

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Katedra
Atominių skaičiavimų praktika	Fiziniai mokslai, Fizika, 02P	VU TFAI	
Studijų būdas	Kreditų skaičius (VU/ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (VU/ECTS)
Paskaitos	1/1,5	Konsultacijos	1/1,5
Individualus	3/4,5	Seminarai	1/1,5

Dalyko anotacija:

Vandeniliškas jonas. Kinetinės energijos ir sąveikos su branduoliu operatoriai. Nereliatyvistinis vandenilio uždavinys. Dirako lygtis. Viendalelės reliatyvistinės pataisos. Daugiadalelis uždavinys. Viendalelis artinys. Daugiaelektronė banginė funkcija. Elektronų elektrostatinės sąveikos operatorius ir jo matricinių elementų savybės. Konfigūracijos termų energijos ir jų suvidurkinimas. Koreliacinių efektų įskaitymo būdai: išplėstinis, nepilnas kintamųjų atskyrimas, konfigūracijų superpozicija. Trikdžių teorija atominiuose skaičiavimuose.

Radialiosios orbitalės (RO) ir jų gavimo būdai. Analizinės RO. Hartrio ir Foko lygtys (HFL). RO ortogonalumo užtikrinimo būdai. HFL skaitmeninio sprendimo metodai. Pagrindinės RO ir radialiųjų integralų savybės. Kvazireliatyvistinės HFL ir jų sprendimo ypatumai. Dirako, Hartrio ir Foko lygtys ir jų skaitmeninis sprendimas. Daugiakonfigūracinės Hartrio, Foko ir Jucio lygtys (HFJL). Supaprastintos HFJL. HFJL sprendinių pagrindinės savybės. Transformuotos radialiosios orbitalės. Modelinio potencialo panaudojimas RO gauti.

Energijos spektrų skaičiavimas. *LS*-ryšys. “Sukinio-orbitos” sąveikos operatorius. Energijos spektrų skaičiavimas vienkonfigūraciniu artiniu. Breito ir Paulio artinys. Spektrų skaičiavimas reliatyvistiniame *jj*-ryšyje. Energijos spektrų skaičiavimas konfigūracijų superpozicijos metodu. Pataisinių konfigūracijų atrinkimo metodika. Pataisinių konfigūracijų termų sudarymas ir atranka. Energijos matricių diagonalizavimo būdai. Pusiauempirinis energijos spektrų tyrimas. Pusiauempirinių parametrų fizikinė prigimtis. Supaprastintas koreliacinių pataisų skaičiavimo metodas. Spektrų skaičiavimas trikdžių teorijos pagalba.

Šuolių charakteristikų skaičiavimas. Pagrindinės elektronų šuolių charakteristikos. Elektrinių ir magnetinių multipolinių šuolių operatoriai. Skirtingos šuolio operatoriaus formos. Atrankos taisyklės *LS*- ir *jj*-ryšyje. Daugiaelektroniai šuoliai. Šuolių daugiakrūviuose jonuose ypatumai. Radiacinės gyvavimo trukmės. Supaprastintas radiacinių gyvavimo trukmių įvertinimas. Šuolių charakteristikų panaudojimas medžiagos fizikinėms charakteristikoms nustatyti.

Programinė įranga atominiams skaičiavimams. R.D. Cowano programa “rcn36”. Ch. Froese-Fischer programų kompleksas: HF lygčių sprendimas, daugiakonfigūracinių lygčių sprendimo programa, energijos ir šuolio operatoriaus matricinių elementų kampinių dalių skaičiavimo programos, termų sąrašo sudarymo programa, energijos operatoriaus matricos skaičiavimo ir diagonalizavimo programa, šuolių charakteristikų skaičiavimo programa. Atomo teorijos skyriaus programos: transformuotų radialiųjų orbitalių gavimo programa, pataisinių konfigūracijų atrankos programa, termų atrankos programa, radialiųjų integralų ir pataisų prie jų skaičiavimo programos, matricos formavimo ir diagonalizavimo programa. Ch. Froese-Fischer komplekso modernizavimas Atomo teorijos skyriuje. Reliatyvistinių skaičiavimų programų kompleksas GRASP2.

Pagrindinė literatūra:

1. H. A. Bethe and E. E. Salpeter. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms. Berlin, Springer Verlag, 1957.
2. D. R. Hartree. The Calculation of Atomic Structures. N.Y., John Wiley and Sons, 1957.
3. А. Юцис. Избранные труды. Вильнюс, «Мокслас», 1987.
4. И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Москва, «Физматгиз», 1977.
5. Р. Каразия. Суммы атомных величин и средние характеристики спектров. Вильнюс, «Мокслас», 1991.
6. Ch. Froese Fischer. The Hartree-Fock method for atoms. New York, John Wiley and Sons. 1977.
7. Ch. Froese Fischer. The MCHF atomic-structure package. Com. Phys. Comm., v. 128, 635-636 (2000).
8. R. D. Cowan. The Theory of Atomic Structure and Spectra. University of California Press, 1981.
9. Z. Rudzikas. Theoretical Atomic Spectroscopy (Many-Electron Atoms). Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
10. P. Bogdanovich. Multiconfiguration approach in the study of atomic spectra. Lith. J. Physics, v. 44, No. 2, p. 135-153 (2004).
11. P. Bogdanovich. Modern methods of multiconfigurational studies of many-electron highly charged ions. Nuclear Instruments and Methods, B, v. 235, p. 92-99, (2005).
12. P. Bogdanovich and O. Rancova. Quasirelativistic approach for *ab initio* study of highly charged ions, Phys. Scr. 78, 045301 (2008) (9 p.)

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo Laipsnis	pedag . vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Pavelas Bogdanovičius	Habil.dr.	Prof.	<ol style="list-style-type: none"> 1. P. Bogdanovich, R. Karpuškienė and O. Rancova. Influence of the two-electron transitions on the lifetimes of excited levels in boron isoelectronic sequence, Phys. Scripta, v. 75, p. 669-675 (2007). 2. P. Bogdanovich, O. Rancova, Quasirelativistic Hartree-Fock equations consistent with Breit-Pauli approach, Phys. Rev. A, v. 74, 052501(10) (2006). 3. P. Bogdanovich, R. Karpuškienė, <i>Ab initio</i> oscillator strengths and transition probabilities in Cr XVII, ADNDT, 94, p. 623-649 (2008). 4. P. Bogdanovich, O. Rancova, Adjustment of the quasirelativistic equations for <i>p</i>-electrons, Phys. Rev. A, 76, 012507 (2007). 5. P. Bogdanovich and O. Rancova, Quasirelativistic approach for <i>ab initio</i> study of highly charged ions, Phys. Scr. 78, 045301 (2008) (9 p.) 6. R. Karpuškienė and P. Bogdanovich, <i>Ab initio</i> oscillator strengths and transition probabilities in aluminium-like Ca VIII,

			Atomic Data and Nuclear Data Tables 95 (2009) 533–546. 7. R. Karpuškienė, O. Rancova and P. Bogdanovich, <i>Ab initio</i> study of spectral properties of W II, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 085002 (6pp).
--	--	--	--

Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2010 m. spalio mėn. 27 d. ,
protokolo Nr. 3

Komiteto pirmininkas S. Juršėnas

