

VILNIAUS UNIVERSITETAS
LIETUVOS EDUKOLOGIJOS UNIVERSITETAS

PAVEL RYNKUN

BIORTOGONALIŲ ORBITALIŲ METODO PLĖTOJIMAS IR TAIKYMAS
ATOMO TEORIJOJE

Daktaro disertacijos santrauka
Fiziniai mokslai, fizika (02 P)

Vilnius, 2014

Daktaro disertacija rengta 2009–2013 metais Lietuvos edukologijos universitete.

Mokslinis vadovas:

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

Konsultantas:

prof. dr. Per Jönsson (Malmės universitetas, Malmė, Švedija, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Disertacija ginama Vilniaus universiteto Fizikos mokslo krypties taryboje:

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

Nariai:

prof. habil. dr. Romualdas Karazija (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P);

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

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

dr. Jörgen Ekman (Malmės universitetas, Malmė, Švedija, fiziniai mokslai, fizika – 02 P).

Oponentai:

habil. dr. Jacek Bieroń (Jogailos universitetas, Krokuva, Lenkija, fiziniai mokslai, fizika – 02 P);

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

Disertacija bus ginama viešame Fizikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2014 m. birželio mėn. 12 d. 14 val. Teorinės fizikos ir astronomijos institute 432 kab.

Adresas: A. Goštauto g. 12, Vilnius, Lietuva.

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2014 m. gegužės mėn. 12 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus universiteto ir Lietuvos edukologijos universiteto bibliotekose.

VILNIUS UNIVERSITY
LITHUANIAN UNIVERSITY OF EDUCATIONAL SCIENCES

PAVEL RYNKUN

DEVELOPMENT OF BIORTHOGONAL ORBITAL METHOD AND ITS
APPLICATION IN ATOMIC THEORY

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

Vilnius, 2014

Doctoral dissertation was completed during 2009–2013 at Lithuanian University of Educational Sciences.

Scientific supervisor:

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

Consultant:

prof. dr. Per Jönsson (Malmö University, Malmö, Sweden, Physical sciences, Physics – 02 P).

The doctoral dissertation is defended at the Vilnius University Doctoral Dissertation Comitee in Physical Sciences:

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

Members:

prof. habil. dr. Romualdas Karazija (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P);

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

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

dr. Jörgen Ekman (Malmö University, Malmö, Sweden, Physical sciences, Physics – 02 P).

Opponents:

habil. dr. Jacek Bieroń (Jagiellonian University, Cracow, Poland, Physical sciences, Physics – 02 P);

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

The dissertation will be defended at 2 p.m. on June 12, 2014 at the Institute of Theoretical Physics and Astronomy 432 room.

Adress: A. Goštauto st. 12, Vilnius, Lithuania.

Summary of doctoral dissertation mailed on May 12, 2014.

The copies of the dissertation are exposed at the libraries of Vilnius University and Lithuanian University of Educational Sciences.

Turinys

Aprobacija.....	6
1. Įvadas	9
3. Izoelektronų sekų energijos spektrai ir šuolių tikimybės [A1-A4]	15
4. W^{24+} jono spektroskopinių savybių dėsningumai [A5]	21
5. PCFI metodo taikymai [A6-A8]	24
6. Pagrindiniai rezultatai ir išvados	29
Literatūra.....	31
Summary	35

Aprobacija

Moksliniai straipsniai susiję su disertacija:

