выражении (14) приведенные матричные элементы операторов V и $O^{(t)}$ рассчитываются с хартри-фоковскими функциями объединенного атома.

В разделе 5.2 описан мультязычный пакет программ DipolF, в котором реализован алгоритм метода расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул, рассмотренный в разделе 5.1.

В разделе 5.3 *ab initio* метод расчета, описанный в разделах 5.1 и 5.2, применен к исследованию функции дипольного момента двухатомных молекул, так как эта функция является наиболее информативной и широко используемой из всех функций мультипольных моментов. На основании расчетов выявлены закономерности в поведении функций дипольных моментов двухатомных молекул при изменении межъядерного расстояния R , параметра $t=Z_b/Z_U$ и квантового числа Λ , характеризующего расщепление электронного состояния молекулы на подуровни. Зависимость функции дипольного момента от межъядерного расстояния задается формулой

$$\mu_{\Lambda S}(R) = A_{\Lambda S}R^n + B_{\Lambda S}R^m, \quad (15)$$

где коэффициенты $A_{\Lambda S}$ и $B_{\Lambda S}$ определяются в рамках предложенного метода расчета, а степени n и m зависят от типа переходов, учитываемых при расчете $\mu_{\Lambda S}(R)$. Зависимость функции дипольного момента от параметра t следует из найденной нами закономерности, согласно которой коэффициенты $A_{\Lambda S}$ и $B_{\Lambda S}$ пропорциональны функции

$$w_n(t) = t(1-t)[(1-t)^n - t^n]. \quad (16)$$

Λ -зависимость не выражается в аналитическом виде, поэтому она исследуется численно.

В разделе 5.4 показано, что функции дипольных моментов двухатомных молекул обладают периодическими свойствами. Во-первых, для изоэлектронного семейства двухатомных молекул функция дипольного момента при $R \rightarrow 0$ определяется формулой

$$\mu_{\Lambda S}(R) = \tilde{A}_{\Lambda S}t(1-t)(1-2t)R^3, \quad (17)$$

откуда следует, что для определения функций дипольного момента всего изоэлектронного семейства молекул достаточно сосчитать коэффициент $\tilde{A}_{\Lambda S}$ только один раз. Во-вторых, при малых межъядерных расстояниях зависимость

функций $\mu_{\Lambda S}(R)$ от заряда ядра объединенного атома Z_U подчиняется периодическому закону, приведенному на рисунке 1. Этот закон характеризует влияние электронной структуры объединенного атома, формирующего молекулу, на поведение функции дипольного момента данной молекулы.

В разделе 5.5 показано, что применение предлагаемого *ab initio* метода позволяет не только рассчитать функции дипольных моментов двухатомных молекул при $R \rightarrow 0$, но и скорректировать поведение этих функций во всем

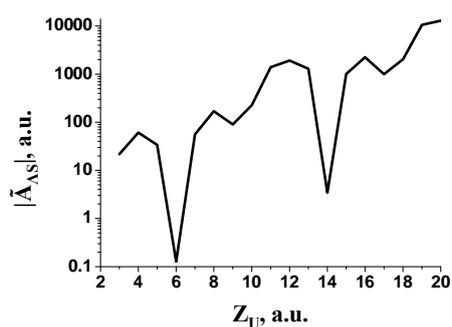


Рисунок 1. Периодическая зависимость функций дипольного момента от Z_U .

диапазоне изменения межъядерных расстояний. Для молекул, не меняющих полярности, результаты *ab initio* расчета функций дипольного момента при малых R приводят к уточнению функций $\mu_{\Lambda S}(R)$ без качественного изменения поведения этих функций. Для молекул, меняющих полярность, расчеты функций $\mu_{\Lambda S}(R)$ при

$R \rightarrow 0$ позволили не только уточнить функции дипольного момента, но также выявить их качественно другое поведение по сравнению с полуэмпирическими функциями. Качественно отличие заключается в смене полярности молекулы при изменении R . Смена полярности влечет изменение электрических свойств молекул, и, как следствие, изменение их отклика на внешние электрические поля. Этот вопрос был подробно исследован в подразделах 5.5.1 и 5.5.2, где на основании расчетов были сформулированы правила смены знаков полярности. Таким образом, использование *ab initio* метода, предложенного в диссертации для расчета функций мультипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях, позволило сформулировать физически корректную концепцию поведения функций дипольных моментов этих молекул во всем диапазоне изменения R .

Материал этой главы опубликован в работах [18, 22, 25, 26, 28, 29, 31–33].

