

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Fakultetas	Centras/Institutas/Skyrius
<b>Teorinė atomų spektroskopija</b> (8 ECTS kreditai)	Fizika N 002	Fizikos	Teorinės fizikos ir astronomijos institutas
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
paskaitos	20	konsultacijos	10
individualus	160	seminarai	10

Dalyko anotacija			
<ol style="list-style-type: none"> <li>Įvadas. Atomo struktūros atradimas. Šredingerio lygtis. Centrinio lauko artutinumas. Judesio kiekio momento teorijos pagrindai. Nereliatyvistinis ir reliatyvistinis atomo hamiltonianai ir banginės funkcijos. Reliatyvistinės pataisos ir efektai.</li> <li>Daugiaelektroniai atomai ir jonai. Kilminiai ir subkilminiai koeficientai. Du ir daugiau ekvivalentinių elektronų sluoksniai. Banginės funkcijos antisimetrizavimas.</li> <li>Atomų ir jonų energijos lygmenys. Energijos spektrų klasifikavimas naudojant įvairius ryšio tipus. Tarpinis ryšys, ryšio tipo optimizavimas. Spektrinių linijų hipersmulkiąji struktūra, jų izotopinis ir Lamb postūmis. Koreliaciniai efektai.</li> <li>Elektronų spinduliuojamieji šuoliai atomuose ir jonuose. 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.</li> <li>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.</li> <li>Fotosužadinimas, fotojonizacija ir fotorekombinacija. Detalaus balanso principas.</li> <li>Sužadinimai elektronais. Susidūrimų stiprumas. Artimojo ryšio metodas. R-matricos metodas. Iškraipytųjų bangų artinys. Plokščių ir kuloninių bangų Borno artiniai. Nepriklausomų procesų izoliuotų rezonansų artinys.</li> <li>Jonizacija elektronais. Nuo laiko priklausantis artimojo ryšio metodas. Kuloninis-Borno ir iškraipytųjų bangų artiniai. Dvielektronis pagavimas ir rekombinacija. Autojonizacija.</li> </ol>			
Pagrindinė literatūra			
<ol style="list-style-type: none"> <li>Cowan R.D. The Theory of Atomic Structure and Spectra. University of California Press, Berkeley, 1981.</li> <li>Ch.Froese Fischer. The Hartree-Fock Method for Atoms (A Numerical Approach). John-Wiley and Sons, New York -London-Sydney-Toronto, 1997.</li> <li>Sakurai J. J., Napolitano J. Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley. 2011.</li> <li>Friedrich H. Theoretical Atomic Spectroscopy. Springer. 2006.</li> <li>Gordon W. F. Drake. Springer Handbook of Atomic Molecular and Optical Physics. Springer. 2006.</li> <li>Boyle J. J., Pindzola M. S. Many-body Atomic Physics. Cambridge University Press. 1998.</li> <li>Salzmann D., Atomic Physics in Hot Plasmas, Oxford University Press, 1998.</li> </ol>			
Konsultuojantys dėstytojai	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Valdas Jonauskas	dr.	doc.	1. Š. Masys, V. Jonauskas. <i>The Crystalline Structure of Tensile Strained SrRuO<sub>3</sub>: A First-Principles</i>

			<p><i>Investigation</i>. <i>Crystal Growth &amp; Design</i> 18, 3397 (2018). DOI: 10.1021/acs.cgd.8b00113</p> <p>2. V. Jonauskas, <i>Electron-impact double ionization of the carbon atom</i>, <i>Astronomy &amp; Astrophysics</i> 620, A188 (2018). DOI: 10.1051/0004-6361/201834303</p> <p>3. A. Kynienė, S. Kučas, Š. Masys, V. Jonauskas. <i>Electron-impact ionization of Fe<sup>δ+</sup></i>, <i>Astronomy &amp; Astrophysics</i> 624, A14 (2019). DOI: 10.1051/0004-6361/201833762</p> <p>4. V. Jonauskas, Š. Masys. <i>Double- and triple-Auger processes in C<sup>l+</sup></i>, <i>J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer</i> 229, 11 – 16 (2019). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.02.032</p> <p>5. S. Kučas, P. Drabužinskis, A. Kynienė, Š. Masys and V. Jonauskas. <i>Evolution of radiative and Auger cascades following 2s vacancy creation in Fe<sup>2+</sup></i>, <i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> 52, 225001 (2019). DOI: 10.1088/1361-6455/ab46fa</p> <p>6. V. Jonauskas. <i>Electron-impact ionization of Sn<sup>4+</sup></i>, <i>J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer</i> 239, 106659 (2019). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106659</p> <p>7. A. Kynienė, S. Kučas, S. Pakalka, Š. Masys, and V. Jonauskas. <i>Electron-impact single ionization of Fe<sup>3+</sup> from the ground and metastable states</i>, <i>Phys. Rev. A</i> 100, 052705 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevA.100.052705</p> <p>8. V. Jonauskas, A. Kynienė, S. Kučas, S. Pakalka, Š. Masys, A. Prancikevičius, A. Borovik, Jr., M. F. Gharaibeh, S. Schippers, and A. Müller. <i>Electron-impact ionization of W<sup>δ+</sup></i>, <i>Phys. Rev. A</i> 100, 062701 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevA.100.062701</p> <p>9. V. Jonauskas, <i>Electron-impact single ionization of Si<sup>+</sup></i>, <i>Astronomy &amp; Astrophysics</i> 642, A185 (2020). DOI: 10.1051/0004-6361/202038266</p> <p>10. S. Kučas, A. Kynienė, Š. Masys, V. Jonauskas, <i>Multiple photoionization cross sections for Fe<sub>2+</sub> K shell</i>, <i>Astronomy &amp; Astrophysics</i> 643, A46 (2020). DOI: 10.1051/0004-6361/202038762</p>
<p>Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2022 m. vasario 02 d.,          protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-32</p>			
<p>Komiteto pirmininkas S. A. Juršėnas</p>			