

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

Laima Radžiūtė

LYGINUMO IR LAIKO APGRĄŽOS PAŽEIDIMO TYRIMAS ATOMO FIZIKOJE

Daktaro disertacijos santrauka
Fiziniai mokslai, fizika (02 P)

Vilnius, 2017

Daktaro disertacija rengta 2012-2016 metais Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institute.

Mokslinis vadovas - prof. habil. dr. Gediminas Gaigalas (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Mokslinis konsultantas - habil. dr. Jacek Bieroń (Lenkija, Jogailos universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Disertacija ginama Vilniaus universiteto Fizikos mokslo krypties taryboje:

Pirmininkė - habil. dr. Gražina Tautvaišienė (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Nariai:

prof. habil. dr. Józef E. Sienkiewicz (Gdanskio technikos universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P);

prof. dr. Paulius Miškinis (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P);

prof. dr. Juozas Šulskus (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P);

doc. dr. Olga Rancova (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Disertacija bus ginama viešame Fizikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2017 m. vasario mėn. 28 d. 14:00 val. Teorinės fizikos ir astronomijos instituto auditorijoje D401.

Adresas: Saulėtekio al. 3 LT-10257, Vilnius, Lietuva

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2017 m. sausio mėn. 28 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus universiteto, Fizinių ir technologijos mokslų centro bibliotekose ir VU interneto svetainėje adresu:

www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius

VILNIUS UNIVERSITY
CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY

Laima Radžiūtė

RESEARCH ON PARITY AND TIME-REVERSAL VIOLATION IN ATOMIC PHYSICS

Summary of doctoral dissertation
Physical Sciences, Physics (02 P)

Vilnius, 2017

Doctoral Dissertation was completed during 2012-2016 at Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Scientific supervisor - prof. habil. dr. Gediminas Gaigalas (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P).

Scientific consultant - habil. dr. Jacek Bieroń (Poland, Jagiellonian University, Physical sciences, Physics – 02 P).

The doctoral dissertation is defended at the Vilnius University Doctoral Dissertation Committee in Physical Science:

Chairman - habil. dr. Gražina Tautvaišienė (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P).

Members:

prof. habil. dr. Józef E. Sienkiewicz (Gdańsk University of Technology, Physical sciences, Physics – 02 P);

prof. dr. Paulius Miškinis (Vilnius Gediminas Technical University, Physical sciences, Physics – 02 P);

prof. dr. Juozas Šulskus (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P);

doc. dr. Olga Rancova (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P).

The dissertation will be defended at 14:00 on February 28, 2017, at the Institute of Theoretical Physics and Astronomy in room D401.

Address: Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania.

Summary of dissertation mailed on January 28, 2017.

The copies of the dissertation are exposed at the libraries of Vilnius University and of Center for Physical Sciences and Technology, VU's website

www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius

Turinys

Aprobacija	6
1 Įvadas	9
2 Teoriniai principai	14
3 N ir Si izoelektronių sekų jonų atominės savybės [A1, A2]	19
4 Er^{3+} energijos spektras [A3, A4]	24
5 Lyginumo neišsilaikymas helio izoelektronėje sekoje [A5]	26
6 Elektrinio dipolinio momento teorinis tyrimas [A6]	30
7 Elektrinio dipolinio momento Z priklausomybė homologinėje sekoje [A7]	34
8 Pagrindinės išvados	39
Literatūra	41

Aprobacija

Moksliniai straipsniai susiję su disertacija:

- A1 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*, A&A **582**, A61 (2015). Data Tables are available at Strasbourg Astronomical Data Center (CDS) (<http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/qcat?J/A+A/582/A61>).
- A2 P. Jönsson, L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, M. R. Godefroid, J. P. Marques, J. Ekman, 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*, A&A **585**, A26 (2016). Data Tables are available at Strasbourg Astronomical Data Center (CDS) (<http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/qcat?J/A+A/585/A26>).
- A3 L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, D. Kato, P. Jönsson, P. Rynkun, S. Kučas, V. Jonauskas, R. Matulianec, *Energy level structure of Er^{3+}* , J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **152**, 94 (2015).
- A4 L. Radžiūtė**, D. Kato, G. Gaigalas, P. Jönsson, P. Rynkun, V. Jonauskas, S. Kučas, *Energy level structure of the ground configuration in the Er^{3+} free ion*, Phys. Scr. **90**, 054001 (2015).
- A5 L. Radžiūtė**, E. Gaidamauskas, G. Gaigalas, J. Li, C. Dong, P. Jönsson, *Weak- and hyperfine interaction induced $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ E1 transition rates of He-like ions*, Chin. Phys. B **24**, 043103 (2015).
- A6 L. Radžiūtė**, P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, *Multiconfiguration Dirac - Hartree-Fock calculations of atomic electric dipole moments of ^{225}Ra , ^{199}Hg , and ^{171}Yb* , Phys. Rev. A **90**, 012528 (2014).
- A7 L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, P. Jönsson, J. Bieroń, *Electric dipole moments of superheavy elements: A case study on copernicium*, Phys. Rev. A **93**, 062508

(2016).

Tezės ISI duomenų bazėje

A8 G. Gaigalas, J. Bieroń, **L. Radžiūtė**, *Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of EDM for Ra, Hg, Yb*, J. Phys.: Conf. Ser. **488**, 122001 (2014).

Kiti moksliniai straipsniai:

A9 V. Jonauskas, T. Pütterich, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, G. Gaigalas, R. Kisielius, **L. Radžiūtė**, P. Rynkun, and G. Merkelis, *Cascade emission in electron beam ion trap plasma of W^{25+} ion*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **160**, 22 (2015).

A10 V. Jonauskas, A. Kynienė, G. Merkelis, G. Gaigalas, R. Kisielius, S. Kučas, Š. Masys, **L. Radžiūtė**, P. Rynkun, *Contribution of high- nl shells to electron-impact ionization processes*, Phys. Rev. A **91**, 012715 (2015).

A11 V. Jonauskas, A. Kynienė, P. Rynkun, S. Kučas, G. Gaigalas, R. Kisielius, Š. Masys, G. Merkelis, **L. Radžiūtė**, *Theoretical investigation of spectroscopic properties of W^{26+} in EBIT plasma*, J. Phys. B: Mol. Opt. Phys. **48**, 135003 (2015).

Tezės ISI duomenų bazėje

A12 V. Jonauskas, A. Kynienė, P. Rynkun, **L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, R. Kisielius, S. Kučas, Š. Masys, G. Merkelis, *Theoretical investigation of spectroscopic properties of W^{27+} ion*, J. Phys.: Conf. Ser. **635**, 052059 (2015).

A13 V. Jonauskas, A. Kynienė, Š. Masys, R. Kisielius, S. Kučas, P. Rynkun, **L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, G. Merkelis, *Theoretical study of W^{27+} spectra in EBIT plasma*, J. Phys.: Conf. Ser. **635**, 052090 (2015).

Tezės pristatytos konferencijose:

C1 G. Gaigalas, J. Bieroń, **L. Radžiūtė**, *Multiconfiguration Dirac - Hartree - Fock calculations of EDM for Ra, Hg, Yb*, 28th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (XXVIII ICPEAC), Book of Abstract, 24-30 July, 2013, Lanzhou, (China) Abstract ID 17308.

C2 **L. Radžiūtė**, G. Gaigalas, J. Bieroń, *Multiconfiguration Dirac - Hartree - Fock calculations of atomic EDM for Ra, Hg, Yb, Xe and Rn*, 40st Lithuanian National

Conference of Physics Book of Abstract, 10-12 June, 2013, Vilnius, (Lithuania) p. 214.

C3 L. Radžiūtė, D. Kato, G. Gaigalas, P. Jönsson, P. Rynkun, V. Jonauskas, S. Kučas, *Energy levels of Er^{3+} free ion*, International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications (ICAMDATA 90), Book of Abstracts, 21-25 September, 2014 Jena, (Germany) p. 91.

C4 L. Radžiūtė, G. Gaigalas, P. Jönsson, J. Ekman, *Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock computation of energy spectrum of ions: Cu XV, Zn XVI, Ga XVII, and Ge XVIII* 41st Lithuanian National Conference of Physics Book of Abstract, 17-19 June, 2015, Vilnius, (Lithuania) p. 147.

skyrius 1

Įvadas

Elementariosios dalelės ar neišsigimusios dalelių sistemos nuolatinio elektrinio dipolinio momento (EDM) egzistavimas, leistų teigti, kad yra pažeidžiamos lyginumo (P) ir laiko-apgražos (T) simetrijos [1, 2]. Lyginumo neišsilaikymas buvo nustatytas ^{60}Co skilimo metu (β -skilimas) [3]. Vėliau šis neišsilaikymas buvo stebėtas skylant miuonams [4] ir pionams [5]. Krūvio ir lyginumo (CP) simetrijos pažeidimas buvo pastebėtas dėl silpnosios sąveikos skylančiuose neutraliuose kaonuose K^0 [6]. CP ir T simetrijų neišsilaikymas buvo nustatytas neutralių kaonų sistemoje [7]. Tiesioginis T simetrijos pažeidimas buvo nagrinėtas darbuose [8, 9]. Paskutiniu metu tiesioginio stebėjimo metu T simetrijos pažeidimas buvo pastebėtas B mezonų sistemoje [10].

Standartinis modelis numato P , C , CP ir T simetrijų pažeidimą [11, 12], tačiau pažeidimų dydis nepaaiškina bariogenezės kilmės, elementariųjų dalelių masės hierarchijos, medžiagos ir antimedžiagos stebimos visatoje kiekio skirtumo, bei tamsiosios medžiagos prigimties. Šie ir kiti svarbūs visatos susidarymo procesai reikalauja standartinio modelio plėtojimo. Keli tokie išplėtojimai numato EDM dėl P ir T simetrijų pažeidžiančių sąveikų, kuris būtų žymiai didesnis nei numato standartinis modelis.

Elementariųjų dalelių ir sudėtinių sistemų nuolatinio elektrinio dipolinio momento [1, 13] tyrimai yra komplikuoti tiek teoriniu požiūriu tiek eksperimentiniu. Elektrinis dipolinis momentas dar nėra nustatytas eksperimentiškai. Eksperimentinės paieškos tęsiasi jau 50 metų, tuo metu teorija sprendžia ne tik fundamentinių parametų didumo klausimus, bet ir nurodo kokiose sistemose: neutronuose [14], paramagnetiniuose atomuose (Tl atominiuose eksperimentuose [15]), diamagnetiniuose atomuose (Hg eksperimentuose [16]), molekulėse [17, 18] ar kitose sistemose [1, 19, 20] yra pakankamai dideli stiprinimo daugikliai. Eksperimentatoriams yra reikalingi stiprinimo daugikliai (amplitudės dydis) prieš pradedant EDM eksperimentą naujose sistemose [2]. Šiame darbe buvo siekiama pristatyti EDM skaičiavimus, atliktus MCDHF rémuose, supersunkiam elementui $^{285}_{112}\text{Cn}$.

Šiuo metu EDM eksperimentai su elementais turinčiais trumpą gyvavimo trukmę yra neįmanomi. Tačiau atomų gaudyklių [21, 22], kvantinių sistemų kontroliavimo [23, 24], radioaktyvių elementų [25] ir supersunkių [26] spektroskopijos galimybės greitai didėja. Tuo pačiu metu supersunkių elementų stabilumo salos klausimas yra atviras [27, 28]. EDM eksperimentai su supersunkiais elementais (jei taptų įmanomi) būtų galutinė riba, testuojant lyginumo ir laiko apgražos simetrijų pažeidimus atomo fizikoje.

Skaičiuojant P, T -nelyginių sąveikų matricinių elementų radialiuosius integralus yra svarbu turėti tikslias radialiasias bangines funkcijas pradžioje. Tuo tarpu skaičiuojant elektrinio dipolinio momento matricinius elementus radialiosios banginės funkcijos turi būti tikslios visame diapazone. Skirtumas tarp šuolių tikimybių, apskaičiuotų ilgio ir greičio formose, rodo radialiųjų funkcijų tikslumą. Šiai analizei buvo parinktos azoto ir silicio izoelektronės sekos.

Tam, kad gautume tikslias atominių būsenų funkcijas, tinkamas elektrinio dipolinio momento tyrimams, turi būti patikrinta koreliacinių efektų įtaka. Tuo pačiu metu konfigūracinių būsenų bazė turi būti ne per didelė turimiems kompiuteriniams resursams. Šiam tyrimui buvo parinkta Er^{3+} pagrindinė konfigūracija.

Tikslas:

- Ištirti lyginumo ir laiko apgražos atomo teorijoje pažeidimą, naudojant daugiakonfigūracinį Dirako, Hartrio ir Foko metodą, ir pateikti labiausiai tinkamus elektrinio dipolinio momento eksperimentams elementus.

Uždaviniai:

1. Išplėsti daugiakonfigūracinį Dirako, Hartrio ir Foko metodą:

- rasti sąveikų neinvariantiškų lyginumo ir laiko atžvilgiu matricinių elementų tarp skirtingo lyginumo būsenų daugiakonfigūraciniame Dirako, Hartrio ir Foko metode išraiškas;
- sukurti programas ir įrankius P, T nelyginių sąveikų matricinių elementų skaičiavimui;
- atlikti programų ir įrankių skirtų elektrinio dipolinio momento tyrimui testavimą.

2. Atlikti didelės apimties atominių charakteristikų tyrimus lengviems ir sunkiems jonams:

- atlikti azoto izoelektronės sekos jonų savybių tyrimus neortogonalioje bazėje;
- atlikti silicio izoelektronės sekos jonų parametrų tyrimus;
- išnagrinėti Er^{3+} jono pagrindinės konfigūracijos energijos spektrą.

3. Išanalizuoti silpnosios sąveikos lyginumo neišlaikančio nario indukuotus šuolius helio izoelektronėje sekoje:
 - ištirti lyginumo neišlaikančio nario sukeltų šuolių priklausomybę nuo Z ir N ;
 - ištirti kvantinės elektrodinamikos efektų įtaką energijos lygmenims ir šuolių tikimybėms;
 - įvertinti rezultatus lyginant su kitų autorių duomenimis.
4. Ištirti nuolatinį dipolinį momentą sunkiuose elementuose:
 - atlikti elektrinio dipolinio momento tyrimus Hg, Yb ir Ra elementams;
 - išnagrinėti elektrinio dipolinio momento priklausomybę nuo atominio skaičiaus Z pasitelkiant homologinę seką (Zn, Cd, Hg, Cn);
 - įvertinti rezultatus lyginant su kitų autorių duomenimis.

Darbo naujumas

1. Pirmą kartą *ab initio* metodu suskaičiuotas ypač dideliu tikslumu pilnas atominių parametrų rinkinys: sužadavimo energijos, A_J ir B_J konstantos, Landé faktorius, masės ir lauko poslinkiai, E1, E2 ir M1 šuolių parametrai azoto izoelektronės sekos jonams: Cr XVIII, Fe XX, Ni XXII ir Zn XXIV.
2. Pirmą kartą pristatytas pilnas energijų spektras bei šuolių parametrai (sužadavimo energijos, šuolių tikimybės, lygmenų gyvavimo trukmės) šioms konfigūracijoms $3s^23p^2$, $3s3p^3$ ir $3s^23p3d$ silicio izoelektronės sekos jonams: Ti IX - Ge XIX, Sr XXV, Zr XXVII ir Mo XXIX. Sužadavimo energijos puikiai sutampa su išmatuotomis eksperimente (skirtumas siekia - 0.03%), o bangų ilgiai yra spektroskopinio tikslumo.
3. Pirmą kartą, dideliu tikslumu pristatytas Er^{3+} jono pagrindinės konfigūracijos $[Xe]4f^{11}$ energijos lygmenų spektras *ab initio* metodu. Taip pat pateikta skirtingų koreliacijų įtaka energijos lygmenims.
4. Silpnosios ir hipersmulkiosios sąveikos sukeltų E1 šuolių $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ tikimybės pirmą kartą suskaičiuotos *ab initio* metodu helio izoelektronės sekos jonams ir parodyta eksponentinė priklausomybė silpnosios sąveikos matricinių elementų nuo branduolio krūvio Z .
5. Pirmą kartą suskaičiuotas, P, T -nelyginių pseudoskalarinės-skaliarinės ir tenzorinės-pseudotenzorinės sąveikų tarp elektronų ir nukleonų, branduolinio Schiff momento

ir elektronų elektrinio dipolinio momento sukeltas atomo elektrinis dipolinis momentas ${}_{112}^{285}\text{Cn}$ pagrindinei būsenai.