Список публикаций по теме диссертации

1. Зеличенко В. М., Корюкина Е. В. Минимаксный подход в теории возбужденных состояний многоэлектронных систем // Известия вузов. Физика. 1992. Т. 35. № 11. С. 35–41.
2. Демкин В. П., Корюкина Е. В., Печерицын А. А. Учет влияния электрического поля на кинетику неупругих столкновений электронов с атомами гелия // Оптика и спектроскопия. 1993. Т. 74. вып. 5. С. 824–828.
3. Демкин В. П., Корюкина Е. В., Печерицын А. А. Расчет факторов искажения амплитуды неупругого рассеяния электрона на атоме неона в электрическом поле // Известия вузов. Физика. 1996. Т. 39. № 1, С. 97–100.
4. Зеличенко В. М., Корюкина Е. В. Определение энергий возбужденных состояний атомов в методе минимакса на примере $1s2s\ ^1S$ состояния атома He // Известия вузов. Физика. 1996. Т. 39. № 2. С. 83–88.
5. Zelichenko V. M., Koryukina E. V. The utilization of minimax method in the calculation of atom with inner shell vacancies // Autoionization phenomena in atoms: Proc. of 5th International Workshop (Dubna, Russia, 12–14 December, 1996). Moscow University Press, 1996. P. 204–208.
6. Демкин В. П., Корюкина Е. В., Печерицын А. А. Расчет сечений возбуждения состояний атома гелия электронным ударом // Оптика и спектроскопия. 1997. Т. 83. № 2. С. 201–206.
7. Зеличенко В. М., Корюкина Е. В. Вариационные волновые функции в расчетах сил осцилляторов в атомах и ионах // Известия вузов. Физика. 1998. Т. 41. № 5. С. 114–119.
8. Зеличенко В. М., Корюкина Е. В., Килин В. А., Конев В. В. Сравнение аналитического и численного методов в применении к расчетам возбужденных состояний атомов // Известия вузов. Физика. 1998. Т. 41. № 7. С. 120–128.

9. Корюкина Е. В. Пакет программ MINMAX для расчета спектров атомов и ионов // Вестник ТГПУ, Серия: Естественные и точные науки. 1998. вып. 5. С. 41–47.
10. Демкин В. П., Корюкина Е. В., Ревинская О. Г. Асимметрия контура спектральной линии атома во внешнем электрическом поле // Оптика атмосферы и океана. 2001. Т. 14. № 11. С. 1067–1069.
11. Корюкина Е. В. Расчет динамического эффекта Штарка в многоуровневом приближении // Известия вузов. Физика. 2003. Т. 46. № 11. С. 3–9.
12. Корюкина Е. В. Многоуровневое приближение в расчете динамического эффекта Штарка для атома гелия // Оптика атмосферы и океана. 2004. Т. 17. № 2–3. С. 151–156.
13. Koryukina E. V. Modeling of the dynamic Stark effect and calculation of the transition probabilities for Ar atom // Science and technology of light sources: Proc. of 10th International Symposium (Toulouse, France, 18–22 July, 2004). IoP Publishing, 2004. P. 193–194.
14. Koryukina E. V. Calculation of the dynamic Stark effect and transition probabilities for Ne atom // Science and technology of light sources: Proc. of 10th International Symposium (Toulouse, France, 18–22 July, 2004). IoP Publishing, 2004. P. 195–196.
15. Koryukina E. V. Regularities of the dynamic Stark effect for rare gases in a high-frequency discharge // Modification of materials with particle beams and plasma flows: Proc. of 7th International Conference (Tomsk, Russia, 25–29 July, 2004). Publishing house IAO SB RAS, 2004. P. 111–114.
16. Koryukina E. V. Modelling of the dynamic Stark effect and calculation of the transition probabilities for an Ar atom // Journal of Physics D: Applied Physics. 2005. Vol. 38. № 17. P. 3296–3303.
17. Корюкина Е. В. Закономерности динамического эффекта Штарка в благородных газах // Известия вузов. Физика. 2005. Т. 48. № 9. С. 3–11.
18. Buldakov M. A., Cherepanov V. N., Koryukina E. V., Kalugina Yu. N. Theoretical investigation of dipole moment function of LiH molecule for small

- internuclear separations // 12th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics. Atmospheric Physics (Tomsk, 27–30th June, 2005) / Ed. by Matvienko G. G., Lukin V. P. Vol. 6160. Proceedings of SPIE, 2005. P. 39–44.
19. Корюкина Е. В., Ревалде Г. Разделение перекрывающихся спектральных линий с помощью производных спектров // Известия вузов. Физика. 2006. Т.49. № 4. С. 80–85.
20. Корюкина Е. В. Расчет вероятностей перехода и времени жизни состояний атома гелия в переменном электрическом поле // Оптика атмосферы и океана. 2006. Т. 19. № 7. С. 581–587.
21. Koryukina E. V. Investigation of the regularities of the transition probabilities for a Kr atom in an alternating electric field // Atomic and Molecular Pulsed Lasers VI (Tomsk, 12–16th September, 2005) / Ed. by Tarasenko V. F., G. Mayer, Petrash G. G. Vol. 6263. Proceedings of SPIE, 2006. P. 175–185.
22. Булдаков М. А., Черепанов В. Н., Корюкина Е. В., Калугина Ю. Н. Теоретическое исследование функций дипольного момента молекул HF, HCl и HBr на малых межъядерных расстояниях // Известия вузов. Физика. 2006. Т. 49. № 11. С. 71–75.
23. Koryukina E. V. Calculation of the emission spectra of atoms and ions in the external electric field // Известия вузов. Физика. Приложение. 2006. Т. 49. №11. С. 104–107.
24. Koryukina E. V. Computer simulation of atomic and ionic emission spectra in an alternating electric field // High current electronics: Proc. of 15th International Symposium (Tomsk, Russia, 21–26 September, 2008). Publishing house IAO SB RAS, 2008. P. 73–76.
25. Булдаков М. А., Черепанов В. Н., Корюкина Е. В., Калугина Ю. Н. Теоретическое исследование функции дипольного момента радикала OH на малых межъядерных расстояниях // Оптика атмосферы и океана. 2007. Т. 20. № 1. С. 21–24.

