

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO PROGRAMA

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Katedra
Antrinis kvantavimas, kvazisukinys ir izosukinys atomo teorijoje	Fiziniai mokslai, Fizika, 02P	VU TFAI	

Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)
Paskaitos	1,5	Konsultacijos	0,75
Individualus	6,75	Seminarai	

Dalyko anotacija

1. Antrinis kvantavimas.

Viendeterminantinės banginės funkcijos. Dalelių gimimo ir išnykimo operatoriai. Komutavimo sąlygos, užpildymo skaičiai. Operatoriai ir banginės funkcijos antriniame kvantavime. Dalelės - vakansijos. Bogoliubovo transformacija.

2. Neredukuotiniai tenzoriniai rinkiniai.

Sukimo grupės, judesio kiekio momentas. Fazių sistema. Dviejų momentų sudėtis. Klebšo-Gordano koeficientai. Tenzorių sandaugos. Kelių momentų sudėtis. Transformacijos matricos bei $3nj$ -koeficientai. Vignerio-Eckarto teorema. Orbitinis ir sukinio judesio kiekio momentai.

3. Atominių sąveikų operatoriai.

Nereliatyvistinis atomo hamiltonianas. Reliatyvistinės pataisos. Operatorių neredukuotinės formos. Paprastesnių vien- ir dvidalelių energijos operatorių matriciniai elementai. Elektronų šuolių operatoriai ir jų vienelektroniai matriciniai elementai.

4. Neredukuotiniai tenzoriai užpildymo skaičių erdvėje.

Viendalelės būsenos. Porinės būsenos. Izosukinys. Kvazisukinys.

5. Antrinio kvantavimo operatoriai kaip neredukuotiniai tenzoriai.

Gimimo ir išnykimo operatorių tenzorinės savybės. Vienetiniai tenzoriai. Grupių teorijos metodai ekvivalentinio elektronų sluoksnio būsenoms klasifikuoti. Kazimiro operatoriai. Įvairių tenzorių komutavimo sąlygos. Viendaleliai ir dvidaleliai fizikinių dydžių operatoriai. Suvidurkintos elektrostatinės sąveikos energijos operatorius.

6. Ekvivalentinių elektronų sluoksnio banginių funkcijų ir matricinių elementų tenzorinės savybės.

Banginės funkcijos antrinio kvantavimo vaizdavime. Gimimo ir išnykimo operatorių submatriciniai elementai. Kilminiai koeficientai. Daugiadaleliai kilminiai koeficientai. Vienetinių tenzorių ir fizikinių dydžių operatorių submatriciniai elementai.

7. Ekvivalentinių elektronų sluoksnio kvazisukinio erdvė.

Kvazisukinio operatorius. Vyresniškumo kvantinis skaičius. Tenzoriai kvazisukinio erdvėje. Kvazisukinio metodo ryšys su kitais grupių teorijos metodais. Fizikinių dydžių operatorių skleidimas kvazisukinio erdvėje.

8. Banginės funkcijos ir matriciniai elementai sluoksnio kvazisukinio erdvėje.

Banginės funkcijos kvazisukinio erdvėje. Trigubų tenzorių submatriciniai elementai. Subkilminiai koeficientai. Ryšys tarp iš dalies ir beveik užpildytų elektronų sluoksnių būsenų. Vakansijų vaizdavimas ir sukimai kvazisukinio erdvėje. Submatricinių elementų savybės sukinio ir kvazisukinio kvantinių skaičių perstatymo atžvilgiu.

9. Kilminių koeficientų algebrinės išraiškos.

Atskirų kilminių koeficientų algebrinės išraiškos. Elektronų sluoksnio $l^N \nu LS$ kilminių koeficientų algebrinės išraiškos. Sluoksnio $l^N(n_1 n_2) \nu LS$ kilminių koeficientų algebrinės išraiškos.

10. Sudėtingų konfigūracijų tenzorinės savybės.

Neredukuotiniai tenzoriai sudėtingų konfigūracijų erdvėje. Fizikinių dydžių operatorių tenzorinės savybės. Banginės funkcijos ir matriciniai elementai.

11. Kvazisukinys sudėtingoms elektronų konfigūracijoms.

Operatoriai atskirų sluoksnių kvazisukinio erdvėje. Konfigūracijų superpozicija kvazisukinio erdvėje. Tenzoriai rezultatinių kvazisukinio erdvėje ir jų submatriciniai elementai.

12. Izosukinio formalizmas konfigūracijai $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2}$.

Izosukinio bazė ir jos savybės. Papildoma būsenų klasifikacija izosukinio erdvėje. Elektronų sąveikos operatorius izosukinio bazėje.