1. **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Froese Fischer, *Energies and E1, M1, E2, M2 transition rates for states of the $2s^22p$, $2s2p^2$, and $2p^3$ configurations in boron-like ions between N III and Zn XXVI*, At. Data and Nucl. Data Tables **98**, 481 (2012).
2. P. Jönsson, **P. Rynkun**, and G. Gaigalas, *Energies, E1, M1, E2 transition rates, hyperfine structures, and Landé g_J factors for states of the $2s^22p^2$, $2s2p^3$, and $2p^4$ configurations in carbon-like ions between F IV and Ni XXIII*, At. Data and Nucl. Data Tables **97**, 648 (2011).
3. **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Froese Fischer, *Energies and E1, M1, E2, M2 transition rates for states of the $2s^22p^3$, $2s2p^4$, and $2p^5$ configurations in nitrogen-like ions between F III and Kr XXX*, At. Data and Nucl. Data Tables **100**, 315 (2014).
4. **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Froese Fischer, *Energies and E1, M1, E2, and M2 transition rates for states of the $2s^22p^4$, $2s2p^5$, and $2p^6$ configurations in oxygen-like ions between F II and Kr XXIX*, A&A **557**, A136 (2013).
5. G. Gaigalas, Z. Rudzikas, E. Gaidamauskas, **P. Rynkun**, and A. Alkauskas, *Peculiarities of spectroscopic properties of W^{24+}* , Phys. Rev. A **82**, 014502 (2010).
6. S. Verdebout, **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer, and M. Godefroid, *A partitioned correlation function interaction approach for describing electron correlation in atoms*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **46**, 085003 (2013).
7. C. Froese Fischer, S. Verdebout, M. Godefroid, **P. Rynkun**, P. Jönsson, and G. Gaigalas, *Doublet-quartet energy separation in boron: A partitioned-correlation-function-interaction method*, Phys. Rev. A **88**, 062506 (2013).

8. S. Verdebout, **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer, and M. Godefroid, *Interaction of variational localised correlation functions for atomic properties of Be I*, J. Phys.: Conf. Ser. **388**, 152006 (2012).

Kiti moksliniai straipsniai:

1. E. Gaidamauskas, C. Nazé, **P. Rynkun**, G. Gaigalas, P. Jönsson, and M. Godefroid, *Tensorial form and matrix elements of the relativistic nuclear recoil operator*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44**, 175003 (2011).
2. G. Gaigalas, Z. Rudzikas, **P. Rynkun**, and A. Alkauskas, *Dependence of the probabilities of the electric-multipole electron transitions in W^{24+} on multipolarity*, Phys. Rev. A **83**, 032509 (2011).
3. G. Gaigalas, **P. Rynkun**, A. Alkauskas, and Z. R. Rudzikas, *The energy levels, line strengths, oscillator strengths and transition probabilities for W^{24+} electric quadrupole and magnetic dipole transitions among the levels of ground configuration $[Kr]4d^{10}4f^4$* , At. Data and Nucl. Data Tables **98**, 391 (2012).

Tezės pristatytos konferencijose:

1. G. Gaigalas, Z. R. Rudzikas, E. Gaidamauskas, **P. Rynkun**, and A. Alkauskas, *Lowest 977 energy levels, E1 transition probabilities and lifetimes for W^{24+}* , International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications (ICAMDATA 7), Book of Abstracts, 21-24 September 2010, Vilnius (Lithuania) ISBN 9789955335993 p. 99.
2. S. Verdebout, M. R. Godefroid, **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, and C. Froese Fischer, *Interaction of variational localized correlation functions for atomic properties*, 43rd EGAS (European group for atomic systems) Europhysics conference abstracts, June 28 – July 2, 2011, Fribourg, Switzerland. ISBN 2-914771-67-3 p. 155.
3. **P. Rynkun**, S. Verdebout, P. Jönsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer and M. Godefroid, *On the energy difference between $1s^2 2s^2 2p^2 P^o$ and $1s^2 2s 2p^2 \ ^4P$ terms in*

Boron, 44th EGAS (European group on atomic systems) Conference, Europhysics conference abstracts, July 9 – 13, 2012, Gothenburg, Sweden. ISBN 2-914771-75-4 p. 122.

4. S. Verdebout, **P. Rynkun**, P. Jönsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer and M. Godefroid, *A Partitioned Correlation Function Approach for atomic properties*, 8th ICAMDATA (International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications) Conference, Program and abstracts, September 30 – October 4, 2012, NIST, Gaithersburg, MD, USA. p. 118.

1. Įvadas

Atominiai duomenys yra plačiai naudojami daugelyje įvairių mokslo sričių ir technologijose, pavyzdžiui, atomo spektroskopijoje, astrofizikoje, plazmos fizikoje [1]. Atominės struktūros skaičiavimai ne tik padeda eksperimentatoriams sudėtingų spektrų analizėje, bet taip pat padeda suprasti pagrindinius fizikinius procesus [2].

Per pastaruosius metus plačiai buvo tiriamas volframas (W). Šis elementas naudojamas kaip sienelių medžiaga esamuose ir planuojamuose statyti termobranduolinės sintezės reaktoriuose. Siekiant kontroliuoti volframo jonų koncentraciją termobranduolinės sintezės plazmoje reikalingos visų volframo jonų energijos spektro ir kitų charakteristikų duomenys.