6. Pirmą kartą parodytas, atomo elektrinio dipolinio momento eksponentinis augimas didėjant branduolio krūviui Z homologinėje sekoje (Zn, Cd, Hg, Cn).

Ginamieji teiginiai

- Helio izoelektronės sekos ${}_{63}^{151}\text{Eu}$, ${}_{64}^{155}\text{Gd}$, ${}_{90}^{229}\text{Th}$ ir ${}_{91}^{231}\text{Pa}$ jonai yra tinkamiausi kandidatai eksperimentams, nagrinėjantiems lyginumo neišsilaikymo sukeltus efektus, dėl didžiausių silpnosios ir hipersmulkiosios sąveikų sukeltų šuolių tikimybių.
- Atomo elektrinis dipolinis momentas, atsirandantis dėl lyginumo ir laiko atžvilgiu neinvarinatiškų pseudoskalarinės-skaliarinės, tenzorinės-pseudotenzorinės sąveikų tarp nukleonų ir elektronų bei branduolinio Schiff momento ir elektronų elektrinio dipolinio momento, turi eksponentinę priklausomybę nuo branduolio krūvio Z .
- Supersunkių No, Cn, Nh, Lv, Ts, Og, E119 ir E120 elementų izotopai su pakankamai ilgu gyvavimo pusamžiu, būtų tinkamiausi ieškant lyginumo ir laiko simetrijos neišsilaikymo atomo teorijoje, nes darbe nustatytos elektrinio dipolinio momento vertės yra apie 30 kartų didesnės nei iki šiol žinomų izotopų.

Autoriaus indėlis

Dalyvavau atliekant skaičiavimus, rinkau ir analizavau duomenis iš literatūrinių šaltinių lentelėms straipsnyje ir CDS, ruošiau **A1** straipsnį ir pateikiau galutinį variantą spaudai. Atlikau dalį energijos spektro ir šuolių parametrų skaičiavimų ir analizės straipsniui **A2**. **A3** straipsniui atlikau energijos spektro, bei LSJ ir jj ryšių analizę. Dalyvavau straipsnio **A4** duomenų analizės, ruošimo ir publikavimo procesuose. Parašiau **A5** straipsnio dalį ir atlikau gautų rezultatų analizę. Dalyvavau kuriant programas EDM skaičiavimams atlikti ir kuriant koreliacijų įtraukimo strategiją. Atlikau skaičiavimus EOL analizei ir dalį Rydbergo serijos analizės. Paruošiau pirmąjį **A5** straipsnio variantą ir pateikiau galutinį spaudai. Pagerinau koreliacijų įtraukimo strategiją ir apskaičiavau elektrinius dipolinius momentus šiems elementams: ${}_{30}^{69}\text{Zn}$, ${}_{48}^{111}\text{Cd}$, ${}_{80}^{199}\text{Hg}$ ir ${}_{112}^{285}\text{Cn}$. Dalyvavau visuose žingsniuose ruošiant ir pateikiant **A7** straipsnį spaudai.

Disertacijos struktūra

Daktaro disertacija yra sudaryta iš 8 skyrių. Pirmasis skyrius pristato tyrimų problemą, jos aktualumą, mokslinį naujumą, pagrindinį tyrimų tikslą, užduotis ir ginamuosius teiginius. Antrasis skyrius skirtingus silpnosios sąveikos hamiltoniano narius, apibrėžtus neutraliomis srovėmis: lyginumo neišlaikantį (P -nelyginis) vektorinį-pseudovektorinį narį, lyginumo ir laiko apgražos (P, T nelyginis) simetriją pažeidžiančius tenzorinį-pseudotenzorinį ir pseudoskaliarinį-skaliarinį narius. Likusioje 2 skyriaus dalyje aptariamas MCDHF metodas, Schiff momentas ir elektrono elektrinis dipolinis momentas. Trečiame skyriuje aptariami azoto ir silicio izoelektronų sekų rezultatai. Ketvirtame pristatomi Er^{3+} jono pagrindinės konfigūracijos energijos spektro skaičiavimai. Penktame skyriuje nagrinėjama vektorinio-pseudovektorinio silpnosios sąveikos nario indukuoti šuoliai helio sekos jonams. Šis silpnosios sąveikos narys sumaišo skirtingo lyginumo būsenas. Paprastai literatūroje vektorinis-pseudovektorinis narys vadinamas lyginumo neišlaikančia silpnąja sąveika, todėl šiame darbe taip pat laikysimės šio termino. Šeštame skyriuje atlikta elektrinio dipolinio momento analizė. Septintame skyriuje elektrinio dipolinio momento tyrimai tęsiami kitu aspektu. Pagrindinis tikslas yra nustatyti labiausiai EDM eksperimentui tinkamus izotopus. Paskutinis skyrius pristato pagrindines išvadas.

skyrius 2

Teoriniai principai

2.1 Silpnoji sąveika [A5,A6]

Šiame poskyriuje yra pateikiami silpnosios sąveikos nariai tarp nukleono (N - protono arba/ir neutrono) ir elektrono (e) vykstančios per Z^0 pernašos bozoną nagrinėti disertacijoje:

$$G_V \bar{N} \gamma_\mu N \bar{e} \gamma_\mu e + i G_P \bar{N} \gamma_5 N \bar{e} e + i G_T \bar{N} \gamma_5 \sigma_{\mu\nu} N \bar{e} \sigma_{\mu\nu} e. \quad (2.1)$$

γ_μ yra Dirako matricos, $\gamma_5 = -i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$, $\sigma_{\mu\nu} = 1/2(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$. G_V , G_P ir G_T yra vektorinės-aksialinės, pseudoskaliarinės-skaliarinės ir tenzorinės-pseudotenzorinės sąveikų ryšio konstantos, atitinkamai. Pilną sąveikos išraišką galima rasti disertacijoje arba šiuose šaltiniuose [1, 19]. Aukščiau pateiktas pirmas sąveikos narys pažeidžia lyginumo (P) simetriją (P -nelyginis). Paskutiniai du nariai pažeidžia lyginumo ir laiko apgrąžos simetrijas (P, T -nelyginis). Reikėtų paminėti, kad šie nariai yra gaunami įdedant papildomą Dirako γ_5 matricą arba $i\gamma_5$ į įprastus keturdalelės silpnosios sąveikos narius.

2.1.1 Lyginumo neišsilaikymas

Remiantis nereliatyvistiniu branduolio artiniu, ir tuo kad sąveika tarp neutronų ir elektronų yra apytiksliai dešimt kartų stipresnė nei tarp protonų ir elektronų aukščiau minėta išraiškos lyginumo neišsilaikanti narį (pirmas narys išraiškoje (2.1)) galima perrašyti taip [19, 29]:

$$\hat{H}_W = -\frac{G_F}{2\sqrt{2}} Q_W \sum_{j=1}^M \gamma_{5j} \rho(r_j). \quad (2.2)$$

$\rho(r)$ yra dvikomponentė Fermi branduolio krūvio tankio funkcija, $G_F = 1.027 \times 10^{-5}/m_p^2$ Fermi silpnosios sąveikos konstanta, M - elektronų skaičius. Q_W - silpnasis branduolio krūvis: $Q_W = Z(1 - 4 \sin^2 \Theta_W) - N \approx -N$. Θ_W yra Weinbergo kampas $\sin^2 \Theta_W = 0.2312$ [30]. Z ir N yra protonų ir neutronų skaičius. Ši sąveika sumaišo skirtingo lyginu-

mo atomines būsenas su tuo pačiu kampiniu momentu. Atominė būsenos funkcija su primaišyta priešingo lyginumo funkcija galima užrašyti tokiu būdu:

$$\tilde{\Psi}(\gamma \nu IFM_F) = b_0 \Psi(\gamma \nu PIFM_F) + \sum_{r=1}^m b_r \Psi(\alpha_r \nu(-P)IFM_F). \quad (2.3)$$

Pasitelkus Vignerio ir Ekarto teoremą ir Rakaho algebrą silpnosios sąveikos nario neišlainkančio lyginumo simetrijos matricinį elementą galima išskaidyti į kampines ir radialiąsias dalis:

$$[n_a \kappa_a \| \hat{h}_W \| n_b \kappa_b] = \delta(-\kappa_a, \kappa_b) i \frac{G_F}{2\sqrt{2}} Q_W \int_0^\infty (P_b Q_a - P_a Q_b) \rho(r) dr, \quad (2.4)$$

P ir Q yra didžioji ir mažoji vienelektronės radialiosios banginės funkcijos dalys.

2.1.2 Tenzorinė-pseudotenzorinė sąveika

Silpnosios sąveikos 2.1 paskutinis narys - tenzorinė-pseudotenzorinė sąveika (tensor-pseudotensor (TPT)) - yra nelyginis P ir T atžvilgiu ir yra užrašomas taip:

$$\hat{H}_{TPT} = i\sqrt{2} G_F C_T \sum_{j=1}^M \left(\langle \sigma_A \rangle \cdot \gamma_j \right) \rho(r_j). \quad (2.5)$$

C_T - bedimensinė konstanta aprašanti sąveikos tarp elektronų ir nukleonų stiprumą $C_T \langle \sigma_A \rangle = \langle C_T^p \sum_p \sigma_p + C_T^n \sum_n \sigma_n \rangle$. Kaip matome konstanta yra suvidurkinta per nukleonų būsenas, atskirų sąveikos konstantų e-n ir e-p suma. Redukuotas viendalelinis sąveikos matricinis elementas:

$$\begin{aligned} [n_a \kappa_a \| \hat{h}_{TPT}^1 \| n_b \kappa_b] &= -\sqrt{2} G_F C_T \langle \sigma_A \rangle \times \\ &\times \left\{ [-\kappa_a \| \sigma^1 \| \kappa_b] \int_0^\infty P_b Q_a \rho(r) dr + [\kappa_a \| \sigma^1 \| -\kappa_b] \int_0^\infty P_a Q_b \rho(r) dr \right\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

viendaleliai redukuoti kampiniai matriciniai elementai pateikti disertacijoje ir [A6].

2.1.3 Pseudoskaliarinė-skaliarinė sąveika

Silpnosios sąveikos 2.1 priešpaskutinis narys - pseudoskalarinė-skaliarinė sąveika (pseudoscalar-scalar (PSS)) - taip pat yra nelyginis P ir T atžvilgiu ir šios sąveikos hamiltonianas užrašomas:

$$\hat{H}_{PSS} = \frac{-G_F C_P}{2\sqrt{2} m_p c} \sum_{j=1}^M \gamma_0 (\nabla_j \rho(r_j) \langle \sigma_A \rangle). \quad (2.7)$$

C_P – dimensijos neturinti konstanta, kuri aprašo sąveikos stiprumą $C_P < \sigma_A > = \langle C_P^p \sum_p \sigma_p + C_P^n \sum_n \sigma_n \rangle$. Redukuotas viendalelinis sąveikos matricinis elementas:

$$[n_a \kappa_a \| \hat{h}_{PSS}^1 \| n_b \kappa_b] = -\frac{G_F C_P}{2\sqrt{2}m_p c} \langle \sigma_A \rangle [\kappa_a \| C^1 \| \kappa_b] \int_0^\infty (P_a P_b - Q_a Q_b) \frac{d\rho(r)}{dr} dr. \quad (2.8)$$

2.2 Skaičiavimo metodai

Šiame disertacijos poskyryje yra aptarti daugiakonfigūracinis Dirako, Hartrio ir Foko (multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF)) ir reliatyvistinis konfigūracijų superpozicijos (relativistic configuration interaction (RCI)) metodai. Taip pat aprašyta radiacinių šuolių parametrai, hipersmulkiosios sąveikos konstantos, atominės funkcijos biortogonalios transformacija. Plačiau apie šiuos metodus galima rasti čia [31, 32, 33].

2.3 MCDHF metodo pritaikymas P -, ir P, T -nelyginėms sąveikoms nagrinėti [C1, C2]

2.3.1 Lyginumo neišlaikančių sąveikų indukuoti šuoliai

Vien-fotoninių elektrinių dipolinių (E1) šuolių tikimybės tarp atominių būsenų su sumaišytu lyginumu (a.v.) [34, 35]:

$$A = \frac{4\omega^3}{3c^3} \sum_{M_F, q} \left| \langle \tilde{\Psi}(\gamma \nu I F M_F) | \hat{Q}_q^1 | \tilde{\Psi}(\gamma' \nu I F' M_F') \rangle \right|^2, \quad (2.9)$$

Q^1 - elektrinio dipolinio šuolio operatorius.

Kai įskaitoma hipersmulkioji sąveika, surišta (branduolio ir elektronų) banginė funkcija gali būti užrašyta:

$$\Psi(\gamma \nu P J I F M_F) = \sum_{M_J M_I} \langle J I M_J M_I | J I F M_F \rangle \Psi(\gamma P J M_J) \Psi(\nu I M_I), \quad (2.10)$$

$\langle J I M_J M_I | J I F M_F \rangle$ yra Klebšo ir Gordano koeficientai.

Įskaitant nediagonalią hipersmulkiosios sąveikos dalį atomo banginė funkcija gali būti užrašyta:

$$\Psi(\gamma \nu P I F M_F) = a_0 \Psi(\gamma \nu P J I F M_F) + \sum_{l=1}^n a_l \Psi(\alpha_l \nu P J_l I F M_F). \quad (2.11)$$

Nediagonali hipersmulkioji sąveika yra pakankamai silpna, todėl dominuojančios funkcijos koeficientą a_0 galima prilyginti 1, o primaišymo koeficientą su trikdžių teorijos

pagalba užrašyti:

$$a_l = \frac{\langle \Psi (\alpha_l \nu P J_l I F M_F) | \hat{H}_{hfs} | \Psi (\gamma \nu P J I F M_F) \rangle}{E (\gamma P J) - E (\alpha_l P J_l)}, \quad (2.12)$$

\hat{H}_{hfs} yra hipermlukiosios sąveikos operatorius [36].

Įstačius išraiškas (2.11) ir (2.3) į (2.9), bei atlikus sumavimą per kampinio momento projekciją, šuolio tikimybę galima užrašyti:

$$A = \frac{4\omega^3}{3c^3} \frac{1}{2F'+1} \times \left| \sum_{l,r,l',r'} a_l^* a_l' b_r^* b_r' \langle \Psi (\gamma_r \nu P_r J_l I F) || \hat{Q}^1 || \Psi (\gamma_{l'r'} \nu P_{r'} J_{l'} I F') \rangle \right|^2. \quad (2.13)$$

Elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus redukuotas matricinis elementas:

$$\begin{aligned} \langle \Psi (\gamma_r \nu P_r J_l I F) || \hat{Q}^1 || \Psi (\gamma_{l'r'} \nu P_{r'} J_{l'} I F') \rangle &= (-1)^{I+J_l+F'+1} \delta(P_r, -P_{r'}) \sqrt{(2F+1)(2F'+1)} \\ &\times \begin{Bmatrix} J & F & I \\ F' & J_{l'} & 1 \end{Bmatrix} \langle \Psi (\gamma_r P_r J_l) || \hat{Q}^1 || \Psi (\gamma_{l'r'} (-P_r) J_{l'}) \rangle. \end{aligned} \quad (2.14)$$

2.3.2 P, T -nelyginės sąveikos ir atomo nuolatinis dipolinis momentas

Sąveikos sumaišančios skirtingo lyginumo būsenas tam tikro atominio lygmens $^{2S+1}L_J$, sukuria atominį EDM, kurią galima užrašyti tokiu būdu:

$$d_{at}^{int} = 2 \sum_i \frac{\langle 0 | \hat{D}_z | i \rangle \langle i | \hat{H}_{int} | 0 \rangle}{E_0 - E_i}, \quad (2.15)$$

čia $|0\rangle$ yra nuoroda į pagrindinę būseną $\Psi(\gamma P J M_J)$, kuri yra lyginė ir pilnas kampinis momentas $J=0$. Sumuojama per nelygines būsenas $\Psi(\gamma_i(-P) J_i M_{J_i})$, su $J_i=1$. E_0 ir E_i yra pagrindinės ir sužadintos būsenos energija. Siekiant suskaičiuoti atomo EDM, reikia surasti statinio \hat{D}_z operatoriaus ir sąveikų \hat{H}_{int} operatorių matricinius elementus. Du sąveikų operatoriai (TPT ir PSS) jau yra aptarti aukščiau.

