

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO PROGRAMA

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Katedra
Teorinė atomų spektroskopija	Fizika, P002	TFAI	ATS
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos	1	Konsultacijos	1
Individualus	3	Seminarai	1

Dalyko anotacija

1. Įvadas. Atomo struktūros atradimas. Šredingerio lygtis. Centrinio lauko artūtinumas. Judesio kiekio momento teorijos pagrindai. Jucio ir Bandzaičio grafiniai metodai, jų apibendrinimai. Antrinis kvantavimas. Nereliatyvistinis ir reliatyvistinis atomo hamiltonianai ir banginės funkcijos. Reliatyvistinės pataisos ir efektai.

2. Daugiaelektroniai atomai ir jonai. Nereliatyvistinis ir reliatyvistinis ekvivalentinių elektronų sluoksniai. Kilminiai ir subkilminiai koeficientai. Du ir daugiau ekvivalentinių elektronų sluoksniai. Banginės funkcijos antisimetrizavimas.

3. Atomų ir jonų energijos spektrai. Energijų spektrų identifikavimas ir klasifikavimas naudojant įvairius ryšio tipus. Tarpinis ryšys, ryšio tipo optimizavimas. Antrinis kvantavimas surištame tenzoriniame pavidale. Ekvivalentinių elektronų sluoksnio sudėtingų konfigūracijų energijos spektrai. Spektrinių linijų hipersmulkių struktūra, jų izotopinis postūmis. Atomų ir jonų su vakansijomis vidiniuose elektronų sluoksnuose ypatybės. Atomai ir jonai išoriniame magnetiniame ir elektriniame lauke.

4. Radialiuoju banginių funkcijų radimo būdai. Koreliaciniai efektai. Hartrio-Foko-Jucio lygtys. Trikdžių teorija atomo energijai. Pusiauempyriniai metodai.

5. Elektronų šuoliai atomuose ir jonuose. Apibendrintos nereliatyvistinės ir reliatyvistinės elektrinių ir magnetinių multipolinių šuolių operatorių ir jų matricinių elementų išraiškos. Linijos ir osciliatoriaus stiprumas, šuolio tikimybė, sužadinto lygmens gyvavimo trukmė, spektrinės linijos intensyvumas. Leistini ir draustini šuoliai, atrankos ir sumų taisyklės. Elektrinių dipolinių, elektrinių kvadrupolinių bei magnetinių dipolinių šuolių ypatybės.

6. Daugiakrūvių jonų ypatybės. Teorijos taikymai. Daug kartų jonizuotų atomų struktūros ir spektrų ypatybės. Dėsningumai izoelektrinėse sekose.

7. Statistiniai spektrų aprašymo metodai. Atomų spektroskopijos taikymai plazmos fizikoje ir astrofizikoje, įskaitant lazerinę ir termobrandaolinę. rentgeno ir gama lazeriai. Atomo spektroskopijos naudojimas fundamentiniams gamtos dėsniams tirti.

8. Atomų ir jonų sąveika su fotonais ir elektronais. Elastinė ir neelastinė sklaida. Klasikinis, kvantinis ir pusiau klasikinis artinys. Sklaidos skerspjūvis. Borno artinys. Lippmann-Schwinger lygtis. Plokščiosios bangos. Dalinės bangos. Rezonansai.

9. Fotosužadainimas, fotojonizacija ir fotorekombinacija. Detalaus balanso principas.

10. Sužadainimai elektronais. Susidūrimų stiprumas. Mažų, vidutinių ir didelių energijų artiniai. Artimojo ryšio metodas. R-matricos metodas. Pseudobūsenų metodas. Iškraipytųjų bangų artinys. Plokščių ir kuloninių bangų Borno artiniai. Nepriklausomų procesų izoliuotų rezonansų artinys. Dvielektronis pagavimas ir rekombinacija. Autojonizacija.

11. Jonizacija elektronais. Nuo laiko priklausantis artimojo ryšio metodas. Borno ir iškraipytųjų bangų artiniai.

12. Atomų spektrinių charakteristikų skaičiavimas naudojant kompiuterius. Atomų spektrinių charakteristikų duomenų bazės.