Vienas iš pagrindinių uždavinių atomo struktūros skaičiavimuose – atsižvelgti į koreliacijas. Norint kuo tiksliau įskaityti koreliacinius efektus buvo išplėtota daug skirtingų metodų pvz.: daugiadalelės trikdžių teorija (many-body perturbation theory (MBPT)) [3, 4], konfigūracijų superpozicijos metodas sujungtas su daugiadalelės trikdžių teorija (combinations of configuration interaction and many-body perturbation (CI+MBPT)) [5, 6, 7], išeitinių funkcijų Möller-Plesset trikdžių (multireference Möller-Plesset perturbation (MRMP)) teorija [8, 9].

Darbe parodyta kaip pasinaudojant Malmqvist ir kt. [10, 11] pasiūlytą transformacijos techniką, galima naudoti tarpusavyje neortogonalius orbitalių rinkinius. Darbe aprašomas naujai išvystytas suskirstytų koreliacinių funkcijų sąveikos (Partitioned Correlation Function Interaction (PCFI)) metodas, taip pat jo privalumai prieš kitus metodus.

Tikslai:

- išplėtoti biortogonalinių orbitalių metodą energijų ir kitų svarbių atominių charakteristikų skaičiavimui;
- gauti tikslesnes atomines charakteristikas (energijos lygmenis, šuolių tikimybes, lygmenų gyvavimo trukmes) *ab initio* metodu.

Uždaviniai:

1. atlikti didelės apimties skaičiavimus, ortogonalinių orbitalių bazėje, B-, C-, N- ir O-izoelektronėms sekoms;
2. ištirti W^{24+} jono energijos spektro struktūrą, elektrinių dipolinių šuolių tikimybes;
3. performuluoti Breito ir Paulio operatorių matricinių elementų išraiškas, atsižvelgiant į biortogonalinių orbitalių metodo specifiką;
4. pritaikyti išplėtotą biortogonalinių orbitalių metodą energijos lygmenų, izotopinio poslinkio, hipersmulkiosios sąveikos konstantų skaičiavimams:
 - atlikti izotopinio poslinkio ir hipersmulkiosios sąveikos konstantų skaičiavimus neutraliam ličiui;
 - atlikti neutralaus boro šuolio energijos, tarp $^2P^o$ ir 4P termų, skaičiavimus;
5. įvertinti gautus rezultatus, lyginant juos su eksperimentiniais rezultatais ir kitais teoriniais skaičiavimais.

Ginamieji teiginiai:

1. Daugiakonfigūracinis Dirako, Hartrio ir Foko bei reliatyvistinis konfigūracijų superpozicijos metodai, realizuoti naujausiame GRASP2K programiniame pakete, leidžia lengviems jonams nustatyti lygmenų gyvavimo trukmės eksperimento paklaidų ribose ir gauti energijos lygmenų vertes, kurios nuo eksperimentinių rezultatų, skiriasi iki 0,1 proc.
2. Darbe W^{24+} jonui gauti rezultatai įrodo, kad naudojant į sukininių-kampinių kintamųjų integravimo metodiką, pagrįstą antrinio kvantavimo tenzoriniame pavidale formalizmu, galima efektyviau nagrinėti sudėtingas atomų ir jonų konfigūracijas ir gauti tikslesnes energijos spektro, šuolių tikimybių, gyvavimo trukmių bei kitų spektroskopinių parametrų vertes.
3. Naudojantis, biortogonalinių orbitalių pagrindu, sukurtu PCFI artiniu ir norint gauti aukšto tikslumo hipersmulkiosios struktūros konstantas ir specifinės masės poslinkį, būtina naudoti tokią PCFI modifikaciją, kurioje visos konfigūracinės būsenos funkcijos yra nesuvaržytos.

4. Darbe sukurtas PCFI artinys (su keliomis jo modifikacijomis) paremtas biortogonalinių orbitalių metodu ir, lyginant su tradiciniais daugiakonfigūraciniais artiniais, turi šiuos privalumus: i) greičiau konverguoja rezultatai; ii) leidžia gauti tikslesnes energijas, šuolių energijas, specifinės masės poslinkį ir hipersmulkiosios struktūros konstantas.