26. Булдаков М. А., Черепанов В. Н., Корюкина Е. В., Калугина Ю. Н. Функция дипольного момента молекул MeH (Me=Li,Na,K) // Известия вузов. Физика. 2007. Т. 50. № 6. С. 13–17.
27. Корюкина Е. В., Корюкин В. И. Моделирование спектра излучения неона в высокочастотном разряде и лазерных полях для переходов с $J=0, 1$ // Оптика атмосферы и океана. 2008. Т. 21. № 8. С. 715–720.
28. Buldakov M. A., Cherepanov V. N., Koryukina E. V., Kalugina Yu. N. Regularities in the behavior of dipole moment functions of diatomic molecules at very small internuclear separations // Physical Review A. 2008. Vol. 78. № 3. P. 032516 (1–12).
29. Булдаков М. А., Черепанов В. Н., Корюкина Е. В. Общие закономерности поведения функций дипольного момента двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях // Оптика атмосферы и океана. 2009. Т. 22. № 2. С. 135–142.
30. Koryukina E. V. Computer simulation of emission spectra in plasma generated by an alternating electric field // PIERS 2009: Proc. of 25th International Symposium (Beijing, China, 23–27 March, 2009). The Electromagnetics Academy, USA, ISSN: 1559–9450, 2009. P. 1161–1165.
31. Buldakov M. A., Cherepanov V. N., Koryukina E. V., Kalugina Yu. N. On some aspects of changing the sign of the dipole moment functions of diatomic molecules // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2009. Vol. 42. № 10. P. 105102 (1–5).
32. Buldakov M. A., Cherepanov V. N., Koryukina E. V. Periodic law for the dipole moment functions of diatomic molecules at small internuclear separations // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2009. Vol. 42. №18. P. 181101 (1–4).
33. Булдаков М. А., Черепанов В. Н., Корюкина Е. В. Периодические свойства функций дипольных моментов двухатомных молекул на малых межъядерных расстояниях // Оптика атмосферы и океана. Физика

- атмосферы: Сборник трудов XVI Международного симпозиума (Томск, Россия, 12–15 октября, 2009). Издательство ИОА СО РАН. 2009. С. 48–51.
34. Корюкина Е. В. Особенности спектра излучения неона в высокочастотном разряде и лазерных полях для переходов с $J, J' \leq 2$ // Оптика атмосферы и океана. 2009. Т. 22. № 11. С.1070–76.
35. Koryukina E. V. A theoretical study of transition probabilities for rare gas atoms in an alternating electric field // PIERS 2010: Proc. of 27th International Symposium (Xi'an, China, 22–26 March, 2010). The Electromagnetics Academy, USA, ISSN: 1559–9450, 2010. P. 149–152.
36. Koryukina E. V. Simulation of the Stark effect in ArII emission spectra in an alternating electric field // High Current Electronics: Proc. of 16th International Symposium (Tomsk, Russia, 19–24 September, 2010). Publishing house IAO SB RAS, 2010. P. 180–183.
37. Koryukina E. V., Koryukin V. I. Comparative analysis of the dynamic Stark effect in spectra of rare gas atoms and ions // PIERS 2011: Proc. of 30th International Symposium (Suzhou, China, 12–16 September, 2009). The Electromagnetics Academy, USA, ISSN: 1559–9450, 2011. P. 184–187.
38. Корюкина Е. В., Корюкин В. И. Закономерности динамического эффекта Штарка для атома аргона в циркулярно поляризованном электрическом поле // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 1. С. 88–94.
39. Корюкина Е. В., Корюкин В. И. Теоретическое изучение динамического эффекта Штарка для иона Ne^+ при лазерном возбуждении // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 2. С. 94–99.
40. Koryukina E. V., Koryukin V. I. Modeling of the AC Stark effect of the Kr^+ ion // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 10/3. С. 208–211.

Подписано в печать 10.07.2013 г.
Формат А4/2. Ризография
Печ. л. 1,3. Тираж 100 экз. Заказ № 05/07-13
Отпечатано в ООО «Позитив-НБ»
634050 г. Томск, пр. Ленина 34а