2.3.3 Elektrinio dipolinio momento operatorius

Elektrinio dipolinio momento operatoriaus rangas $k=1$ ir redukuotas viendalelinis matricinis elementas gali būti užrašytas taip:

$$[n_a \kappa_a || \hat{d}^1 || n_b \kappa_b] = - [\kappa_a || C^1 || \kappa_b] \int_0^\infty (P_a P_b + Q_a Q_b) r dr. \quad (2.16)$$

Viendalelis kampinis redukuotas matricinis elementas užrašomas:

$$\left[\kappa_a \| C^k \| \kappa_b \right] = (-1)^{j_a+1/2} \sqrt{2j_b+1} \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \pi(l_a, l_b, k). \quad (2.17)$$

2.3.4 Elektrono elektrinis dipolinis momentas

Šioje skiltyje užrašysime ir trumpai aptarsime elektrono elektrinio dipolinio momento (eEDM) sąveikos su branduolio magnetiniu lauku operatorių [37, 38]:

$$\hat{H}_B = -id_e \sum_{j=1}^M (\boldsymbol{\gamma}_j \mathbf{B}), \quad (2.18)$$

čia d_e yra elektrono elektrinis dipolinis momentas, o \mathbf{B} branduolio magnetinis laukas. Viendalelinis redukuotas matricinis elementas:

$$\begin{aligned} \left[n_a \kappa_a \| \hat{h}_B^{el} \| n_b \kappa_b \right] = \frac{d_e \mu}{2m_p c} \left\{ -3 \left[-\kappa_a \| C^1 \| - \kappa_b \right] \int_R^\infty \frac{Q_a P_b}{r^3} dr - 3 \left[\kappa_a \| C^1 \| \kappa_b \right] \int_R^\infty \frac{P_a Q_b}{r^3} dr - \right. \\ \left. - \left[-\kappa_a \| \sigma^1 \| \kappa_b \right] \int_R^\infty \frac{Q_a P_b}{r^3} dr - \left[\kappa_a \| \sigma^1 \| - \kappa_b \right] \int_R^\infty \frac{P_a Q_b}{r^3} dr + \right. \\ \left. + 2 \left[-\kappa_a \| \sigma^1 \| \kappa_b \right] \int_0^R \frac{Q_a P_b}{R^3} dr + 2 \left[\kappa_a \| \sigma^1 \| - \kappa_b \right] \int_0^R \frac{P_a Q_b}{R^3} dr \right\}, \quad (2.19) \end{aligned}$$

R ir μ yra atitinkamai branduolio spindulys ir branduolinis magnetinis momentas.

2.3.5 Schiff momentas

Schiff momentas yra branduolio elektrinis dipolinis momentas (nuclear Schiff moment (NSM)), kuris gali būti indukuotas CP -nelyginių sąveikų tarp nukleonų [39]. Hamiltonianas gali būti užrašytas tokiu pavidalu [19, 40]:

$$\hat{H}_{SM} = \frac{3}{B} \sum_{j=1}^M (\mathbf{S} \cdot \mathbf{r}_j) \rho(r_j). \quad (2.20)$$

\mathbf{S} yra Schiff momentas, kuris yra nukreiptas išilgai branduolio sukinio \mathbf{I} ir $\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}\mathbf{I}/I$, su S Schiff momento konstanta, $B = \int_0^\infty \rho(r) r^4 dr$. Viendalelinis redukuotas matricinis elementas užrašomas taip [38]:

$$\left[n_a \kappa_a \| \hat{h}_{SM}^1 \| n_b \kappa_b \right] = \frac{3}{B} S \left[\kappa_a \| C^1 \| \kappa_b \right] \int_0^\infty (P_a P_b + Q_a Q_b) \rho(r) r dr. \quad (2.21)$$

skyrius 3

N ir Si izoelektronijų sekų jonų atominės savybės [A1, A2]

Spektroskopiniai duomenys azoto ir silicio izoelektronijų sekų (toliau sekų) yra svarbūs astrofizikoje. Pasitelkiant šių sekų šuolių linijas, yra tiriamos sąlygos Saulėje [41]-[48]. Rentgeno spinduliuotės teleskopai kosmoso observatorijose Chandra ir XMM-Newton pateikia itin aukštos kokybės emisijos ir sugerties spektrus įvairios jonizacijos geležies jonams, taip pat ir Fe XX, kurių identifikacijai yra reikalingi apskaičiuoti šuolių parametrai [49, 50, 51]. Azoto sekos duomenys naudojami branduolinės sintezės reaktorių diagnostikai. Dauguma reaktoriaus konstrukcinių komponentų turi geležies, vario ir nikelio, todėl šių elementų aptikimas plazmoje leidžia nustatyti kiekybinį ir kokybinį komponentų pažeidimą [52].

3.1 Atominės būsenos funkcijos generavimas N ir Si izoelektronijų sekų jonams

Konfigūracinių būsenų funkcijų bazė buvo išplečiama, atliekant viengubus ir dvigubus sužadinius į aktyvų rinkinį su pagrindiniu n ir orbitiniu l kvantiniais skaičiais (pateiktais 3.1 lentelėje) iš išeitinių konfigūracijų rinkinio. Pridedant vis naują virtualių orbitalių rinkinį prie jau esančio aktyvaus rinkinio, yra stebima atominių parametrų konvergencija. Iš naujų, sugeneruotų konfigūracinių būsenų funkcijų buvo paliekamos tik tos, kurios sąveikaudavo su pradiniu rinkiniu. Suderintinio lauko lygtys buvo sprendžiamos atskirai lyginėms ir nelyginėms konfigūracinėms būsenoms. Breito sąveika ir kvantinės elektrodinamikos pataisos (quantum electrodynamics (QED)) buvo įtrauktos RCI skaičiavime.

3.2 Azoto sekos jonai

3.2.1 Azoto sekos jonų energijos lygmenų ir šuolio tikimybių rezultatai

Azoto sekos jonams Cr XVIII, Fe XX, Ni XXII ir Zn XXIV yra atlikti didelės apimties tyrimai. Į šiuos tyrimus įeina 272 energijos lygmenys, E1, E2 ir M1 šuolių, hipersmulkio-

3.1 lentelė: Konfigūracinių būsenų funkcijų bazė azoto ir silicio sekų jonams.

	n ir l	Išaitinės konfigūracijos
Azoto seka	$n = 3 \dots 8$ $l = 0 \dots 5$ $n = 3 \dots 9$	$\{2s^2 2p^3, 2p^5, 2s^2 2p^2 3p, 2s 2p^3 3s, 2s 2p^3 3d, 2p^4 3p\}$ nelyginėms būsenoms $\{2s 2p^4, 2s^2 2p^2 3s, 2s^2 2p^2 3d, 2s 2p^3 3p, 2p^4 3s, 2p^4 3d\}$ lyginėms būsenoms Fe XX jonui
nuo $n = 6$ komplekso,		MCDHF skaičiavimams, sužadanimai iš $1s^2$ kamieno nebeatliekami
Silicio seka	$n = 3 \dots 7$ $l = 0 \dots 6$ $n = 3 \dots 9$	$\{3s 3p^3, 3s^2 3p 3d, 3s 3p 3d^2, 3p^3 3d, 3p 3d^3\}$ nelyginėms būsenoms $\{3s^2 3p^2, 3s^2 3d^2, 3s 3p^2 3d, 3p^2 3d^2, 3p^4\}$ lyginėms būsenoms Fe XX jonui
nuo $n = 6$ komplekso,		MCDHF ir RCI skaičiavimams, sužadanimai iš $1s^2$ kamieno nebeatliekami

sios sąveikos ir izotopinio poslinkio parametrai. Daugiau apie šiuos tyrimus galima rasti straipsnyje [A1] ir jo papildomoje medžiagoje. Santraukoje su kitų autorių rezultatais yra palyginti žemiausi Fe XX jono energijos lygmenys ir svarbių šuolių tikimybės.

3.2 lentelėje Fe XX jono energijos lygmenų rezultatai palyginti su kitų autorių gautais duomenimis. Šiame darbe pateikti rezultatai RCI , bei autorių [53] ir [54], sutampa su NIST duomenų bazėje rekomenduojamomis vertėmis vidutiniškai: 0.04%, 0.05% ir 0.04% atitinkamai.

3.2 lentelė: Stebėti energijos lygmenys E_{NIST} (cm^{-1}) ir apskaičiuoti skirtumai nuo jų Fe XX jonui.

LSJ	E	Skirtumas								
		RCI	RCI	$MRMP$	SS	$BPRM$	$CITRO$	$MBPT$	$CI+MBPT$	$MDFS$
	$[55]$		$[54]$	$[56]$	$[57]$	$[58]$	$[59]$	$[60]$	$[53]$	$[61]$
$2s^2 2p^3$										
$4S_{3/2}^o$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$2D_{3/2}^o$	138 620	167	198	5	1 978	2 283	236	432	53	262
$2D_{5/2}^o$	176 130	178	212	5	2 859	5 485	-178	-213	6	258
$2P_{1/2}^o$	260 270	263	307	1 052	-2 697	4 307	201	-1 323	366	627
$2P_{3/2}^o$	323 340	180	226	2 703	-3 463	5 214	-972	-3 299	241	567
$2s 2p^4$										
$4P_{5/2}$	752 730	-5	-60	-224	-5 629	4 677	-2 344	-2 767	420	
$4P_{3/2}$	820 630	-2	-46	-222	-7 932	3 497	-2 927	-4 303	483	
$4P_{1/2}$	842 480	12	-27	-164	-8 037	3 704	-3 057	-4 538	466	
$2D_{3/2}$	1 042 570	269	267	-104	1 707	8 055	-3 326	-4 795	32	
$2D_{5/2}$	1 058 360	230	227	-188	2 856	9 713	-2 893	-5 396	36	
$2S_{1/2}$	1 195 260	453	476	3 191	24	9 985	-3 135	-7 329	314	
$2P_{3/2}$	1 242 430	504	522	6 112	8 974	10 880	-3 222	-8 014	-9	
$2P_{1/2}$	1 340 040	476	509	-133	5 272	11 265	-3 781	-10 430	2	
$2p^5$										
$2P_{3/2}^o$	1 954 310	313	611	1 419		12 380	-5 869	-10 477	-536	
$2P_{1/2}^o$	2 061 990	308	619	1 476		14 086	-6 348	-13 195	-426	

3.3 lentelėje pateikta keletas šuolių tikimybių A ir palyginta su kitų autorių darbuose pateikiamomis vertėmis. Gerą sutapimą galima pastebėti su [54] straipsnyje pateiktomis šuolių tikimybėmis.

3.3 lentelė: Azoto sekos Fe XX jono šuolių tikimybių (s^{-1}) palyginimas. E1 šuoliai pateikti tarp aukštesnių $2s2p^4$ (A) ir žemesnių $2s^22p^3$ (Ž) konfigūracijų.

A	Ž	A_{NIST} [55]	A_{RCI}	A_{RCI} [54]	A_{MCDF} [59]	A_{BPRM} [58]	A_{MBPT} [60, 62]
$^2P_{3/2}$	$^2P_{3/2}^o$	9.40[09] ^C	9.042[09]	9.038[09]	9.36[09]		9.187[09]
$^2P_{3/2}$	$^2P_{1/2}^o$	9.1[09] ^C	8.380[09]	8.380[09]	8.64[09]		8.315[09]
$^2P_{3/2}$	$^2D_{5/2}^o$	1.0[11] ^C	9.323[10]	9.321[10]	9.74[10]		9.247[10]
$^2P_{3/2}$	$^2D_{3/2}^o$	1.47[10] ^C	1.362[10]	1.362[10]	1.47[10]		1.372[10]
$^2P_{1/2}$	$^2P_{3/2}^o$	9.6[10] ^C	8.837[10]	8.835[10]	9.20[10]	8.26[10]	8.769[10]
$^2P_{1/2}$	$^2P_{1/2}^o$	4.4[09] ^D	3.676[09]	3.677[09]	4.14[09]		3.720[09]
$^2P_{1/2}$	$^2D_{3/2}^o$	2.91[10] ^C	2.648[10]	2.648[10]	2.85[10]		2.614[10]
$^2D_{3/2}$	$^2P_{1/2}^o$	2.98[09] ^C	2.670[09]	2.668[09]	2.81[09]		2.661[09]
$^2D_{3/2}$	$^2D_{5/2}^o$	4.3[07] ^E	3.056[07]	3.036[07]	4.95[07]		2.539[07]
$^2D_{3/2}$	$^2D_{3/2}^o$	4.3[10] ^C	3.850[10]	3.849[10]	3.97[10]		3.825[10]
$^2D_{5/2}$	$^2P_{3/2}^o$	6.0[09] ^C	5.419[09]	5.416[09]	5.61[09]		5.500[09]
$^2D_{5/2}$	$^2D_{3/2}^o$	2.7[07] ^E	1.448[07]	1.446[07]	1.39[07]	1.09[07]	1.096[07]
$^2D_{5/2}$	$^2D_{5/2}^o$	3.3[10] ^C	2.932[10]	2.930[10]	3.04[10]		2.916[10]
$^4P_{1/2}$	$^4S_{3/2}^o$	2.09[10] ^C	1.877[10]	1.875[10]	1.92[10]	1.28[10]	1.852[10]
$^4P_{3/2}$	$^4S_{3/2}^o$	1.86[10] ^C	1.677[10]	1.676[10]	1.72[10]	1.37[10]	1.667[10]
$^4P_{5/2}$	$^4S_{3/2}^o$	1.3[10] ^C	1.187[10]	1.186[10]	1.22[10]	1.19[10]	1.194[10]
$^2D_{5/2}$	$^4S_{3/2}^o$		1.590[07]	1.583[07]	1.40[07]		1.602[07]
$^2D_{3/2}$	$^4S_{3/2}^o$	1.9[09] ^E	1.554[09]	1.555[09]	1.52[09]	2.87[09]	1.428[09]
$^2S_{1/2}$	$^4S_{3/2}^o$	1.9[09] ^E	1.662[09]	1.663[09]	1.69[09]	1.48[10]	1.539[09]
$^2P_{3/2}$	$^4S_{3/2}^o$	4.6[09] ^E	4.079[09]	4.082[09]	4.16[09]	8.75[09]	3.811[09]
$^2P_{1/2}$	$^4S_{3/2}^o$		1.211[08]	1.212[08]	1.32[08]		1.226[08]

C, D ir E nurodo kokio tikslumo rezultatai yra NIST duomenų bazėje: $C \leq 25\%$, $D \leq 50\%$, $E \geq 50\%$.

Likusi dalis E1, E2 ir M1 šuolių duomenų: energijos, bangos ilgiai, apsvorinti osciliatorių stiprumai, nesutapimas tarp kalibruočių dT yra pateikta [A1]. dT leistiniams šuoliams su didelėmis tikimybėmis yra apie 1%.

3.2.2 Išvados

Apskaičiuotos energijos lygmenų vertės puikiai sutampa su stebėjimų rezultatais. Penkiolikai žemiausių lygmenų energijos, lyginant su NIST duomenų bazėje rekomenduojamos vertėmis, sutapimas siekia 0.04%. Toks tikslumas leidžia suskaičiuoti šuolių bangų ilgius spektroskopiniu tikslumu $\pm 10\text{m}\text{\AA}$. Toks tikslumas gaunamas ir aukštesniems lyg-

menims. E1 šuoliams su mažesnėmis tikimybėmis, nesutapimas tarp dviejų kalibruočių vidutiniškai yra 1.9%, todėl galima teigti, kad šuolių tikimybės yra tikslios ir gali būti naudojamos kaip atraminiai dydžiai. Apibendrinant galima teigti, kad azoto sekos jonų atominiai parametrai buvo papildyti labai tiksliais duomenimis.

3.3 Silicio sekos jonai

3.3.1 Energijos rezultatai

Silicio sekos jonams: Ti IX - Ge XIX, Sr XXV, Zr XXVII ir Mo XXIX atliktas $3s^23p^2$, $3s3p^3$ ir $3s^23p3d$ konfigūracijų energijos spektro ir šuolių parametrų tyrimas. Daugiau apie šiuos tyrimus galima rasti straipsnyje [A2] ir jo papildomoje medžiagoje.

Sutapimas tarp stebėtų energijos verčių ir apskaičiuotų yra puikus. Šiame darbe apskaičiuotų ir gautų MR-MP metodu [64] energijos lygmenų tikslumas yra spektroskopinis, todėl duomenys gali būti naudojami spektro identifikavimui. Kai kuriems jonams nesutapimas tarp apskaičiuotų ir stebėtų verčių siekia iki tūkstančio cm^{-1} . Tikėtina, kad lygmenys NIST duomenų bazėje buvo neteisingai identifikuoti. Reikėtų atkreipti dėmesį, kad būsenų su didelėmis ir mažomis sukinio vertėmis energijos yra nesubalansuotos ir tai išlieka visoje izoelektronėje sekoje.