Disertacijos struktūra:

Disertacija sudaryta iš šešių skyrių. Pirmas skyrius yra įvadinis. Jame pristatomi disertacijos tikslai, uždaviniai ir ginamieji teiginiai. Antras skyrius skirtas disertacijoje naudojamiems ir kuriamiems teoriniams metodams aprašyti. Jame aprašomas naujai sukurtas suskirstytų koreliacinių funkcijų sąveikos artinys paremtas biortogonalios transformacijomis ir aprašomi, kokie pakeitimai buvo padaryti Breito ir Paulio operatorių matricinių elementų išraiškose, atsižvelgiant į biortogonalinių orbitalių metodo specifiką.

Kiti trys skyriai skirti disertacijoje gautiems rezultatams pristatyti. Kiekviename iš jų pateikiama mokslinių tyrimų apžvalga ir svarba. Taip pat šiame darbe gauti rezultatai yra lyginami su kitų autorių teoriniais ir eksperimentiniais duomenimis. Trečiame skyriuje pateikiami apskaičiuoti spektroskopiniai duomenys (tokie kaip energijos lygmenys, šuolių tikimybės, gyvavimo trukmės) boro, anglies, azoto ir deguonies izoelektronėms sekoms. Tokie duomenys reikalingi astrofizikoje, nagrinėjant vykstančius reiškinius plazmoje.

Ketvirtame skyriuje pateikiami W^{24+} jono energijos lygmenys, stipriausi elektriniai dipoliniai šuoliai, gyvavimo trukmės. Volframas naudojamas kaip sienelių medžiaga termobranduolinės sintezės reaktoriuose.

Penktame skyriuje pateikiami suskirstytų koreliacinių funkcijų sąveikos metodo taikymai ličio ir boro atomams. Neutralaus boro šuolio energijos tarp $2s^2 2p^2 P^o - 2s 2p^2 4P$ termų skaičiavimai atlikti naudojantis daugiakonfigūraciniu Hartrio ir Foko (multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF)) bei suskirstytų koreliacinių funkcijų sąveikos metodais.

Paskutiniame skyriuje pateikiamos disertacijos išvados.

2. Metodologija

Disertacijos skyriuje „Metodologija“ aprašomi visi naudojami bei vystomi metodai. Jame apžvelgiami daugiakonfigūracinis Hartrio ir Foko, daugiakonfigūracinis Dirako, Hartrio ir Foko (multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF)), reliatyvistinis konfigūracijų superpozicijos (relativistic configuration interaction (RCI)) metodai. Taip pat aprašomi kokie pakeitimai buvo padaryti Breito ir Paulio operatorių matricinių elementų išraiškose, atsižvelgiant į biortogonalinių orbitalių metodo specifiką.

Santraukoje aprašomas tik išvystytas PCFI artinys.

PCFI artinys

Atominė būsenos funkcija (atomic state function (ASF)) PCFI artinyje apibrėžiama kaip išeitinių (multireference (MR)) funkcijų ir p suskirstytų koreliacinių funkcijų (partitioned correlation function (PCF)) suma

$$|\Psi(\gamma LS^\pi)\rangle = |\Psi^{\text{MR}}(\gamma LS^\pi)\rangle + \sum_{i=1}^p \alpha_i |\Lambda_i\rangle, \quad (2.1)$$

kur γ aprašo konfigūraciją, ryšio schemą ir kitus kvantinius skaičius reikalingus aprašyti LS termą. Kiekviena iš PCF priklauso koreliacinių funkcijų rinkiniui:

$$|\Lambda\rangle = \sum_j^{\text{dim}(\Lambda)} c_j^\Lambda |\Phi_j^\Lambda\rangle. \quad (2.2)$$

Naudojamas Ψ^Λ žymėjimas funkcijai, susidedančiai iš MR funkcijos ir iš vienos koreliacinių funkcijų grupės Λ

$$|\Psi^\Lambda(\gamma LS^\pi)\rangle = \sum_{j=1}^m a_j^\Lambda |\Psi_j^{\text{MR}}(\gamma_j LS^\pi)\rangle + \sum_j^{\text{dim}(\Lambda)} c_j^\Lambda |\Phi_j^\Lambda\rangle. \quad (2.3)$$

PCFI artinyje ši funkcija yra gaunama sprendžiant MCHF lygtis, optimizuojant Λ grupės suskirstytų koreliacinių funkcijų orbitalių rinkinį ir maišymosi koeficientus.