Pagrindinė literatūra

1. Rudzikas Z. Theoretical Atomic Spectroscopy (Many-Electron Atoms), Cambridge University Press, Cambridge, 1977 (yra apie 550 psl. rankraštis Vilniuje).
2. Cowan R.D. The Theory of Atomic Structure and Spectra. University of California Press, Berkeley, 1981.
3. Ch. Froese Fischer. The Hartree-Fock Method for Atoms (A Numerical Approach). John-Wiley and Sons, New York -London-Sydney-Toronto, 1997.
4. Sakurai J. J., Napolitano J. Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley. 2011.
5. Friedrich H. Theoretical Atomic Spectroscopy. Springer. 2006.
6. Gordon W. F. Drake. Springer Handbook of Atomic Molecular and Optical Physics. Springer. 2006.
7. Boyle J. J., Pindzola M. S. Many-body Atomic Physics. Cambridge University Press. 1998.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
V. Jonauskas	Dr.		<p>1.V. Jonauskas, S. Kučas, R. Karazija, <i>Auger decay of 3p-ionized krypton</i>, Phys. Rev. A 84, 053415 (2011).</p> <p>2.J. Palaudoux, P. Lablanquie, L. Andric, K. Ito, E. Shigemasa, J.H.D. Eland, V. Jonauskas, S. Kučas, R. Karazija, F. Penent, <i>Multielectron spectroscopy: Auger decays of the krypton 3d hole</i>, Phys. Rev. A 82, 043419 (2010).</p> <p>3.V. Jonauskas, R. Kisielius, A. Kynienė, S. Kučas and P. H. Norrington, <i>Magnetic dipole transitions in $4d^N$ configurations of tungsten ions</i>, Phys. Rev. A 81, 012506 (2010).</p> <p>4.S. Kučas, R. Karazija, V. Jonauskas, and A. Momkauskaitė, <i>Interaction of $4p^5 4d^{N+1}$ and $4p^6 4d^{N-1} 4f$ configurations and its influence on the photoexcitation and emission spectra in the isoelectronic and isonuclear sequences</i>, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42, 205001 (2009).</p> <p>5.V. Jonauskas, R. Karazija and S. Kučas, <i>The essential role of many-electron Auger transitions in the cascades following the photoionization of 3p and 3d shells of Kr</i>, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41, 215005 (2008).</p> <p>6.K. M. Aggarwal, K. Hamada, A. Igarashi, V. Jonauskas, F. P. Keenan, S. Nakazaki, <i>Radiative rates and electron impact excitation rates for H-like Ar XVIII</i>, Astronomy & Astrophysics 487, 383-388 (2008).</p> <p>7.K. M. Aggarwal, K. Hamada, A. Igarashi, V. Jonauskas, F. P. Keenan, S. Nakazaki, <i>Radiative rates and electron impact excitation rates for H-like Fe XXVI</i>, Astronomy & Astrophysics 484, 879-885 (2008).</p>
G. Merkelis	Dr.		<p>1.R. Juršėnas and G. Merkelis, Coupling schemes for two-particle operator used in atomic calculations, Lithuanian J. Phys. 47, no. 3, 255 (2007).</p> <p>2.R. Juršėnas, G. Merkelis, Coupled tensorial form for atomic relativistic two-particle operator given in second quantization representation, Cent. Eur. J. Phys. 8, no. 3, 480 (2010).</p> <p>3.R. Juršėnas and G. Merkelis, Coupled tensorial forms of the second-order effective Hamiltonian for open-subshell atoms in jj-coupling, At. Data Nucl. Data Tables (2010), doi:10.1016/j.adt.2010.08.001</p> <p>4.R. Juršėnas and G. Merkelis, Application of symbolic programming for atomic many-body theory, Materials Physics and Mechanics 9, no. 1, 42 (2010)</p> <p>5.R. Juršėnas, G. Merkelis, The transformation of irreducible tensor operators under spherical functions, Int. J. Theor. Phys. 49, no. 9, 2230 (2010)</p> <p>6.R. Juršėnas, G. Merkelis, Irreducible tensor form of three-particle operator for open-shell atoms, Cent. Eur. J. Phys. (2010), doi: 10.2478/s11534-010-0082-0</p> <p>7.R. Juršėnas and G. Merkelis. Development of algebraic techniques for atomic open-shell MBPT (3), J. Math. Phys. 51, 12 (2010)</p>

Patvirtinta Fizika 02P doktorantūros komitete 2012 m. birželio 29 d. Protokolo Nr. 20

Komiteto pirmininkas prof. S. Juršėnas