3.3.2 Gyvavimo trukmės ir šuolių tikimybės

Lygmenų energijų tikslumas gali būti patvirtintas lyginant su eksperimente išmatuotomis vertėmis. Situacija su šuolių parametrais yra visiškai kitokia. Eksperimentiniai duomenys atskiriems šuoliams nėra pateikiami, tik kelių būsenų gyvavimo trukmės. Be to šios gyvavimo trukmės pateikiamos su nemažomis paklaidomis. Apskaičiuotos šuolių tikimybės pasižymi gana didele sklaida.

3.4 lentelė: $3s^23p3d \ ^3F_2^o$ ir $3s^23p3d \ ^3F_3^o$ būsenų gyvavimo trukmių (ns) ilgio (i) ir greičio (g) formose palyginimas su vertėmis gautomis MCDHF [63], MR-MP [64] metodais ir eksperimentinėmis vertėmis [65].

	MCDHF		MR-MP		RCI	Eksp	
	$3s^23p3d \ ^3F_2^o$						
	(i)	(g)	(i)	(g)	(i)	(g)	
$Z = 26$	1.94	1.91	2.01	2.01	1.69	1.67	
$Z = 27$	1.29	1.19	1.37	1.35	1.19	1.18	
$Z = 28$	0.92	0.85	0.98	0.97	0.85	0.84	
$Z = 29$	0.67	0.62	0.71	0.71	0.63	0.62	
	$3s^23p3d \ ^3F_3^o$						
$Z = 26$	3.29	3.32	3.37	3.38	2.91	2.93	3.0 ± 0.2
$Z = 27$	2.18	1.87	2.34	2.30	2.04	2.05	1.8 ± 0.2
$Z = 28$	1.55	1.32	1.67	1.63	1.46	1.47	1.45 ± 0.08
$Z = 29$	1.13	0.96	1.21	1.18	1.06	1.07	1.01 ± 0.05

3.5 lentelė: Linijų atsirandančių EIS Shorter spektrografe tarp $3s^23p3d$ ir $3s^23p^2$ konfigūracijų Fe XII jonui bangų ilgiai ir šuolių tikimybės. λ_{eks} (Å) bangų ilgiai stebėti EIS, λ_{RCI} šiame darbe apskaičiuoti. Šiame darbe apskaičiuotos šuolių tikimybės A_{RCI} (s^{-1}), palygintos su pateiktomis vertėmis CHIANTI ir NIST duomenų bazėse $A_{CHI}(s^{-1})$ ir $A_{NIST}(s^{-1})$ ir kitų autorių darbuose: $A_{AK}(s^{-1})$, $A_K(s^{-1})$. Santykinis skirtumas tarp A ilgio ir greičio formose yra tarp 0.1 ir 0.3%.

Šuoliai	λ_{eks} [66]	λ_{RCI}	A_{RCI}	A_{CHI} [67]	A_{AK} [68]	A_K [43]	A_{NIST} [55]
$^1F_3^o - ^1D_2$	196.52	196.39	6.675[10]	6.862[10]	8.275[10]	7.3908[10]	6.80[10]
$^3D_2^o - ^3P_1$	200.02	199.95	2.300[10]	2.368[10]	2.761[10]	2.9279[10]	
$^3P_1^o - ^3P_0$	202.04	201.98	4.548[10]	4.643[10]	5.100[10]	4.5491[10]	
$^3P_0^o - ^3P_1$	203.17	203.09	4.515[10]	4.712[10]	5.586[10]	1.6005[10]	
$^3D_3^o - ^3P_2$	203.83	203.77	6.276[10]	6.475[10]	7.948[10]	6.9486[10]	6.50[10]
$^3D_2^o - ^3P_2$	203.79	203.73	3.320[10]	3.361[10]	3.566[10]	3.5499[10]	
$^1D_2^o - ^3P_1$	204.26	204.17	1.975[10]	2.015[10]	1.540[9]	4.9464[10]	
$^3D_1^o - ^3P_2$	204.94	204.87	1.259[10]	1.276[10]	1.392[10]	1.1984[10]	
$^3P_2^o - ^3P_1$	209.62	209.53	1.766[10]	1.852[10]	3.252[10]	2.1115[10]	
$^3P_1^o - ^3P_2$	209.92	209.84	6.513[9]	7.227[9]	1.079[10]	9.3164[9]	

Sužadintų būsenų gyvavimo trukmės nustatytos pagal E1 (ilgio ir greičio formose) ir M1 šuolių tikimybės. E2 ir aukštesnių multipolių įtaka gyvavimo trukmėms yra nedidelė todėl buvo neįtraukta į tyrimą. Nesutapimas tikimybių greičio ir ilgio formoje yra mažesnis nei 0.9%.

3.4 lentelėje yra palygintos $3s^23p3d$ $^3F_2^o$ ir $3s^23p3d$ $^3F_3^o$ būsenų gyvavimo trukmės Fe XIII jonui su MCDHF [63], MR-MP [64] metodais gautomis, bei eksperimentinėmis vertėmis [65]. Šiame darbe gautos gyvavimo trukmės yra trumpesnės nei kituose metoduose, bet geriau sutampa su eksperimentu. Diagnostikoje svarbios Fe XIII jono šuolių tikimybės, stebimos EIS Shorter spektrografe pateiktos 3.5 lentelėje. Tikimybių sklaida yra nemaža, tačiau sutapimas sąlyginai geras su CHIANTI v5.2 [67] duomenų bazėje pateiktomis vertėmis. Ši lentelė yra analogiška [44] straipsnio 1 lentelei.

3.3.3 Išvados

Buvo atlikti energijos spektro, šuolių parametų ir lygmenų gyvavimo trukmės skaičiavimai $3s^23p^2$, $3s3p^3$ ir $3s^23p3d$ konfigūracijoms silicio sekos jonams Ti IX - Ge XIX, Sr XXV, Zr XXVII ir Mo XXIX, naudojant MCDHF ir RCI metodus. Energijos iš RCI skaičiavimų puikiai sutampa su stebėtomis vertėmis. Suskaičiuoti bangų ilgiai yra beveik spektroskopinio tikslumo. Nesutapimas tarp šuolių tikimybių ilgio ir greičio formose dT stipriausiems šuoliams yra mažiau nei 1%. Silpniesiems šis nesutapimas sudaro nuo kelių procentų iki 10%. Dėl aukščiau paminėtų priežasčių, galima teigti, kad šuolių tikimybės yra labai aukšto tikslumo ir gali būti naudojamos kaip atraminės.

skyrius 4

Er³⁺ energijos spektras [A3, A4]

Kristalinė medžiaga Er₂O₃ pasižymi puikia elektros izoliacija, cheminiu stabilumu agresyvaus šaldymo skysčio aplinkoje, todėl planuojama ja padengti sintezės reaktoriaus sienelės [69]. Dėl tikėtinos neutronų pažeidos, buvo pasiūlyti Er³⁺ jono pagrindinės būsenos Er₂O₃ kristale liuminescenciniai matavimai, kurie leistų nustatyti kristale atsiradusius pažeidimus [70], tačiau netgi laisvo Er³⁺ jono (bei kitų lantanidų ir aktinidų, ir jų jonų) energijos spektras yra mažai žinomas.

Keletas autorių [71] - [74] pateikia pusiau empiriniais metodais gautus energijos lygmenis pagrindinei konfigūracijai. Vienuolikai energijos lygmenų yra atliktas eksperimentas [75]. Šuolių parametrų duomenų nėra. Pagrindinis šio darbo tikslas išnagrinėti Er³⁺ jono pagrindinės konfigūracijos [Xe]4f¹¹ energijos spektrą ir šuolių parametrus. Santraukoje pateikiamas tik dvylikos žemiausių energijos lygmenų palyginimas. Pilną pagrindinės konfigūracijos energijos spektrą ir stipriausių šuolių parametrus galima rasti disertacijoje.

4.1 Konfigūracinių būsenų funkcijų bazė

Energijos spektrui apskaičiuoti disertacijoje buvo nagrinėtos 5 koreliacijų įskaitymo strategijos. Čia paminėsime tik SD V+C+CV strategiją. Konfigūracinių būsenų funkcijų bazė buvo sugeneruota, atliekant viengubus ir dvigubus (single double (SD)) sužadinius iš pagrindinės konfigūracijos kamieno ir valentinių sluoksnių į aktyvų rinkinį, apibrėžtą pagrindiniu kvantiniu skaičiumi $n = 5, 6$ ir orbitiniu kvantiniu skaičiumi $l = s, p, d, f, g, h$. Dvigubi sužadiniai buvo apriboti: vienas sužadimas buvo atliekamas iš kamieno, kitas iš valentinio sluoksnio, tokiu būdu įtraukiant valentines, kamieno ir kamieno-valentines koreliacijas (valence+core+core-valence (V+C+CV)). Valentiniu sluoksniu šiuo atveju buvo laikomas tik 4f sluoksnis, nepaisant to, kad 5s ir 5p turi panašią energiją. Breito sąveika ir kvantinės elektrodinamikos pataisos buvo įtrauktos RCI skaičiavimuose.

4.1 lentelė: Suskaičiuotų (Teor) Er^{3+} energijos (cm^{-1}) lygmenų verčių palyginimas su pusiau empiriniais metodais (PE) ir eksperimentu (Eksp). Santykinė paklaida lyginant su NIST duomenimis yra pateikta paskutiniame stulpelyje (Pak).

LSJ	Teor	PE				Eksp [75]	NIST [55]	Pak (%)
		[71]	[72]	[74]	[73]			
$4I_{15/2}^1$	0	0	0	0	0	0	0	
$4I_{13/2}^1$	6311	6540	6502	6405	6511	6485	6480	2.6
$4I_{11/2}^1$	10165	10123	10125	10022	10043	10123	10110	0.5
$4I_{9/2}^1$	12841	12328	12340	12241	12003	12345	12350	4.0
$4F_{9/2}^1$	16425	15266	15181	15076	14913	15182	15180	8.2
$4S_{3/2}^1$	20089	18433	18427	18320	18018	18299	18290	9.8
$2H_{11/2}^2$	20748	19166	19284	19175	18851	19010		
$4F_{7/2}^1$	21835	20524	20327	20123	20034	20494	20400	7.0
$4F_{5/2}^1$	23647	22065	21990	21870	21713	22181	22070	7.1
$4F_{3/2}^1$	24074	22477	22344	22227	21978	22453	22410	7.4
$2G_{9/2}^1$	25987	24539	24537	24322	23874	24475		
$4G_{11/2}^1$	28291	26615	26447	26327	25929	26376		

4.2 Energijos spektro struktūra

Er^{3+} jono energijos spektras nėra detaliam išnagrinėtas. Kiek yra žinoma, nėra publikacijų, kuriose spektras nagrinėtas *ab initio* metodu.

Palyginimas dvylikos žemiausių energijos lygmenų su pusiau empiriniais metodais, eksperimentu ir NIST duomenų bazės rekomenduojamomis vertėmis, pateiktas 4.1 lentelėje. Remiantis šaltiniu [76], lygmenų žymėjimas pateiktas $(2S+1)L_J^{Nr}$ formoje. Ankstesnių autorių [71, 72, 73] $2G_{9/2}^1$ lygmuo buvo identifikuotas kaip - $2H_{9/2}$. Lygmenys pateikti lentelėje (Teor) yra apskaičiuoti remiantis SD V+C+CV koreliacijų įskaitymo strategija, kai sužadainimai atliekami iš visų $n = 5, 4, 3$ kamieno sluoksnių ($5^*4^*3^*$), o aktyvus rinkinys yra išplėstas iki $n = 6$.

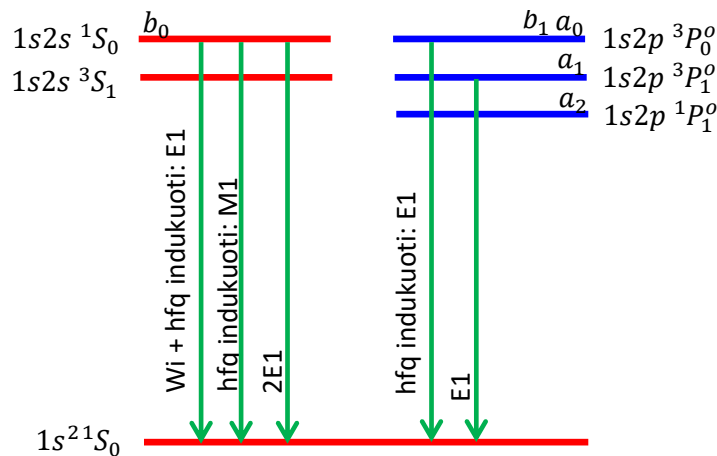
4.3 Išvados

MCDHF ir RCI metodai buvo panaudoti siekiant apskaičiuoti energijos spektrą, E2 ir M1 šuolių tikimybes, linijų stiprumus ir apsvorintus osciliatorių stiprumus tarp pagrindinės konfigūracijos $[\text{Xe}]4f^{11}$ būsenų. Analizė parodė, kad energijos lygmenų vertės sukonverguoja, kai kamienas yra atidarytas iki $5^*4^*3^*$ ir įskaitytos SD V+C+CV koreliacijos. Lyginant darbe *ab initio* būdu rastus energijos lygmenis su NIST duomenų bazės rekomenduojamomis vertėmis pasiektas 9.8% santykinis tikslumas. Atominės būsenos funkcijos sudėtis parodė, kad Er^{3+} jono lygmenų identifikavimui labiau tinkamas LS ryšys nei jj .

skyrius 5

Lyginumo neišsilaikymas helio izoelektronėje sekoje [A5]

Silpnosios sąveikos efektams atomo fizikoje nagrinėti buvo pasirinkta helio seka, dėl savo nesudėtingos elektronų konfigūracijos. Žemiau pateikta (5.1 pav.) energijos lygmenų ir šuolių schema helio sekos jonams. Vienfotonis $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ E1 šuolis yra nagri-



5.1 pav.: Helio jonų energijos lygmenų ir šuolių schema.

nėjamas kaip kandidatas lyginumo neišsilaikymo eksperimentui GSI [77]. Lygmuo gali suirti, vykstant skirtingiems šuoliams (pav. 5.1). $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ E1 šuolis vyksta, kai silpnoji sąveika tarp elektronų ir branduolio sumaišo priešingo lyginumo būsenas ($1s2s\ ^1S_0$ ir $1s2p\ ^3P_0^o$). Savo ruožtu į $1s2p\ ^3P_0^o$ būseną prisimaišo $1s2p\ ^3P_1^o$ ir $1s2p\ ^1P_1^o$ būsenos dėl nediagonaliosios hipersmulkiosios sąveikos. Antrame procese būsenos $1s2s\ ^1S_0$ ir $1s2s\ ^3S_1$ maišosi dėl nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos ir atidaro M1 šuolį tarp būsenų $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$. Šis šuolis yra tirtas Li *ir kt.* [78]. Trečias dominuojantis suirimo kanalas yra dvifotonis šuolis $2E1\ 1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$. Šio šuolio savybės buvo tyrinėtos darbe [79]. Taip pat vyksta E1 šuolis dėl nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos. E1 šuolio linijos stipris buvo skaičiuotas, siekiant įvertinti tikslumą.

5.1 Helio izolektronės sekos atominės būsenos funkcijos išplėtimas

Funkcionalas banginei funkcijai optimizuoti buvo parinktas EOL formos. Virtualios orbitalės su orbitine simetrija s , p , d , f ir g buvo generuotos atliekant viengubus ir dvigubus sužadinius iš $1s$ sluoksnio. Aktyvus rinkinys buvo didintas iki orbitalių su $n = 6$ jonams su branduolio krūviu $Z = 6-61$ ir iki $n = 5$ jonams su $Z = 62-92$.

5.1 lentelė: Nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos matriciniai elementai $\langle |\hat{h}_{hfs}| \rangle_1$ (a.v.) ir maišymosi koeficientai (a_1 and a'_1) atsirandantys dėl nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos helio izoelektronės sekos jonams. a'_1 vertėms suskaičiuoti buvo panaudotos $E(1s2p\ ^3P_0^o)$ ir $E(1s2p\ ^3P_1^o)$ vertės iš [80, 81]. Silpnosios sąveikos operatoriaus matriciniai elementai $\langle |\hat{H}_W| \rangle$ ($i\frac{G_F}{2\sqrt{2}}Q_W$ a.v.), maišymosi koeficientai (b_1 ir b'_1), atsirandantys dėl silpnosios sąveikos. Vertėms b'_1 suskaičiuoti buvo panaudotos energijos $E(1s2s\ ^1S_0)$ ir $E(1s2p\ ^3P_0^o)$ iš publikacijų [80, 81].