Darant prielaidą, kad MR ir koreliacinių funkcijų rinkinių konfigūracinės būsenos funkcijos (configuration state function (CSF)) yra ortonormuotos, o taip pat $\langle \Psi^\Lambda | \Psi^\Lambda \rangle = 1$, turime

$$\langle \Psi^\Lambda | \Psi^\Lambda \rangle = \langle \Psi^{\text{MR}} | \Psi^{\text{MR}} \rangle + \langle \Lambda | \Lambda \rangle = \sum_{j=1}^m (a_j^\Lambda)^2 + \sum_j^{\text{dim}(\Lambda)} (c_j^\Lambda)^2 = 1, \quad (2.4)$$

kadangi $\langle \Lambda | \Lambda \rangle \neq 1$. Tam, kad būtų išlaikyta PCF svorių fizikinė prasmė mes renormalizuojame kiekviena PCF atsižvelgiant į

$$\bar{\Lambda} = \frac{1}{\sqrt{\sum_j (c_j^\Lambda)^2}} \Lambda. \quad (2.5)$$

PCFI artinyje visa banginė funkcija susideda iš m komponentių, priklausančių MR rinkiniui, ir p koreliacinių funkcijų grupių

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^m a_i |\Phi_i^{\text{MR}}\rangle + \sum_j^p b_j |\bar{\Lambda}_j\rangle, \quad (2.6)$$

kur maišymosi koeficientai $\{a_i\}$ ir $\{b_j\}$ yra gaunami sprendžiant ($M = m + p$) eilės tikrinių verčių lygtį

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}. \quad (2.7)$$

Hamiltoniano matrica galima užrašyti tokiu pavidalu

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \begin{array}{ccc|ccc} \langle \Phi_1^{\text{MR}} | H | \Phi_1^{\text{MR}} \rangle & \dots & \langle \Phi_1^{\text{MR}} | H | \Phi_m^{\text{MR}} \rangle & \langle \Phi_1^{\text{MR}} | H | \bar{\Lambda}_1 \rangle & & \langle \Phi_1^{\text{MR}} | H | \bar{\Lambda}_p \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle \Phi_m^{\text{MR}} | H | \Phi_1^{\text{MR}} \rangle & \dots & \langle \Phi_m^{\text{MR}} | H | \Phi_m^{\text{MR}} \rangle & \langle \Phi_m^{\text{MR}} | H | \bar{\Lambda}_1 \rangle & \dots & \langle \Phi_m^{\text{MR}} | H | \bar{\Lambda}_p \rangle \end{array} \\ \vdots & & & \langle \bar{\Lambda}_1 | H | \bar{\Lambda}_1 \rangle & \dots & \langle \bar{\Lambda}_1 | H | \bar{\Lambda}_p \rangle \\ \vdots & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \dots & \dots & \langle \bar{\Lambda}_p | H | \bar{\Lambda}_p \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Matricos dydį M apsprendžia CSF priklausančių MR rinkiniui (m) skaičius ir (p) PCF funkcijų skaičius. Persiklojimo matrica turi panašią struktūrą kaip ir (2.8).

PCFI metodo skaičiavimo schema:

1. atlikti HF/MCHF skaičiavimus MR funkcijoms $|\Psi^{\text{MR}}\rangle$;
2. užšaldyti orbitales priklausančias MR bazei ir atlikti p atskirus MR-PCF MCHF skaičiavimus skirtingoms suskirstytoms koreliacinėms funkcijoms $|\Psi^\Lambda\rangle$;

3. (pasirinktinai) naudoti PCFI modifikaciją kai visos konfigūracinės būsenos funkcijos yra nesuvaržytos (Deconstraining Partitioned Correlation Functions (DPCFI)) ;
4. sudaryti hamiltoniano ir kitų operatorių sąveikos matricas (2.8) atliekant biortogonalias transformacijas;
5. spręsti tikrinių verčių uždavinį (2.7) norint gauti daugiaelektronę banginę funkciją;
6. apskaičiuoti norimas charakteristikas su PCFI tikriniais vektoriais.