Pagrindinė literatūra

1. B.R.Judd. Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1998.
2. B.R.Judd. Second Quantization and Atomic Spectroscopy, Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1967.
3. Z.Rudzikas. Theoretical Atomic Spectroscopy, Cambridge University Press, 1977 (2nd edition 2007), p.424.
4. G.Gaigalas, Z.Rudzikas, Ch.Froese Fischer. Reduced Coefficients (Subcoefficients) of Fractional Parentage for p -, d -, and f -shells. - At.D.Nucl.D.Tbl., V.70, 1-39 (1998).
5. G.Gaigalas, A.Bernotas, Z.Rudzikas, Ch.Froese Fischer. Spin-other-orbit Operator in the Tensorial Form of Second Quantization, Physica Scripta, 57, 207-212 (1998).
6. G.Gaigalas, S.Fritzsche, Z.Rudzikas. Reduced Coefficients of Fractional Parentage and Matrix Elements of the Tensor $W^{(kqkj)}$ in jj -coupling. - At.D.Nucl.D.Tbl., V.76, 235-269 (2000).
7. G.Gaigalas, T.Žalandauskas, Z.Rudzikas. Analytical expressions for special cases of LS - jj transformation matrices for a shell of equivalent electrons. - Lith.J.Phys., 41, No 3, 226-231 (2001).
8. G.Gaigalas, T.Žalandauskas, Z.Rudzikas. LS - jj transformation matrices for a shell of equivalent electrons. - At.D.Nucl.D.Tbl., V.84, 99-190 (2003).

Papildoma literatūra

1. З.Б.Рудзикас, Ю.М.Каняускас. Квазиспин и изоспин в теории атома, "Mokslas", Vilnius, 1984.
2. Z.Rudzikas. Self-consistent Field Method in Various Approximations: "Forgotten Ideas". - Molecular Physics, 98, N 16, 1205-1212 (2000).

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Gediminas Gaigalas	hab. dr	prof.	<ol style="list-style-type: none"> 1. C. Froese Fischer, S. Verdebout, M. Godefroid, P. Rynkun, P. Jönsson, G. Gaigalas, Doublet-quartet energy separation in boron: A partitioned-correlation-function-interaction method // Physical Review A, Atomic, molecular, and optical physics. ISSN 1050-2947. 2013, Vol. 88, p. 062506. 2. P. Jönsson, P. Bengtsson, J. Ekman, S. Gustafsson, L. B. Karlsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer, D. Kato, I. Murakami, H. A. Sakaue, H. Hara, T. Watanabe, N. Nakamura, N. Yamamoto, Relativistic CI calculations of spectroscopic data for the 2p6 and 2p53l configurations in Ne-like ions between Mg III and Kr XXVII // Atomic Data and Nuclear Data Tables. ISSN0092-640x 2014, Vol.100, pp. 1-154. 3. P. Rynkun, P. Jönsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer, Energies and E1, M1, E2, and M2 transition rates for states of the 2s22p3, 2s2p4, and 2p5 configurations in nitrogen-like ions between F III and Kr XXX // Atomic Data and Nuclear Data Tables. ISSN0092-640x 2014, Vol.100, pp. 315-402. 4. A. Alkauskas, P. Rynkun, G. Gaigalas, A. Kynienė, R. Kisielius, S. Kučas, Š. Masys, G. Merkelis, V. Jonauskas, Theoretical investigation of spectroscopic properties of W25+ // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, ISSN 0022-4073, 2014, Vol. 136, pp. 108-118. 5. L. Radžiūtė, G. Gaigalas, D. Kato, P. Jönsson, P. Rynkun, S. Kucas, V. Jonauskas, R. Matulianec, Energy level structure of Er3+ //

			<p>Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, ISSN: 0022-4073. 2015, Vol. 152, pp. 94-106.</p> <p>6. J. Bieron, C. Froese Fischer, S. Fritzsche, G. Gaigalas, I.P. Grant, P. Indelicato, P. Jönsson, P. Pyykko, Ab initio MCDHF calculations of electron-nucleus interaction // Physica Scripta, ISSN: 0031-8949. 2015, Vol. 90, p. 054011. G.</p> <p>7. Gaigalas, P. Rynkun, C. Froese Fischer, Lifetimes of 4p(5)4d levels in highly ionized atoms // Physical Review A, Atomic, molecular, and optical physics. ISSN 1050-2947. 2015, Vol. 91, p. 022509.</p> <p>8. L. Radžiūtė, J. Ekman, P. Jönsson, G. Gaigalas, Extended calculations of level and transition properties in the nitrogen isoelectronic sequence: Cr XVIII, Fe XX, Ni XXII, and Zn XXIV // Astronomy and Astrophysics, ISSN 1432-0746, 2015, Vol. 582, A61.</p> <p>9. P. Jönsson, L. Radžiūtė, G. Gaigalas, M.R. Godefroid, J.P. Marques, T. Brage, C. Froese Fischer, I.P. Grant, Accurate multiconfiguration calculations of energy levels, lifetimes, and transition rates for the silicon isoelectronic sequence Ti IX – Ge XIX, Sr XXV, Zr XXVII, Mo XXIX // Astronomy and Astrophysics, ISSN 1432-0746, 2016, Vol. 585, A26.</p> <p>10. C. Froese Fischer, I.P. Grant, G. Gaigalas, P. Rynkun, Lifetimes of some 2s(2)2p P-2(3/2) states from variational theory // Physical Review A, Atomic, molecular, and optical physics. ISSN 1050-2947. 2016, Vol. 93, p. 022505.</p>
<p>Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2017 m. vasario mėn. 21 d., protokolo Nr. 108</p>			
<p>Komiteto pirmininkas S. Juršėnas</p>			