$\frac{A}{Z}X$	$\langle \hat{h}_{hfs} \rangle_1$	Maišymosi koeficientai		$\langle \hat{H}_W \rangle$	Maišymosi koeficientai		
		a_1	a'_1 [81]		b_1/i	b'_1/i [80]	b'_1/i [81]
$^{13}_6C$	3.9931[-6]	0.68257[-1]	0.70176[-1] [†]	-1.0652[-1]	-0.79193[-11]	-0.72709[-11]	
$^{19}_9F$	5.0943[-5]	-0.73246[-1]	-0.73905[-1] [†]	-6.4268[-1]	0.28717[-11]	0.31168[-11]	
$^{29}_{14}Si$	-4.2065[-5]	0.51889[-2]	0.51959[-2]	-4.3718	0.10812[-10]	0.10838[-10]	0.10840[-10]
$^{47}_{22}Ti$	-1.7482[-4]	0.36554[-2]	0.36607[-2]	-3.1642 [1]	0.75766[-10]	0.75711[-10]	0.75772[-10]
$^{57}_{26}Fe$	5.0963[-5]	-0.68638[-3]	-0.68734[-3]	-6.7191 [1]	0.16964 [-9]	0.16915 [-9]	0.16944 [-9]
$^{71}_{31}Ga$	1.9132[-3]	-0.19709[-1]	-0.19735[-1]	-1.5201 [2]	0.42552 [-9]		0.42404 [-9]
$^{85}_{37}Rb$	1.6521[-3]	-0.17996[-1]	-0.18021[-1]	-3.5815 [2]	0.11571 [-8]		0.11497 [-8]
$^{97}_{42}Mo$	-1.7306[-3]	0.34071[-1]	0.34128[-1]	-6.8249 [2]	0.25753 [-8]	0.25154 [-8]	0.25463 [-8]
$^{103}_{45}Rh$	-3.0208[-3]	0.39394	0.39577	-9.8340 [2]	0.41033 [-8]		0.40403 [-8]
$^{117}_{50}Sn$	-4.8927[-3]	-0.49441[-1]	-0.49477[-1]	-1.7559 [3]	0.99788 [-8]	0.94384 [-8]	0.97361 [-8]
$^{131}_{54}Xe$	3.2932[-3]	0.15025[-1]	0.15037[-1]	-2.7352 [3]	0.22861 [-7]	0.20836 [-7]	0.22047 [-7]
$^{145}_{61}Pm$	2.5713[-2]	0.49751[-1]	0.49792[-1]	-5.7936 [3]	0.18088 [-6]		0.15324 [-6]
$^{149}_{62}Sm$	-4.5978[-3]	-0.80723[-2]	-0.80787[-2]	-6.4288 [3]	0.35220 [-6]	0.18356 [-6]	0.25042 [-6]
$^{151}_{63}Eu$	2.6481[-2]	0.42363[-1]	0.42438[-1]	-7.1369 [3]	0.15427 [-5]	0.31767 [-6]	0.56727 [-6]
$^{151}_{63}Eu$ [82]			-0.424[-1]			0.33 [-6]	
$^{153}_{64}Gd$	-2.2708[-3]	-0.33223[-2]	-0.33247[-2]	-7.9123 [3]	-0.93326 [-6]	0.85603 [-6]	-0.36479 [-4]
$^{155}_{64}Gd$ [82]			0.335[-2]			0.91 [-6]	
$^{159}_{65}Tb$	1.8855[-2]	0.25311[-1]	0.25328[-1]	-8.7684 [3]	-0.41622 [-6]		-0.52707 [-6]
$^{175}_{71}Lu$	2.5881[-2]	0.21896[-1]	0.21913[-1]	-1.6195 [4]	-0.17641 [-6]		-0.19130 [-6]
$^{193}_{77}Ir$	3.0154[-3]	0.17182[-2]	0.17189[-2]	-2.9673 [4]	-0.20660 [-6]		-0.20689 [-6]
$^{229}_{90}Th$	1.5746[-2]	0.43361[-2]	0.43334[-2]	-1.1064 [5]	-0.70008 [-5]	0.32846 [-4]	-0.51283 [-5]
$^{231}_{91}Pa$	7.9272[-2]	0.20739[-1]	0.20721[-1]	-1.2262 [5]	0.52550 [-5]		0.11262 [-4]
$^{235}_{92}U$	-1.3896[-2]	-0.34557[-2]	-0.34524[-2]	-1.3575 [5]	0.18517 [-5]	0.14965 [-5]	0.15020 [-5]

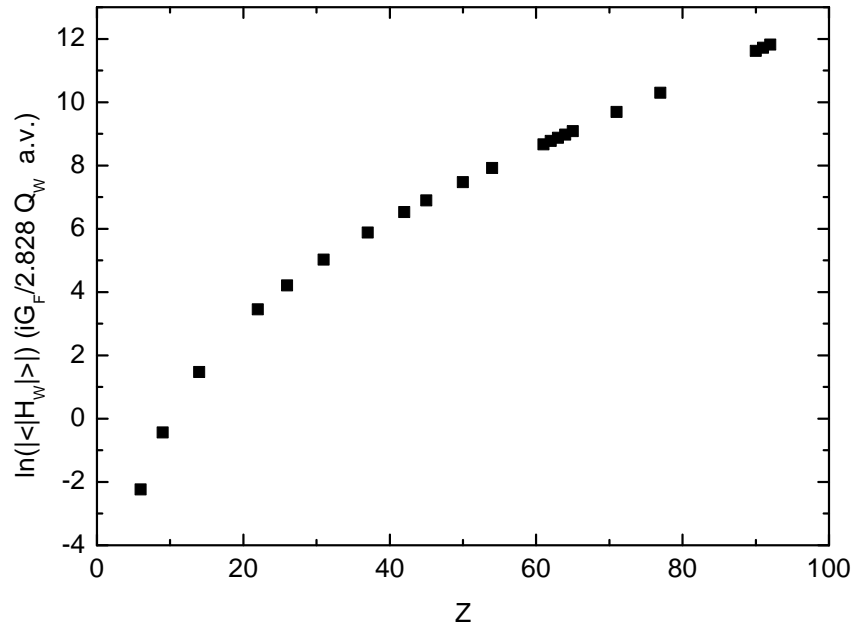
[†] Šiems atvejams suskaičiuoti maišymosi koeficientus buvo panaudotos energijos vertės $E(1s2p\ ^3P_0^o)$ ir $E(1s2p\ ^3P_1^o)$ iš publikacijos [80].

5.2 Energijos lygmenų konvergencija ir šuolių parametrai

Disertacijoje yra pateikiama ^{13}C ir $^{149}_{62}\text{Sm}$ elementų energijos lygmenų konvergencija, didinant virtualių orbitalių rinkinį, ir palyginama su kitų autorių darbais. Taip pat aptariama QED efektų įtaka šuolių energijai ir lygmenų išsidėstymui spektre. Santraukoje pateikiami hipermulkiosios ir silpnosios sąveikų matriciniai elementai, bei dėl šių sąveikų atsirandantys, atominių funkcijų maišymosi koeficientai (a_1 ir b_1/i atitinkamai).

Maišymosi koeficientai jonams $^{151}_{63}\text{Eu}$ ir $^{155}_{64}\text{Gd}$ sutampa su autorių [82] pateiktomis vertėmis: -4.24[-2] ir 3.35[-3] atitinkamai. Ženklas skiriasi dėl skirtingai apibrėžiamo fazinio daugiklio hipersmulkiosios sąveikos matriciniame elemente. Suskaičiuotos silpnosios sąveikos matriciniai elementai ir atitinkamai maišymosi koeficientai (b_1/i) yra pateikti 5.1 lentelėje. Dėl QED efektų svarbos sunkiems jonams [83], šuolių energijos yra paimtos iš autorių Plante *ir kt.* [80] ir Artemyev *ir kt.* [81]. Pirmasis autorius įskaičiuoja QED efektus $(Z\alpha)^3$ eilės, bei kai kuriuos narius $(Z\alpha)^4$ eilės, antrasis įskaito visus narius iki $(Z\alpha)^4$ eilės.

Maišymosi koeficientų b'_1/i [80] vertės 0.31767[-6] ir 0.85603[-6] jonams $^{151}_{63}\text{Eu}$ ir $^{155}_{64}\text{Gd}$ atitinkamai, buvo suskaičiuotos su tomis pačiomis energijomis kaip ir publikacijose [82, 80]. Panaudojus šias energijas yra geras sutapimas su vertėmis 0.33[-6] ir 0.91[-6] pateiktomis [82]. Tai rodo, kad suskaičiuoti matriciniai elementai sutampa su šiame darbe pateiktomis vertėmis. Tačiau, panaudojus tikslesnes energijas [81], atsiranda skirtumas tarp b'_1/i ir pateiktų [82].



5.2 pav.: Silpnosios sąveikos matricinių elementų priklausomybė nuo atominio skaičiaus Z.

5.2 paveikslėlyje pateikta silpnosios sąveikos matricinių elementų priklausomybė nuo branduolio krūvio Z . Kreivės analizė parodė priklausomybę nuo atominio skaičiaus:

$$\langle |\hat{H}_W| \rangle = [-1.2313(1) \cdot e^{0.1011(1) \cdot Z} + 1.02(2)] \cdot 10^6. \quad (5.1)$$

5.2 lentelėje yra palygintos E1 $1s2s \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$ šuolių, atsirandančių dėl silpnosios sąveikos ir nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos, tikimybės ($A_{(W_i+hfq)E1}$) su kitų gali- mų šuolių: hipersmulkiosios sąveikos indukuotais magnetiniais dipoliniais M1 ($A_{(hfq)M1}$), dvi-fotoniniais elektriniais dipoliniais 2E1 (A_{2E1}).

5.2 lentelė: $1s2s \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$ šuolio tikimybių (s^{-1}) palyginimas: hipersmulkiosios sąveikos indukuoto M1 ($A_{(hfq)M1}$), silpnosios ir hipersmulkiosios sąveikos E1 ($A_{(W_i+hfq)E1}$), dvifotonio 2E1 (A_{2E1}). Skaičiuojant E1 ($A_{(W_i+hfq)E1}$) šuolio tikimybes šuolio energijos buvo paimtos iš šių šaltinių [80, 81].

$\frac{A}{Z}X$	$A_{(hfq)M1}$ [78]	$A_{(W_i+hfq)E1}$	A_{2E1} [79]	$\frac{A}{Z}X$	$A_{(hfq)M1}$ [78]	$A_{(W_i+hfq)E1}$	A_{2E1} [79]
$^{13}_6C$	2.6534[-8]	0.74038[-17]	3.300[5]	$^{145}_{61}Pm$	5.1405[7] [†]	0.30374	
$^{19}_9F$	1.0863[-4]	0.98688[-16]	5.029[6]	$^{149}_{62}Sm$	1.8321[6] [†]	0.22931[-1]	
$^{29}_{14}Si$	2.4493[-4]	0.51594[-15]	8.685[7]	$^{151}_{63}Eu$	6.7643[7]	0.34753[1]	
$^{47}_{22}Ti$	1.3010	0.87039[-12]		$^{155}_{64}Gd$	5.5892[5] [†]	0.94664[2]	
$^{57}_{26}Fe$	3.8221[-1]	0.60210[-12]		$^{159}_{65}Tb$	1.4199[7] [†]	0.12444[1]	1.1013[12]
$^{71}_{31}Ga$	1.9926[3]	0.10923[-7]		$^{175}_{71}Lu$	1.4508[8]	0.17694	
$^{85}_{37}Rb$	5.5705[3]	0.19659[-6]		$^{193}_{77}Ir$	3.3463[6]	0.17985[-2]	
$^{97}_{42}Mo$	1.5643[4]	0.68307[-5]		$^{229}_{90}Th$	1.7894[8] [†]	0.13538[2]	6.439[12]
$^{103}_{45}Rh$	7.9312[4]	0.32719[-2]	1.154[11]	$^{231}_{91}Pa$	4.7512[9] [†]	0.15633[4]	
$^{117}_{50}Sn$	4.4904[5]	0.49228[-3]	2.164[11]	$^{235}_{92}U$	1.5277[8] [†]	0.80784	7.265[12]
$^{131}_{54}Xe$	3.5483[5]	0.33255[-3]	3.415[11]				

[†] Šių šuolių tikimybės buvo rastos ekstrapoliacijos būdu [78].

5.3 Išvados

Šiame darbe pateiktos silpnosios sąveikos ir nediagonalios hipersmulkiosios sąveikos indukuotų šuolių E1 $1s2s \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$, tikimybės helio izoelektronės sekos jonams. Teorinis tyrimas buvo atliktas, naudojant MCDHF ir RCI metodus. Skirtingų tipų šuolių $1s2s \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$ tikimybės palygintos 5.2 lentelėje. Tikimybių vertės $^{151}_{63}Eu$ ir $^{155}_{64}Gd$ jonams skiriasi nuo prieš tai pateikusių autorių [82], dėl svarbių aukštos eilės QED efektų. Rezultatai rodo, kad $^{151}_{63}Eu$, $^{155}_{64}Gd$, $^{229}_{90}Th$ ir $^{231}_{91}Pa$ jonai helio izoelektronėje sekoje yra labiausiai tinkami eksperimentams dėl didžiausių šuolių tikimybių.

skyrius 6

Elektrinio dipolinio momento teorinis tyrimas [A6]

Elementarių dalelių ar sudėtinių sistemų [1, 13] nuolatinio elektrinio dipolinio momento (EDM) matavimas yra iššūkis ne tik eksperimentinei fizikai, tačiau ir sudėtinės sistemas nagrinėjančioms teorijoms. Sunkiuose atomuose veikiančys mechanizmai gali sukurti keliomis eilėmis didesnį EDM nei elementariose dalelėse. Šiame darbe buvo atlikti EDM skaičiavimai trims diamagnetiniams atomams ^{225}Ra , ^{199}Hg ir ^{171}Yb pagrindinėse būsenose ($[\text{Rn}]7s^2$, $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^2$ ir $[\text{Xe}]4f^{14}6s^2$ atitinkamai).

Darbe įgyvendinti keturi tikslai. Pirma, atliktas programos, skirtos skaičiuoti atomo elektrinio dipolinio momento, indukuoto P, T - nelyginių sąveikų tarp elektronų ir nukleonų (e-N) tenzorinės-pseudotenzorinės (TPT), pseudoskaliarinės-skaliarinės (PSS), branduolinio Schiff momento (NSM) sąveikos su elektronais ir elektrono elektrinio dipolinio momento (eEDM) sąveikos su branduolio magnetiniais momentais, testavimas. Antra, banginės funkcijos buvo sugeneruotos skirtingais metodais, siekiant patikrinti elektrinio dipolinio momento priklausomybę nuo skirtingų parametrų esančių GRASP2K [31] programiniame pakete. Šie metodai aptarti disertacijos 6.1, 6.2 ir 6.3 poskyriuose, o rezultatai pateikti disertacijos 6.2.1, 6.4.1 ir 6.5.1 lentelėse. Trečia, buvo sugeneruoti keli virtualių orbitalių sluoksniai kiekvienam iš trijų elementų ir stebėta elektronų koreliacijų įtaka atominiam EDM. Ketvirta, nepriklausomai gauti atomų ^{225}Ra , ^{199}Hg ir ^{171}Yb elektrinio dipoliniai momentai pagrindinei būsenai ($J = 0$), palyginti su kitų autorių darbais.

6.1 Virtualių orbitalių rinkinys

Skaitmeninė banginė funkcija buvo apskaičiuota lyginei ir nelyginei būsenai atskirai. Spektroskopinės (užimtos) orbitalės buvo rastos Dirako, Hartrio ir Foko artinyje. Toliemesniuose žingsniuose šios orbitalės buvo užšaldytos. Virtualios (koreliacinės) orbitalės buvo generuotos keliais žingsniais. Kiekviename žingsnyje prie jau esančio virtualių orbitalių rinkinio pridedamas naujas sluoksnis virtualių orbitalių. Į *sluoksnį* įeina rinkinys virtualių orbitalių su skirtingomis kampinėmis simetrijomis. Šios orbitalės (arba

6.1 lentelė: ^{225}Ra , ^{199}Hg ir ^{171}Yb elektrinio dipolinio momento, indukuoto tenzorinės-pseudotenzorinės d^{TPT} ir pseudoskaliarinės-skaliarinės sąveikų d^{PSS} , suskaičiuoto EOL metodu, palyginimas su kitais metodais. Įtraukti 4 virtualių orbitalių sluoksniai. Eilutėje "MCDHF" yra pateikti šiame darbe atliktų tyrimų rezultatai.