3. Izoelektronių sekų energijos spektrai ir šuolių tikimybės [A1-A4]

Spektroskopiniai boro, anglies, azoto ir deguonies izoelektronių sekų jonų duomenys yra labai naudingi astrofizikoje, nagrinėjant vykstančius reiškinius plazmoje [12-14]. Jau daugelį metų mokslininkai tiria šias izoelektrones sekas tiek eksperimentiškai, tiek teoriškai.

Pateikiami tikslūs ir išsamūs skaičiavimai naudojant visiškai reliatyvistinius MCDHF ir RCI metodus. Visi skaičiavimai buvo atlikti su GRASP2K programiniu paketu [15, 16]. Matricinių elementų sukininės-kampinės dalies skaičiavimams buvo taikoma antrinio kvantavimo metodika jungtinėje tenzorinėje formoje ir kvazisukinio technika. Šuolių duomenų skaičiavimui buvo taikomas biortogonalinių orbitalių metodas. Aukščiau išvardytoms sekoms yra apskaičiuoti: energijos spektrai, elektrinių dipolinių (E1), magnetinių dipolinių (M1), elektrinių kvadrupolinių (E2), magnetinių kvadrupolinių (M2) šuolių tikimybės ir lygmenų gyvavimo trukmės ($1s^2$) $2s^2 2p^N$, $2s 2p^{N+1}$ ir $2p^{N+2}$ konfigūracijų būsenoms, kur $N = 1, 2, 3, 4$, atitinkamai B-, C-, N- ir O- izoelektronei sekai. Gautų rezultatų tikslumas yra įvertintas – energijos lygmenys ir šuolių tikimybės palygintos su eksperimentu ir kitais teoriniais skaičiavimais.

Konfigūracijų bazės generavimas ir skaičiavimo metodas

Aukščiau minėtų izoelektronių sekų skaičiavimuose visų būsenų, priklausančių konkrečiai konfigūracijai, banginės funkcijos buvo nustatomos kartu. Konfigūracinės būsenos funkcijos su tam tikru lygiškumu π ir J vertėmis buvo generuojamos darant sužadinius į virtualias orbitales. Taikant apribojimus sužadiniams galima įtraukti įvairius koreliacinius efektus. Šiame darbe buvo įtraukti valentiniai, kamieno-valentiniai ir kamieno-kamieno koreliaciniai efektai. Aktyvūs rinkiniai buvo sistemingai didinami – sluoksnis po sluoksnio pridedant naujas orbitales. Konfigūracijų bazė buvo gaunama darant viengubus ir dvigubus sužadinius į virtualias orbitales (žr. 3.1. lentelę) iš visų $2s^2 2p^N$, $2s 2p^{N+1}$ ir $2p^{N+2}$ konfigūracijų. Deguonies izoelektronei sekai buvo taikomas apribojimas – leidžiamas tik vienas sužadinimas iš $1s$ sluoksnio.

3.1. lentelė. Konfigūracijų bazės dydis.

Izoel. seka	n ir l (pagrindinis ir orbitinis kvan. sk.)	padidintas MR rinkinys
B	$n = 3 \dots 9$ $l = 0 \dots 5$ kai $n = 7$ tai $l = 0 \dots 6$ kai $n = 9$ tai $l = 0 \dots 6$	$\{2s^2 2p, 2p^3, 2s 2p 3d, 2p 3d^2\}$ nelyginėms būsenoms $\{2s 2p^2, 2p^2 3d, 2s^2 3d, 2s 3d^2\}$ lyginėms būsenoms
C	$n = 3 \dots 8$ $l = 0 \dots 5$ kai $n = 8$ tai $l = 0 \dots 4$	$\{2s 2p^3, 2p^3 3d, 2s^2 2p 3d, 2s 2p 3d^2\}$ nelyginėms būsenoms $\{2s^2 2p^2, 2p^4, 2s 2p^2 3d, 2s^2 3d^2\}$ lyginėms būsenoms
N	$n = 3 \dots 8$ $l = 0 \dots 4$ kai $n = 6$ tai $l = 0 \dots 5$	$\{2s^2 2p^3, 2p^5, 2s 2p^3 3d, 2s^2 2p 3d^2\}$ nelyginėms būsenoms $\{2s 2p^4, 2p^4 3d, 2s^2 2p^2 3d, 2s 2p^2 3d^2\}$ lyginėms būsenoms
O	$n = 3 \dots 8$ $l = 0 \dots 5$	$\{2s 2p^5, 2p^5 3d, 2s^2 2p^3 3d\}$ nelyginėms būsenoms $\{2s^2 2p^4, 2p^6, 2s 2p^4 3d\}$ lyginėms būsenoms

3.2. lentelė. MCDHF skaičiavimų suvestinė.

