

Antrinis kvantavimas ir papildomos simetrijos atomo fizikoje: teorija ir praktinis pritaikymas

Secondary quantization and additional symmetries in atomic physics: theory and practical application

Gediminas Gaigalas

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius
gediminas.gaigalas@tfai.vu.lt

Atominiai duomenys plačiai naudojami įvairiose mokslo srityse: atomo spektroskopijoje, plazmos fizikoje, astrofizikoje ir t.t. Straipsnyje [1] parodyta, kad laboratorinė spektroskopija stipriai atsilieka nuo teleskopinių stebėjimų ir atominių parametrų poreikis ir apimtis sparčiai auga. Eksperimentinis atominių duomenų gavimas dažnai yra labai sudėtingas, reikalauja brangios aparatūros ir didelių eksperimentatorių pastangų. Išankstinis teorinis spektrų modeliavimas leidžia supaprastinti ir atpiginti eksperimentus.

Atominių duomenų poreikis ypač išaugo, kai pirmą kartą mokslo istorijoje (2015 m. rugsėjo 14 d.) buvo aptiktos gravitacinės bangos. 2017 m. rugpjūčio mėn. gravitacinės bangos buvo užfiksuotos iš dviejų susilieusių neutroninių žvaigždžių (NŽ). Tais pačiais metais JAV mokslininkai Raineris Weissas, Barry C. Barishas ir Kipas S. Thorne'as buvo įvertinti Nobelio fizikos premija už svarų įdirbį atrandant gravitacijos bangas ir jas tiriant. Kartu su gravitacinėmis bangomis buvo užfiksuota ir šviesa, sklaidžiama medžiagos, susidariusios besijungiant dviem NŽ. Manoma, kad medžiagoje, susidariusioje jungiantis dviem NŽ, yra gausu sunkiųjų elementų, tokių kaip auksas, platina, ar lantanidų grupės elementų. Kadangi šie elementai pasižymi skirtingomis šviesos sugerties savybėmis, kiekvieno jų sugeriamos šviesos bangos ilgis ir sugėrimo laipsnis yra unikalūs, todėl medžiagos sudėtis gali būti nustatyta pagal ją sudarančių elementų atomines charakteristikas ir naujai susidariusios kilonovos šviesos ryškumo pasiskirstymą pagal bangos ilgį. Problema ta, kad šiuo metu pasaulyje trūksta šių elementų tikslų, išsamių atominių duomenų. Todėl tik labai tikslūs teoriniai tyrimai gali užpildyti šią spragą.

Atsižvelgiant į aukščiau paminėtus šiuolaikinės atomo teorijos poreikius, šiame darbe buvo plėtojama atomo teorija, kuriamos programos ir atliekami skaičiavimai. Plėtojant teoriją pagrindinis dėmesys buvo skirtas sukininės kampinės dalies integravimo metodikai, transformacijai iš jj ryšio į LS ryšį, optimalaus ryšio ieškojimui, biortogonalinių orbitalių metodui, kuris leistų nagrinėti įvairias atomo ar jono charakteristikas dar didesniu tikslumu. Sukurtų metodų pagrindu buvo parašytos atitinkamos kompiuterinės programos, tame tarpe kompiuteriniai paketai skirti didelės apimties atomų bei jonų su atvirais sluoksniais skaičiavimams, remiantis daugiakonfigūraciniu (Dirako), Hartrio ir Foko ar konfigūracijų superpozicijos artiniais.

Darbe buvo atlikta nemažai *ab initio* teorinių skaičiavimų, kurių pagalba buvo aprobuota šiame darbų cikle sukurta metodika ir programinė įranga:

1. Teoriniuose spektroskopiniuose tyrimuose buvo atlikti didelės apimties skaičiavimai. Labai tikslūs rezultatai gauti visoms antrojo periodo elementų izoelektroninėms sekoms nuo Li iki Ne. Iš trečiojo periodo buvo nagrinėtos izoelektroninės sekos nuo Al iki S. Taip pat buvo nagrinėti atskiri atomai ir jonai, kurie yra ypač aktualūs astrofizikoje ir plazmos fizikoje. Buvo pateikti išsamūs, sistemingi ir labai dideli energijos spektro, šuolių, gyvavimo trukmių duomenų rinkiniai.

2. Serija darbų yra skirta hipersmulkiosios struktūros nagrinėjimui. Plėtojant programinę įrangą buvo teoriškai surastos Be, C, B, Mg, N tipo izoelektroninių sekų hipersmulkiosios A ir B struktūros ir Lande g_J konstantos. Taip pat šie tyrimai atlikti atskiriems atomams ir jonams reikalingiems astrofizikoje.

3. Izotopinis poslinkis buvo nagrinėtas Be, C, B, Mg, N tipo izoelektroninės sekos jonams bei Zn atomui. Tiriamieji darbai leido įvertinti sukurtų programų generuojamų duomenų tikslumą, skaičiavimo schemų subtilybes, bei kamieno elektronų koreliacijų svarbą.

4. Kristalinio lauko tyrimuose didžiausias dėmesys buvo skiriamas tris kartus jonizuoto Er analizei. Šis elementas buvo pasirinktas dėl jo svarbos termo-branduolinės sintezės reaktoriuose. Buvo atlikta energijos spektro, pagrindinės konfigūracijos draustinių šuolių analizė. Sukurtas naujas Štarko suskilimo elektriniame lauke skaičiavimui skirtas paketas ir atlikta Er IV analizė. Taip buvo plečiamos GRASP programinio paketo galimybės skaičiuoti sudėtingas elektronų konfigūracijas.

5. Kilonovos, kaip dviejų besijungiančių NŽ astronominio įvykio, kuris taip pat yra ir gravitacinių bangų šaltinis, tyrimai skatino tirti lantanidų grupės vieną kartą jonizuotus jonus, neodimio jonus (Nd II, Nd III ir Nd IV) ir kilonovai svarbius silpnų surištų būsenų šuolius. Kadangi tokius šuolius sudėtinga stebėti eksperimente, buvo pradėta plėtoti šuolių tikslumo analizės metodika, paremta skirtingomis kalibruotėmis.

6. Išsamūs simetrijų pažeidimų tyrimai, nustatant elektrinį dipolinį momentą, buvo atlikti sunkiesiems elementams Ra, Hg, Yb, Cn.

Reikšminiai žodžiai: daugiaelektroninė atomo teorija, sukininis-kampinis integravimas, antrinis kvantavimas, Racah algebra, kvazisukinys.

Literatūra

[1] Nature Editorial, Nailing the fingerprints in the stars, Nature **503**, 437 (2013).