Metodai	$d^{TPT} (10^{-20}C_T \langle \sigma_A \rangle e \text{ cm})$			$d^{PSS} (10^{-23}C_P \langle \sigma_A \rangle e \text{ cm})$		
	^{225}Ra	^{199}Hg	^{171}Yb	^{225}Ra	^{199}Hg	^{171}Yb
MCDHF	-20.28	-5.53	-4.24	-74.42	-19.45	-13.94
[38](DHF)	-3.5	-2.4	-0.70	-13.0	-8.7	-2.4
[84](DHF)		-2.0				
[38](CI+MBPT)	-17.6	-5.12	-3.70	-64.2	-18.4	-12.4
[38](RPA)	-16.7	-5.89	-3.37	-61.0	-20.7	-10.9
[84](RPA)		-6.0				
[85](RPA)		-6.75				
[86](CPHF)	-16.585		-3.377			
[87](CCSD)		-4.3				

sluoksnis) yra optimizuojamos vienu metu, o kituose žingsniuose užšaldomos. Visiems elementams buvo sugeneruoti keturi virtualių orbitalių sluoksniai su s, p, d, f, g simetrijomis. Virtualios orbitalės buvo sugeneruotos, atliekant viengubus ir apribotus dvigubus sužadinimus iš valentinių orbitalių ir subbrinkinio kamieno orbitalių. Apribojimas atliktas analogiškai kaip pagrindinės Er^{3+} konfigūracijos atveju, naudojant SD V+C+CV strategiją (žiūrėti 4 skyrių). Galutiniai atominio EDM rezultatai (kai buvo pridėti visi 4 sluoksniai) buvo palygintas su kitų autorių apskaičiuotomis vertėmis 6.1 ir 6.2 lentelėse.

6.2 lentelė: ^{225}Ra , ^{199}Hg ir ^{171}Yb elektrinis dipolinis momento, indukuoto branduolinio Schiff momento ir elektronų elektrinio dipolinio momento, suskaičiuoto EOL metodu, palyginimas su kitais metodais. Įtraukti 4 virtualių orbitalių sluoksniai. Eilutėje "MCDHF" yra pateikti šiame darbe atliktų tyrimų rezultatai.

Metodai	$d^{NSM} \{10^{-17}[S/(e \text{ fm}^3)] e \text{ cm}\}$			$d^{eEDM} (d_e \times 10^{-4})$		
	^{225}Ra	^{199}Hg	^{171}Yb	^{225}Ra	^{199}Hg	^{171}Yb
MCDHF	-8.63	-2.51	-2.15	-58.45	11.45	6.44
[38](DHF)	-1.8	-1.2	-0.42	-11	4.9	1.0
[88](DHF)					5.1	
[38](CI+MBPT)	-8.84	-2.63	-2.12	-55.7	10.7	5.45
[89](CI+MBPT)	-8.5	-2.8				
[38](RPA)	-8.27	-2.99	-1.95	-53.3	12.3	5.05
[88](RPA)					13	
[90](TDHF)		-2.97	-1.91			
[87](CCSD)		-5.07				

6.2 Paklaidų įvertinimas

Įvertinti paklaidą *ab initio* skaičiavimuose yra žymiai sudėtingiau, nei atlikti pačius skaičiavimus, ypač tais atvejais, kai atominės savybės, nėra tirtos tame pačiame artinyje kitiems elementams. Toliau pateikiami galimi neapibrėžtumo šaltiniai. Lyginant EDM rezultatus, kai yra įtraukti 3 ir 4 virtualių orbitalių sluoksniai, buvo įvertinta elektronų koreliacinių efektų paklaida. Ši paklaida kinta nuo 0.47% Schiff momentui Ra iki 15.77% taip pat Schiff momentui Hg.

Kaip jau buvo minėta disertacijos 6.2 poskyryje banginės funkcijos relaksacija dalinai buvo įskaityta skaičiuojant orbitalių rinkinius sužadintoms ir pagrindinei būsenai. 6.2.1 lentelė disertacijoje rodo, kad paklaida atsirandanti dėl banginės funkcijos relaksacijos yra 10%. Disertacijos 6.5 poskyryje buvo aptarta sužadintų būsenų sumavimas išraiškoje (2.15). Kadangi duomenų bazių išteklių yra riboti, buvo įtraukti lygmenys su nežinomomis sužadinimo energijomis. Šių lygmenų sužadinimo energijos buvo pakeistos jonizacijos energija arba pirmo sužadinto lygmens energija, dėl to atsirandanti paklaida neturėtų viršyti 10% Ra atveju. Tokio paties dydžio paklaidos galima tikėtis iterbio ir gyvsidabrio elementams.

Sisteminė paklaida gali atsirasti dėl to, kad į sumą nėra įskaitomi: kamieno sužadinimai, visos sužadintos būsenos ir tolydinis spektras, dvigubi, trigubi ir aukštesnės eilės sužadinimai, Breito sąveika ir QED efektai. Dėl P -nelyginės ir P,T -nelyginės operatorių singuliarios prigimties kamieno sužadinimai gali turėti didelį indėlį sumoje ir dėl to galutinis rezultatas yra mažesnis. Disertacijos 6.6 skyriuje parodyta, kad ne visų sužadintų būsenų įtraukimas duoda mažesnę paklaidą nei 2%. Tolydinis spektras yra dalinai įskaitytas į virtualių būsenų rinkinį. Šiame darbe nesumuojame per tolydinį spektrą.

Sisteminę paklaidą galima įvertinti lyginant su hipersmulkiąja sąveika. Yra gerai žinoma, kad skaičiuojant hipersmulkiąją sąveiką, dvigubi ir trigubi sužadinimai daro gan ryškia įtaką 10-20%.

6.3 Santrauka ir išvados

P,T -nelyginių sąveikų (tenzorinės-pseudotenzorinės ir pseudoskaliarinės-skaliarinės, branduolinio Schiff momento, elektronų elektrinio dipolinio momento sąveikos su branduolio magnetiniu lauku) indukuotas atominis EDM yra apskaičiuotas pagrindinei būsenai $J=0$ ^{225}Ra , ^{199}Hg ir ^{171}Yb elementams ir pateiktas 6.1 ir 6.2 lentelėse. Matriciniai elementai buvo suskaičiuoti GRASP2K [31] programinio paketo rėmuose. Vienas iš šio darbo tikslų buvo šių programų testavimas.

Rezultatai palyginti su kitų metodų duomenimis: nesuderintųjų fazių artiniu (ran-

dom phase approximation (RPA)), daugiadalelės trikdžių teorija su konfigūracijų superpozicija (many-body perturbation theory and configuration interaction technique (CI+MBPT)), susietų klasterių su viengubu ir dvigubu artiniu (coupled-cluster single-double (CCSD)), susieta ir perturbuota Hartrio ir Foko teorija (coupled-perturbed Hartree-Fock (CPHF)). Šiais metodais paprastai yra tiksliau apskaičiuojama atomų su uždalais sluoksniais savybės. Lyginant su kitais metodais [38, 84, 85, 88, 89, 90] rezultatai skiriasi ribose nuo 1.5% (Schiff momentui Ra) iki 22.1% (tenzorinei-pseudotenzorinei sąveikai Hg). Didelis skirtumas tarp verčių, kai yra įtrauktos koreliacijos, stebimas tarp šiame darbe pateiktų rezultatų ir CPHF teorijoje [86]. Skirtumai kinta ribose nuo 18% TPT Ra iki 39% TPT Hg (6.1 lentelė). Didžiausias skirtumas, lyginant su CCSD teorija [87] yra 102% 6.2 lentelė.

Šio darbo dar vienas tikslas buvo patikrinti banginių funkcijų generavimo metodus apibūdintus disertacijos 2.3 poskyryje. Konfigūracinių būsenų funkcijų bazė buvo sukurta taip, kad įskaitytų valentinius ir kamieno-valentinius koreliacinius efektus. Neblogas rezultatų sutapimas su RPA ir CI+MBPT metodais [38, 85, 90] rodo, kad yra įtraukta didžioji dalis koreliacinių efektų. Su didesniais kompiuteriniais resursais į skaičiavimus būtų galima įtraukti ir kamieno-kamieno elektronų koreliacijas, taip pat kamieninius sužadinius į sumavimą išraiškoje (2.15). Remiantis patirtimi, skaičiuojant atominius parametrus ir šiame darbe pateiktais EDM tyrimais, skaičiavimų tikslumas gali būti pagerintas dešimt kartų, atsižvelgiant į dabartinį vidutinį kvadratinį nuokrypį 25%.

d_{at}^{int} vertės buvo suskaičiuotos su teorinėmis ir eksperimentinėmis šuolių vertėmis, jei tokios vertės buvo patikimos ir/ar prieinamos (tyrimas pateiktas disertacijos 6.5 poskyryje). Atliekant šuolio energijos skaičiavimus, turėtų būti įtraukti viengubi, neapriboti dvigubi sužadiniai ir aukštesnės eilės sužadiniai. Tokie tyrimai pareikalautų žymiai didesnių kompiuterinių resursų, nei dabartiniuose tyrimuose, bet yra įmanomi su galingais kompiuteriniais spiečiais.

skyrius 7

Elektrinio dipolinio momento Z priklausomybė homologinėje sekoje [A7]

Šiame skyriuje pristatomas kopernikio elektrinio dipolinio momento (EDM) tyrimas ir jo priklausomybė nuo atominio skaičiaus Z . Buvo nagrinėtos keturios sąveikos: tenzorinė-pseudotenzorinė, pseudoskaliarinė-skaliarinė, branduolinio Schiff momento sąveika su elektronais, elektronų elektrinio dipolinio momento sąveika su branduolio magnetiniu lauku. Disertacijoje buvo parodyta, kad atomo elektrinis dipolinis momentas priklauso nuo Z pagal eksponentinį dėsnį dvyliktoje elementų grupėje.

7.1 MCDHF banginė funkcija

Dvyliktos grupės diamagnetiniams elementams: $^{69}_{30}\text{Zn}$, $^{111}_{48}\text{Cd}$, $^{199}_{80}\text{Hg}$ ir $^{285}_{112}\text{Cn}$ (taip pat $^{482}_{162}\text{Uhb}$ Dirako ir Foko artinyje) buvo suskaičiuotas EDM, remiantis panašia koreliacijų įskaitymo technika, kaip ir prieš tai esančiame 6 skyriuje. Šiuo atveju dvigubi sužadainimai buvo atliekami ne tik iš $nsnp$ bet ir iš $(n-1)dnsnp$ sluoksnių. Santraukoje pateikti rezultatai (7.1 ir 7.2 lentelės), kai yra įtraukti visi 5 orbitalių rinkiniai. Skaičiuojant elektrinio dipolinio momento stiprinimą cinkui, kadmiui ir gyvsidabriui, buvo naudojamos eksperimentinės šuolio energijos, kopernikiui - teorinės (CI+MBPT [107]).

7.1 lentelė: Zn, Cd, Hg ir Cn elektrinis dipolinis momentas, indukuotas tenzorinės-pseudotenzorinės d^{TPT} ir pseudoskaliarinės-skaliarinės sąveikų d^{PSS} . Hg duomenys palyginti su kitais metodais. Eilutėje "MCDHF" yra pateikti šiame darbe atliktų tyrimų rezultatai.

Metodai	$d^{TPT} (10^{-20}C_T \langle \sigma_A \rangle e \text{cm})$				$d^{PSS} (10^{-23}C_P \langle \sigma_A \rangle e \text{cm})$			
	Zn	Cd	Hg	Cn	Zn	Cd	Hg	Cn
MCDHF	-0.12	-0.60	-5.64	-64.98	-0.24	-1.60	-19.85	-267.78
[38](DHF)			-2.4				-8.7	
[84](DHF)			-2.0					
[38](CI+MBPT)			-5.12				-18.4	
[38](RPA)			-5.89				-20.7	
[84](RPA)			-6.0					
[85](CPHF)			-6.75					
[87](CCSD)			-4.3					

7.2 lentelė: Zn, Cd, Hg ir Cn elektrinis dipolinis momentas, indukuotas branduolinio Schiff momento ir elektronų elektrinio dipolinio momento. Hg duomenys palyginti su kitais metodais. Eilutėje "MCDHF" yra pateikti šiame darbe atliktų tyrimų rezultatai.

Metodai	$d^{NSM} \{10^{-17}[S/(e \text{fm}^3)] e \text{cm}\}$				$d^{eEDM}(d_e \times 10^{-4})$			
	Zn	Cd	Hg	Cn	Zn	Cd	Hg	Cn
MCDHF	-0.08	-0.35	-2.63	-19.71	0.11	-0.88	11.50	337.40
[38](DHF)			-1.2				4.9	
[38](CI+MBPT)			-2.63				10.7	
[38](RPA)			-2.99				12.3	
[89](CI+MBPT)			-2.8					
[90](TDHF)			-2.97					
[87](CCSD)			-5.07					
[88](RPA)							13	
[88](DHF)							5.1	

7.2 Z-priklausomybė

Atominės savybės priklauso nuo atominio skaičiaus Z įvairiais būdais, tiek izoelektronišose [91]-[94], tiek homologinėse sekose [35, 96]. Dauguma atvejų yra gautos apytikslės analitinės išraiškos [96]-[94], ir keliems atominiams dydžiams yra parodytos polinominės arba laipsninės priklausomybės nuo atominio skaičiaus Z .

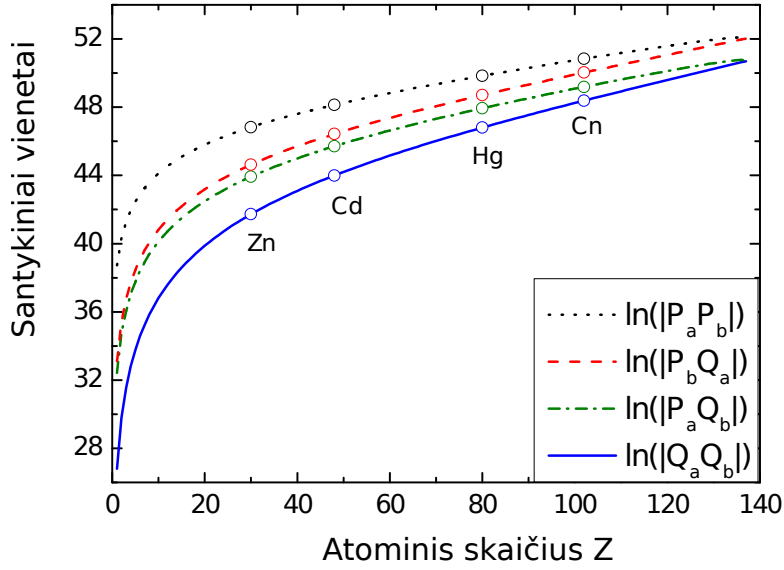
Atomino EDM indukuoto P, T -nelyginių sąveikų \hat{H}_{int} priklausomybė nuo Z išraiškoje (2.15) priklauso nuo trijų faktorių: P, T -nelyginių sąveikų \hat{H}_{int} matricinio elemento, elektrinio dipolinio momento \hat{D}_z operatoriaus matricinių elementų ir energijos vardiklio $(E_0 - E_i)$. \hat{D}_z yra apytiksliai konstanta homologinėje sekoje. Šuolio energija vardiklyje nepriklauso nuo Z homologinėje sekoje [96], išskyrus nedidelius pasikeitimus dėl sluoksnių persiskirstymo. Todėl siekiant nustatyti elektrinio dipolinio momento stiprinimo atome Z priklausomybę, yra svarbiausia nustatyti kaip priklauso \hat{H}_{int} matriciniai elementai nuo atominio skaičiaus Z .