Konfigūracija	J	Lygiškumas	Tikrinė vertė	CSF skaičius
B-izoelektronė seka				
$1s^2 2s^2 2p$	1/2, 3/2	–	1, 1	202 297
$1s^2 2s 2p^2$	1/2, 3/2, 5/2	+	1-3, 1-3, 1-2	302 420
$1s^2 2p^3$	1/2, 3/2, 5/2	–	2, 2-4, 1	363 181
C-izoelektronė seka				
$1s^2 2s^2 2p^2$	0, 1, 2	+	1-2, 1, 1-2	341 948
$1s^2 2s 2p^3$	0, 1, 2, 3	–	1, 1-4, 1-4, 1	946 241
$1s^2 2p^4$	0, 1, 2	+	3-4, 1-2, 3-4	341 948
N-izoelektronė seka				
$1s^2 2s^2 2p^3$	1/2, 3/2, 5/2	–	1, 1-3, 1	698 631
$1s^2 2s 2p^4$	1/2, 3/2, 5/2	+	1-3, 1-3, 1-2	679 954
$1s^2 2p^5$	1/2, 3/2	–	2, 4	382 541
O-izoelektronė seka				
$1s^2 2s^2 2p^4$	0, 1, 2	+	1-2, 1, 1-2	709 690
$1s^2 2s 2p^5$	0, 1, 2	–	1, 1-2, 1	702 892
$1s^2 2p^6$	0	+	3	67 375

Po MCDHF skaičiavimų kiekvienam orbitalių kompleksui sekė RCI skaičiavimai, įtraukiant Breito sąveiką. Baigiamajame etape MR rinkinys buvo padidintas, į jį buvo įtrauktos visos konfigūracinės būsenos funkcijos su didžiausiais svoriais. Konfigūracijos su $3d$ orbitalėmis buvo ypač svarbios. Padidinti MR rinkiniai kiekvienai izoelektronei sekai pateikiami 3.1. lentelėje. Kiekvienai izoelektronei sekai galutinė lyginių ir nelyginių

konfigūracijų bazė pateikiama 3.2. lentelėje. Padidinus MR rinkinį buvo įtraukti aukštesnės eilės koreliaciniai efektai. Kvantinės elektrodinamikos (quantum electrodynamic (QED)) pataisos (vakuomo poliarizacija ir savitoji energija) buvo įtrauktos į galutinius RCI skaičiavimus.

Rezultatai

Boro, anglies, azoto ir deguonies izoelektronėms sekoms atlikti išsamūs skaičiavimai. Minėtoms sekoms yra apskaičiuoti: energijos spektrai, E1, M1, E2, M2 šuolių tikimybės ir lygmenų gyvavimo trukmės ($1s^2$) $2s^2 2p^N$, $2s 2p^{N+1}$ ir $2p^{N+2}$ konfigūracijų būsenoms. Visi, suskaičiuotų charakteristikų, duomenys publikuoti [A1-A4] straipsniuose. Rezultatai yra įvertinti lyginant juos su eksperimentu ir kitais teoriniais skaičiavimais.

Santraukoje pateikiama keletas pavyzdžių iš energijos spektro, lygmenų gyvavimo trukmių ir šuolių tikimybių skaičiavimų kai kuriems izoelektronų sekų elementams.

3.3. lentelė. Energijos lygmenų palyginimas Fe XX jonui (N-izoelektronė seka). Energijos lygmenys E ir skirtumai tarp teorinių ir stebėtų energijų Δ (cm^{-1}).