Pasitelkus knygos [1] 8 skyriuje pateiktą analizę, didžiąją $P_{n\kappa}$ ir mažąją $Q_{n\kappa}$ radialiosios banginės funkcijos komponentes šalia branduolio galima užrašyti:

$$P_{n\kappa}(r) = \frac{\kappa}{|\kappa|} (\kappa - \gamma) \left(\frac{Z}{a_0^3 \nu^3} \right)^{1/2} \frac{2}{\Gamma(2\gamma + 1)} \left(\frac{a_0}{2Zr} \right)^{1-\gamma} \quad (7.1)$$

$$Q_{n\kappa}(r) = \frac{\kappa}{|\kappa|} (Z\alpha) \left(\frac{Z}{a_0^3 \nu^3} \right)^{1/2} \frac{2}{\Gamma(2\gamma + 1)} \left(\frac{a_0}{2Zr} \right)^{1-\gamma}, \quad (7.2)$$

κ yra kampinio momento kvantinis skaičius, $\gamma^2 = \kappa^2 - \alpha^2 Z^2$, α - smulkiosios struktūros konstanta, ν - efektyvusis kvantinis skaičius ir a_0 - Boro spindulys. Radialieji integralai,



7.1 pav.: Atominio EDM priklausomybė nuo Z . Išraiškos (7.3) dešinė pusė apskaičiuota (absoliutinė vertė) iš vienelektronių banginių funkcijų daugiklių $P_a P_b$, $Q_a Q_b$, $P_a Q_b$ ir $P_b Q_a$. Daugikliai buvo sugeneruoti panaudojus išraiškas (7.1) ir (7.2) ir suskaičiuoti ties $r = r_N$.

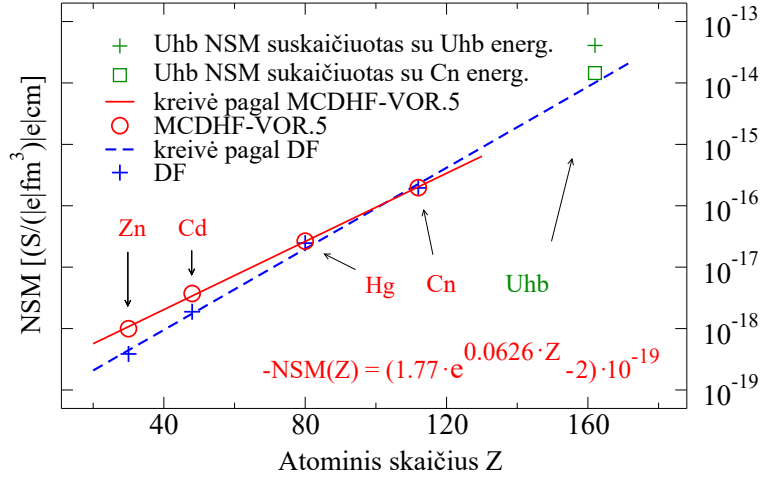
skirti suskaičiuoti matricinius elementus \hat{H}_{int} , turi tokias didžiosios $P_{n\kappa}$ ir mažosios $Q_{n\kappa}$ komponenčių kombinacijas: $(P_a P_b \pm Q_a Q_b)$ arba $(P_a Q_b \pm P_b Q_a)$. Taip pat šie integralai turi daugiklius, kurie efektyviai nutraukia integralus už branduolio ribų, tai leidžia užrašyti EDM nuo Z priklausomybę tokioje formoje:

$$d_{at} \sim \left(\frac{Z^k}{a_0^3 v^3} \right) \left(\frac{2}{\Gamma(2\gamma + 1)} \right)^2 \left(\frac{2Zr_N}{a_0} \right)^{2\gamma - 2} \quad (7.3)$$

k priklauso nuo integruojamos funkcijos formos, o r_N yra branduolio spindulys.

Visų galimų vienelektronių banginių funkcijų kombinacijų ($P_a P_b$, $Q_a Q_b$, $P_a Q_b$ ir $P_b Q_a$ pagal išraiškas (7.1) ir (7.2)) priklausomybė nuo Z pavaizduota 7.1 paveikslėlyje. Indeksas a nurodo $ns_{1/2}$ orbitale, o b - $np_{3/2}$ orbitale. Branduolio spindulys r_N suskaičiuotas naudojant $r_N = r_0 \cdot A^{1/3}$.

Esant mažoms Z vertėms, daugiklis $2/\Gamma(2\gamma + 1)$ daro mažesnę įtaką nei daugiklis Z^k . Didėjant Z daugiklis $(2Zr_N)^{2\gamma - 2}$ pradeda dominuoti. Tai galime matyti paveikslėlyje 7.1, polinominė dalis dominuoja iki $Z = 60$, tada ribose $60 < Z < 120$ $d_{at}(Z)$ funkcija yra apytiksliai eksponentinė. Ši analizė galioja centriniam Kulono laukui Dirako lygtyje. Šiame darbe skaitmeniniai sprendiniai homologinei serijai buvo rasti naudojant išplėstą branduolio modelį.



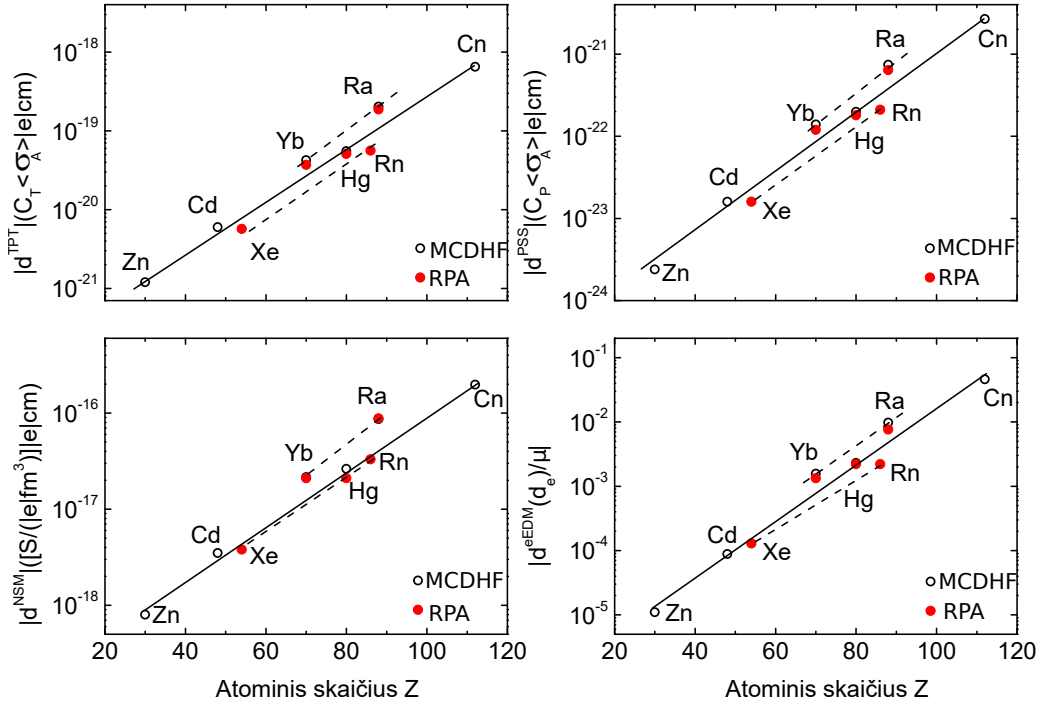
7.2 pav.: Atominio EDM (absoliutinė vertė) indukuoto NSM priklausomybė nuo atominio skaičiaus Z . Raudoni apskritimai žymi rezultatus, kai yra įskaityti visi 5 orbitalių rinkiniai, mėlyni plusai - nekoreliuotus DF rezultatus. Linijos yra aproksimacijos rezultatas. Ištinė raudona linija yra aproksimacija, kai aktyvi erdvė yra išplėsta 5 sluoksniais, punktyrinė mėlyna - nekoreliuoti DF rezultatai. Žali plusai žymi Uhb vertę, rastus su teoriškai apskaičiuota Uhb šuolio energija, žali apskritimai, kai yra panaudota Cn šuolio energija.

12 grupės elementų atominio EDM, indukuoto NSM, priklausomybė nuo atominio skaičiaus Z pateikta 7.2 paveikslėlyje kartu su aproksimacija. Atlikus aproksimaciją visiems mechanizmams gaunamos tokio EDM stiprinimo priklausomybės nuo Z išraiškos:

$$\begin{aligned}
 d^{TPT} &= [-1.22(8) \cdot e^{0.0766(6) \cdot Z} - 5(6)] \cdot 10^{-22} \\
 d^{PSS} &= [-30(1) \cdot e^{0.0813(3) \cdot Z} - 8.54(1)] \cdot 10^{-26} \\
 d^{NSM} &= [-1.77(7) \cdot e^{0.0626(3) \cdot Z} + 2(2)] \cdot 10^{-19} \\
 d^{eEDM}/\mu &= [2.74(8) \cdot e^{0.0841(2) \cdot Z} - 15(9)] \cdot 10^{-6},
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

skliausteliuose pateiktas vidutinis kvadratinis nuokrypis. Reikėtų paminėti, kad į aproksimaciją nebuvo įtraukti Uhb rezultatai, apskaičiuoti Dirako ir Foko artinyje.

Paveikslėlyje 7.3 pateikti šiame darbe suskaičiuoti EDM stiprinimo daugikliai visiems mechanizmams ir palyginti su nesuderintųjų fazių artiniu [38]. Kadangi skirtingai įtraukiami koreliaciniai efektai, yra nedideli nuokrypiai nuo pastarojo metodo Yb, Ra ir Hg elementams. Paveikslėlyje taip pat stebima panaši eksponentinė tendencija ir kitoms homologinėms sekoms (Xe, Rn) ir (Yb, Ra), nepriklausomai nuo EDM indukuojančio mechanizmo.



7.3 pav.: Atominio EDM indukuoto TPT, PSS, NSM ir eEDM sąveikų priklausomybė nuo Z . Tušti apskritimai žymi duomenis apskaičiuotus MCDHF. Raudoni apskritimai žymi nesuderintų fazių artinio duomenis [38]. Punktyrinės linijos rodo galimą eksponentinę priklausomybę.

7.6 Išvados

Šiame darbe buvo nustatyta elektrinio dipolinio momento stiprinimo daugiklio eksponentinė priklausomybė nuo atominio skaičiaus Z . Pateikti tyrimai rodo, kad Hg–Cn poroje, jautris gali padidėti 57.5/4.8, 236.9/17.0, 17.6/2.2 ir 299.7/10.0 TPT, PSS, NSM ir eEDM atitinkamai. Šiame darbe buvo nustatyta, kad EDM eksperimentai supersunkiuose elementuose, leistų padidinti dydžio eilę dešimt kartų, lyginant su sunkiais elementais (homologiniu analogu). Tokios homologinės poros galėtų būti: Yb–No, Hg–Cn, Tl–Nh, Po–Lv, At–Ts, Rn–Og¹, Fr–E119, Ra–E120. Kadangi per paskutinius 50 metų EDM eksperimentų tikslumas pagerėjo eile per kiekvieną dešimtmetį [103, 2, 104, 16, 105, 18], todėl kopernikio tyrimai galėtų būti atlikti ateityje.

¹IUPAC organizacija jau yra pasiūlusi pavadinimus šiems elementams: E113-Nh-Nihonium, E117-Ts-Tennessi ir E118-Og-Oganesson.

skyrius 8

Pagrindinės išvados

Visi tyrimai buvo atlikti, naudojant daugiakonfigūracinį Dirako, Hartrio ir Foko (MCDHF) ir konfigūracijų superpozicijos metodus (RCI), kurie yra įdiegti GRASP2K programiniame pakete. Duomenys NIST atominių spektrų duomenų bazėje peržiūrėti 2016.12.27.

- Vidutinis energijų skirtumas azoto izoelektronėje sekoje (Cr XVIII, Fe XX, Ni XXII ir Zn XXIV jonams) 15-kai žemiausių energijos lygmenų, lyginant su NIST duomenų baze, yra 0.04%. Perskaičiuojant į bangų ilgius, gaunamas spektroskopinis tikslumas - ± 10 mÅ. Toks pat tikslumas gaunamas ir aukštesniems lygmenims. Nesutapimas elektrinio dipolinio šuolio tikimybių greičio ir ilgio formose žemesnėms būsenoms yra vidutiniškai 1.9%. Dėl aukščiau įvardintų priežasčių E1, E2 ir M1 tipo 39 488 šuolių duomenys gali būti naudojami kaip atraminiai.
- Silicio izoelektronės sekos jonų Ti IX – Ge XIX, Sr XXV, Zr XXVII ir Mo XXIX energijos lygmenų vertės puikiai sutampa su stebėtomis (nesutapimas siekia iki 0.03%). Bangų ilgiai yra beveik spektroskopinio tikslumo ir gali padėti spektro identifikavimui. Nesutapimas tarp dviejų šuolio formų stipriausiems šuoliams sudaro mažiau nei vieną procentą, silpnesniems nuo kelių iki 10 procentų. Dėl šių priežasčių galima teigti, kad šuolių tikimybės yra labai tikslios ir gali būti laikomos atraminėmis.
- Er³⁺ jono energijos duomenų analizė parodė, kad energijos lygmenų vertės konverguoja, kai atliekami sužaditimai iš kamieno $n = 3$ ir kai yra įtraukiamos svarbios kamieno, valentinės ir kamieno-valentinės koreliacijos. Naudojant tokią strategiją galima pasiekti 9.8% sutapimą su NIST duomenų baze.
- Dėl didžiausių silpnosios ir nediagonalios hipersmulkiosios sąveikų sukeltų šuolių tikimybių helio izoelektronėje sekoje ¹⁵¹Eu, ¹⁵⁵Gd, ²²⁹Th ir ²³¹Pa yra labiausiai tinkami eksperimentui.

- Nesutapimas elektrinio dipolinio momento, indukuoto tenzorinės-pseudotenzorinės sąveikos, lyginant su kitais metodais, kinta intervale nuo 4% iki 24%. Mažiausias nesutapimas rastas, lyginant su susietų klasterių antroje trikdžių teorijos eilėje (4% Hg), o didžiausias - atsitiktinių fazių artiniu (24% taip pat Hg).
- Elektrinio dipolinio momento vertės, indukuojamos pseudoskaliarinės-skaliarinės sąveikos santykinis skirtumas kinta nuo 4% Hg iki 22% Yb, lyginant su kitais metodais. Abiejų nesutapimo ribų atveju santykinis skirtumas buvo nustatytas lyginant su atsitiktinių fazių artiniu.
- Hg atveju, elektrinis dipolinis momentas, indukuotas branduolinio Schiff momento, sutampa su daugiadalelės trikdžių teorijos kartu su konfigūracijų superpozicijos metodu rasta verte, tačiau lyginant su atsitiktinių fazių artiniu gauname 14% nesutapimą (taip pat Hg).
- Nesutapimas elektrinio dipolinio momento, indukuoto elektrono elektrinio dipolinio momento, lyginant su kitais metodais, kinta intervale nuo 5% iki 22%. Mažiausias nesutapimas rastas, lyginant daugiadalelės trikdžių teorijos kartu su konfigūracijų superpozicijų metodais (4% Hg), o didžiausias - atsitiktinių fazių artiniu (24% Yb).
- Atomo elektrinio dipolinio momento rezultatai rodo, kad daugiakonfigūracinis Dirako, Hartrio ir Foko metodas, koreliacinių efektų įskaitymo strategija ir sukurtos programos yra tinkamos lyginimo ir laiko simetrijų neišlaikančių sąveikų nagrinėjimui atomo teorijoje.
- Darbe atlikti tyrimai rodo, kad Cn elektrinis dipolinis momentas gali padidėti, lyginant su Hg santykiu: 57.5/4.8, 236.9/17.0, 17.6/2.2, ir 299.7/10.0 tenzorinės-pseudotenzorinės, pseudoskalarinės-skalarinės sąveikų, Schiff momento ir elektrono elektrinio dipolinio momento atveju, atitinkamai.
- Atliekant elektrinio dipolinio momento eksperimentus su supersunkiaisiais elementais, būtų galima tikėtis eile didesnio signalo nei su homologiškai panašiais sunkiaisiais elementais. Tokios homologinės poros galėtų būti: Yb–No, Hg–Cn, Tl–Nh, Po–Lv, At–Ts, Rn–Og, Fr–E119, Ra–E120.

Literatūra

- [1] I. B. Khriplovich and S. K. Lamoreaux, *CP Violation Without Strangeness* (Springer, Berlin, 1997).
- [2] K. Jungmann, *Ann. Phys.* **525**, 550 (2013).
- [3] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson, *Phys. Rev.* **105**, 1413 (1957).
- [4] R. L. Garwin, L. M. Lederman, and M. Weinrich, *Phys. Rev.* **105**, 1415 (1957).
- [5] J. I. Friedman and V. L. Telegdi, *Phys. Rev. A* **106**, 1290 (1957).
- [6] J. H. Christenson, J. W. Cronin, V. L. Fitch, and R. Turlay, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 138 (1964).
- [7] A. Angelopoulos, A. Apostolakis *et al.* (CPLEAR Collaboration), *Phys. Lett. B* **444**, 43 (1998).
- [8] L. Wolfenstein, *Int. J. Mod. Phys. E* **08**, 501 (1999).
- [9] J. Bernabeu, A. Di Domenico, and P. Villanueva-Perez, *Nucl. Phys. B* **868**, 102 (2013).
- [10] J. P. Lees *et al.* (BABAR Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **109**, 211801 (2012).
- [11] N. Cabibbo, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 531 (1963).
- [12] M. S. Sozzi, *Discrete Symmetries and CP Violation. From Experiment to Theory* (OUP, Oxford, 2008).
- [13] V. A. Dzuba and V. V. Flambaum, *Int. J. Mod. Phys. E* **21**, 1230010 (2012).
- [14] C. A. Baker, D. D. Doyle, P. Geltenbor, K. Green, M. G. D. van der Grinten, P. G. Harris, P. Iaydjiev, S. N. Ivanov, D. J. R. May, J. M. Pendlebury, J. D. Richardson, D. Shiers, and K. F. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 131801 (2006).
- [15] B. C. Regan, E. D. Commins, C. J. Schmidt, and D. De Mille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 071805 (2002).
- [16] W. C. Griffith, M. D. Swallows, T. H. Loftus, M. V. Romalis, B. R. Heckel, and E.N. Fortson, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 101601 (2009).
- [17] J. J. Hudson, D. M. Kara, I. J. Smallman, B. E. Sauer, M. R. Tarbutt, and E. A. Hinds, *Nature (London)* **473**, 493 (2011).
- [18] T. A. C. J. Baron, W. C. Campbell, D. De Mille, J. M. Doyle, G. Gabrielse, Y. V. Gurevich, P. W. Hess, N. R. Hutzler, E. Kirilov, I. Kozyryev *et al.*, *Science* **343**, 269 (2014).
- [19] J. S. M. Ginges and V. V. Flambaum, *Phys. Rep.* **397**, 63 (2004).
- [20] *Advanced Series on Directions in High Energy Physics*, edited by B. L. Roberts and W. J. Marciano (World Scientific, Singapore, 2009), Vol. 20.
- [21] C. E. Wieman, D. E. Pritchard, and D. J. Wineland, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S253 (1999).
- [22] S. De, U. Dammalapati, and L. Willmann, *Phys. Rev. A* **91**, 032517 (2015).

- [23] D. J. Wineland, Rev. Mod. Phys. **85**, 1103 (2013).
- [24] A. D. Ludlow, M. M. Boyd, and J. Ye, Rev. Mod. Phys. **87**, 637 (2015).
- [25] R. H. Parker, M. R. Dietrich, M. R. Kalita, N. D. Lemke, K. G. Bailey, M. N. Bishof, J. P. Greene, R. J. Holt, W. Korsch, Z.-T. Lu, P. Mueller, T. P. O'Connor, and J. T. Singh, Phys. Rev. Lett. **114**, 233002 (2015).
- [26] B. Cheal and K. T. Flanagan, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **37**, 113101 (2010).
- [27] Y. Oganessian, J. Phys.: Conf. Ser. **337**, 012005 (2012).
- [28] V. Zagrebaev, A. Karpov, and W. Greiner, J. Phys.: Conf. Ser. **420**, 012001 (2013).
- [29] I. B. Khriplovich, *Parity Nonconservation in Atomic Phenomena* (Gordon and Breach, Philadelphia, 1991).
- [30] C. Caso, G. Conforto, A. Gurtu *et al.* (Particle Data Group), Eur. Phys. J. C **3**, 1 (1998).
- [31] P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I. P. Grant, Comput. Phys. Commun. **184**, 2197 (2013).
- [32] I.P. Grant, J. Phys. B **7**, 1458 (1974).
- [33] G. Gaigalas, S. Fritzsche, and I. P. Grant, Comput. Phys. Commun. **139**, 263 (2001).
- [34] V. Berestetskii, E. Lifshitz, and L. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics* (Pergamon Press, Oxford, U.K., New York, 1982).
- [35] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California, Berkeley, 1981).
- [36] P. Jönsson, F. A. Parpia, and C. Froese Fischer, Comput. Phys. Commun. **96**, 301 (1996).
- [37] P. G. H. Sandars, J. Phys. B **1**, 511 (1968).
- [38] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and S. G. Porsev, Phys. Rev. A **80**, 032120 (2009).
- [39] O. P. Sushkov, V. V. Flambaum and I. B. Khriplovich, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **87**, 1521 (1984).
- [40] V. V. Flambaum and J. S. M. Ginges, Phys. Rev. A **65**, 032113 (2002).
- [41] K. Wilhelm, P. Lemaire, W. Curdt *et al.*, Sol. Phys. **170**, 75 (1997).
- [42] P. Lemaire, K. Wilhelm, W. Curdt *et al.*, Sol. Phys. **170**, 105 (1997).
- [43] F. P. Keenan, D. B. Jess, K. M. Aggarwal, R. J. Thomas, J. W. Brosius, and J. M. Davila, Mon. Not. R. Astron. Soc. **376**, 205 (2007).
- [44] T. Watanabe, H. Hara, N. Yamamoto, D. Kato, H. A. Sakaue, I. Murakami, T. Kato, N. Nakamura, and P. R. Young, ApJ **692**, 1294 (2009).
- [45] G. Del Zanna, A&A **533**, A12 (2011).
- [46] N. Nakamura, E. Watanabe, H. Sakaue, D. Kato, I. Murakami, N. Yamamoto, H. Hara, and I. Watanabe, ApJ **739**, 17 (2011).
- [47] G. Del Zanna, A&A **558**, A73 (2013).
- [48] G. Del Zanna, P. Storey, and H. E. Manson, A&A **567**, A18 (2014).
- [49] R. Mewe, A. J. J. Raassen, J. J. Drake *et al.*, A&A **368**, 888 (2001).
- [50] R. Mewe, A. J. J. Raassen, J.P. Cassinelli *et al.*, A&A **398**, 203 (2003).
- [51] K. J. van der Heyden, J. A. M. Bleeker, J. S. Kaastra, and J. Vink, A&A **406**, 141

- (2003).
- [52] J. K. Lepson, P. Beiersdorfer, J. Clementson, M. F. Gu, M. Bitter, L. Roquemore, R. Kaita, P. G. Cox, and A. S. Safronova, *Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 144018 (2010).
- [53] M. F. Gu, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **156**, 105 (2005).
- [54] P. Rynkun, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Froese Fischer, *At. Data Nucl. Data Tables* **10**, 315 (2014).
- [55] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader and NIST ASD Team (2016). NIST Atomic Spectra Database (version 5.4), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [Fri Sep 30 2016]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [56] M. J. Vilkas and Y. Ishikawa, *Advances in Quantum Chemistry* **261**, 39 (2001).
- [57] A. K. Bhatia, J. F. Seely, and U. Feldman, *At. Data Nucl. Data Tables* **43**, 99 (1989).
- [58] S. N. Nahar, *A&A* **413**, 779 (2004).
- [59] V. Jonauskas, P. Bogdanovich, F. P. Keenan, M. E. Foord, R. F. Heeter, S. J. Rose, G. J. Ferland, R. Kisielius, P. A. M. van Hoof, and P. H. Norrington, *A&A* **433(2)**, 745 (2005).
- [60] G. Merkelis, M. J. Vilkas, R. Kisielius, and G. Gaigalas, *Phys. Scr.* **56**, 41 (1997).
- [61] S. Kotochigova, M. Linnik, K. P. Kirby, and N. S. Brickhouse, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **186**, 85 (2010).
- [62] G. Merkelis, I. Martinson, R. Kisielius, and M. J. Vilkas, *Phys. Scr.* **59**, 122 (1999).
- [63] C. Kohstall, S. Fritzsche, B. Fricke and W.-D. Sepp, *At. Data and Nucl. Data Tables* **70**, 63 (1998).
- [64] Y. Ishikawa and M. J. Vilkas, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 1803 (2004).
- [65] E. Träbert, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **297**, 399 (1998).
- [66] C. M. Brown, U. Feldman, J. F. Seely, and C. M. Korendyke, *ApJS* **176**, 511 (2008).
- [67] E. Landi *et al.*, *ApJS*, 763, 86 (2013). CHIANTI (version 7) <http://www.chiantidatabase.org/referencing.html> [Fri Sep 30 2016]
- [68] K. M. Aggarwal and F. P. Keenan, *A&A* **418**, 371 (2004).
- [69] S. Levchuk, H. Maier, H. Bolt, and A. Suzuki, *J. Nucl. Mater* **367**, 1033 (2007).
- [70] D. Kato, A. H. Sakaue, I. Murakami, T. Tanaka, T. Muroga, and A. Sagara, *Plasma and Fusion Res.* **7**, 2405043 (2012).
- [71] W. F. Krupke and J. B. Gruber, *J. Chem. Phys.* **39**, 1024, (1963).
- [72] W.F. Krupke and J.B. Gruber, *J. Chem. Phys.* **41**, 1225, (1964).
- [73] M. Vasile, N. Avram, P. Vlazan, I. Grozescu, and M. Miclau, *J. of Optoelectronics and Advanced Materials* **10**, 2898 (2008).
- [74] M. J. Weber, *Phys. Rev.* **157** 262, (1967).
- [75] W. J. Carter Ph.D. Thesis, Johns Hopkins University. 1966.
- [76] G. Gaigalas, Z. Rudzikas, and F. C. Fischer, *At. Data Nucl. Data Tables* **70(1)**, 1 (1998).
- [77] A. Bondarevskaya, A. Prozorov, L. Labzowsky, G. Plunien, D. Liesen, and F. Bosch,

- J. Phys.: Conf. Ser. **163**, 012012 (2008).
- [78] J. G. Li, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Z. Dong, Eur. Phys. J. D **55**, 313 (2009).
- [79] A. Derevianko and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **56**, 1288 (1997).
- [80] D. R. Plante, W. R. Johnson, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **49**, 3519 (1994).
- [81] A. Artemyev, V. Shabaev, V. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. A **71**, 062104 (2005).
- [82] L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, G. Soff, R. Marrus, and D. Liesen, Phys. Rev. A **63**, 054105 (2001).
- [83] M. Maul, A. Schäfer, W. Greiner, and P. Indelicato, Phys. Rev. A **53**, 3915 (1996).
- [84] A.-M. Mårtensson-Pendrill, Phys. Rev. Lett. **54**, 1153 (1985).
- [85] K. V. P. Latha, D. Angom, R. J. Chaudhuri, B. P. Das, and D. Mukherjee, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 035005 (2008).
- [86] K. V. P. Latha and P. R. Amjith, Phys. Rev. A **87**, 022509 (2013).
- [87] K. V. P. Latha, D. Angom, B. P. Das, and D. Mukherjee, Phys. Rev. Lett. **103**, 083001 (2009).
- [88] A.-M. Mårtensson-Pendrill and P. Öster, Phys. Scr. **36**, 444 (1987).
- [89] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, J. S. M. Ginges, and M. G. Kozlov, Phys. Rev. A **66**, 012111 (2002).
- [90] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and J. S. M. Ginges, Phys. Rev. A **76**, 034501 (2007).
- [91] C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jönsson, *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach* (Institute of Physics Publishing, London, 1997).
- [92] D. Layzer, Ann. Phys. **8**, 271 (1959).
- [93] D. Layzer, Z. Horák, M. N. Lewis, and D. P. Thompson, Ann. Phys **29**, 101 (1964).
- [94] B. Edlén, *Handbuch der Physik* (Springer, Berlin, 1964).
- [95] J. W. Rohlif, *Modern Physics from α to Z^0* (USA, Wiley, 1994).
- [96] W. L. Wiese and A. W. Weiss, Phys. Rev. **175**, 50 (1968).
- [97] I. P. Grant, *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation* (Springer, New York, 2007).
- [98] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics - Wave Equations* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1990).
- [99] W. Greiner, *Quantum Electrodynamics* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994).
- [100] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum and C. Harabati, Phys. Rev. A **84**, 052108 (2011).
- [101] P. Indelicato, J. Bieroń, and P. Jönsson, Theor. Chem. Acc. **129**, 495 (2011).
- [102] P. Pyykkö, Phys. Chem. **13**, 161 (2011).
- [103] J. M. Amini, C. T. Munger, Jr., and H. Gould, Phys. Rev. A **75**, 063416 (2007).
- [104] M. V. Romalis, W. C. Griffith, J. P. Jacobs, and E. N. Fortson, Phys. Rev. Lett. **86**, 2505 (2001).
- [105] M. D. Swallows, T. H. Loftus, W. C. Griffith, B. R. Heckel, and E. N. Fortson, Phys. Rev. A **87**, 012102 (2013).
- [106] B. G. Wybourne, J. Chem. Phys. **32**, 639 (1960).
- [107] T. H. Dinh, V. A. Dzuba, and V. V. Flambaum, Phys. Rev. A **78**, 062502 (2008).

Summary

Main goal of the study to investigate parity and time-reversal violation in atomic theory, by using multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method, and to suggest most suitable elements for atomic electric dipole moment experiments.

The doctoral dissertation consist of 8 chapters. Chapter 1 introduces research problem, actuality, scientific novelty, main goal and tasks of study, and statements for defence. Chapter 2 describes different terms of the weak interaction Hamiltonian, represented by neutral currents: parity nonconserving (P -odd) vector-pseudovector product (vector-axial vector), parity and time-reversal symmetry violating (P,T -odd) tensor-pseudotensor and pseudoscalar-scalar terms. The remaining part of chapter 2 is dedicated to description of MCDHF method and the theory of weak and hyperfine interaction induced transition probabilities, as well as Schiff and electron electric dipole moments. Five Chapters (from third up to seventh) are designed to present results of study. In Chapter 3 atomic properties for N- and Si-like isoelectronic sequences are presented. In Chapter 4 the results of calculations for energy spectrum of Er^{3+} ion ground configuration are presented. Results of weak interaction induced transitions in He-like ions are presented in Chapter 5. This term of weak interaction mixes states of opposite parity. Chapter 6 presents the analysis of the calculations performed for the electric dipole moments. Chapter 7 is the continuation of the research on electric dipole moments, but from a different perspective. The main goal of this chapter are suggestions of isotopes suitable for EDM experiments. The last chapter presents main conclusions.

Statements to defend

1. $^{151}_{63}\text{Eu}$, $^{155}_{64}\text{Gd}$, $^{229}_{90}\text{Th}$ and $^{231}_{91}\text{Pa}$ ions of He-like isoelectronic sequence are the most promising candidates for experiments of parity nonconservation effects, due to the high values of the weak and hyperfine interaction induced transition rates.
2. Electric dipole moment of an atom arising from parity and time symmetries violating tensor-pseudotensor, pseudoscalar-scalar nucleon-electron interactions, as well as nuclear Schiff moment, and electron electric dipole moment, have exponential dependence on atomic number Z .
3. Isotopes of superheavy elements No, Cn, Nh, Lv, Ts, Og, E119, and E120 with sufficiently long half-lives would be most suitable for searching for parity and time nonconservation in atomic experiments, because their EDM enhancement factors are of the order of 30 times bigger than those of currently studied systems.

Trumpos žinios apie doktorantą

Vardas pavardė	Laima Radžiūtė
Gimimo data	1985.12.25
Gyvenamoji vieta	Kareivių g. 7a, Vilnius
Elektroninis paštas	Laima.Radziute@tfai.vu.lt
Išsilavinimas:	
2004 - 2008	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, fizikos bakalauro kvalifikacinis laipsnis
2010 - 2012	Lietuvos edukologijos, Fizikos ir technologijų fakultetas fizikos magistro kvalifikacinis laipsnis
2012 - 2016	Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas doktorantūros studijos
Darbo patirtis:	
2014.09 - 2015.09	Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Atomo teorijos skyrius Jaunesnioji mokslo darbuotoja projekto Nr. VP1-3.1.-ŠMM-07-K-02-015 "Volframo jonų plazmos spektrų tyrimas"
2014.10 -	Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Atomo teorijos skyrius Jaunesnioji mokslo darbuotoja