Lygmuo	J	E_{eks} [17]	Δ_{RCI}	Δ_{MRMP} [18]	Δ_{SS} [19]	Δ_{BPRM} [20]	Δ_{CITRO} [21]	Δ_{MCDF} [21]
$2s^2 2p^3 \ ^4S^o$	3/2	0	0	0	0	0	0	0
$2s^2 2p^3 \ ^2D^o$	3/2	138620	198	5	1978	2283	236	3095
	5/2	176130	212	5	2859	5485	-178	3407
$2s^2 2p^3 \ ^2P^o$	1/2	260270	307	105	-2697	4307	201	2939
	3/2	323340	226	270	-3463	5214	-972	2622
$2s 2p^4 \ ^4P$	5/2	752730	-60	-224	-5629	4677	-2344	919
	3/2	820630	-46	-222	-7932	3497	-2927	779
	1/2	842480	-27	-164	-8037	3704	-3057	1056
$2s 2p^4 \ ^2D$	3/2	1042570	267	-104	1707	8055	-3326	8354
	5/2	1058360	227	-188	2856	9713	-2893	7862
$2s 2p^4 \ ^2S$	1/2	1195260	476	319	24	9985	-3135	10229
$2s 2p^4 \ ^2P$	3/2	1242430	522	61	8974	10880	-3222	13338
	1/2	1340040	509	-133	5272	11265	-3781	12356
$2s 2p^5 \ ^2P^o$	3/2	1954310	611	1419		12380	-5869	17474
	1/2	2061990	619	1476		14086	-6348	17189

3.3. ir 3.4. lentelėse pateikiami energijos lygmenys Fe XX ir Fe XIX jonams. Darbe gauti rezultatai yra lyginami su eksperimentu (E_{eks}) ir kitais teoriniais skaičiavimais.

Lentelėse pateikiami skirtumai tarp teorinių ir stebėtų energijų (Δ). Iš rezultatų matoma, kad gauti rezultatai (RCI) daug geriau sutampa su eksperimentu negu kiti teoriniai skaičiavimai. Daugeliui atvejų skirtumas siekia kelis šimtus cm^{-1} . Panašus sutapimas su eksperimentiniais rezultatais yra ir kitiems nagrinėtų izoelektroninių sekų elementams.

3.4. lentelė. Energijos lygmenų palyginimas Fe XIX jonui (O-izoelektronė seka). Energijos lygmenys E ir skirtumai tarp teorinių ir stebėtų energijų Δ (cm^{-1}).

Lygmuo	J	E_{eks} [17]	Δ_{RCI}	Δ_{MRMP} [22]	Δ_{PT} [23]	Δ_{MBPT} [24]	Δ_{FAC} [25]	Δ_{MCDF} [26]
$2s^2 2p^4 \ ^3P$	2	0	0	0	0	0	0	0
	0	75250	63	-32	150	-508	-52	196
	1	89441	-7	-190	-1241	-1882	-620	-650
$2s^2 2p^4 \ ^1D$	2	168852	133	-60	-1252	-971	1726	1995
$2s^2 2p^4 \ ^1S$	0	325140	277	-191	-240	-4016	281	1396
$2s 2p^5 \ ^3P^o$	2	922890	154	-35	8010	-5455	6341	10191
	1	984740	180	51	8160	-6498	6506	10266
	0	1030020	179	-28	6680	-7267	6038	9672
$2s 2p^5 \ ^1P^o$	1	1267600	493	171	2200	-8673	15314	20173
$2p^6 \ ^1S$	0	2134180	778	-1370	12620	-13969	26521	41465

3.5. lentelė. Lygmenų gyvavimo trukmių palyginimas Si VIII jonui (N-izoelektronė seka). Lygmenų gyvavimo trukmės τ (ps).

Lygmuo	τ_{RCI}	$\tau_{\text{MCHF-BP}}$ [27]	τ_{MRMP} [18]	τ_{MBPT} [28, 29]	τ_{eks} [30]
$2s 2p^4 \ ^4P_{5/2}$	261,2	260,5	266,5	272,1	280 ± 30
$2s 2p^4 \ ^4P_{3/2}$	251,9	251,3	256,9	263,7	
$2s 2p^4 \ ^4P_{1/2}$	246,9	246,4	251,6	258,4	
$2s 2p^4 \ ^2D_{5/2}$	97,3	97,1	98,1	100,0	90 ± 15
$2s 2p^4 \ ^2D_{3/2}$	95,4	95,1	96,6	98,6	
$2s 2p^4 \ ^2P_{3/2}$	23,1	23,1	23,1	23,2	23 ± 3
$2s 2p^4 \ ^2P_{1/2}$	23,2	23,1	23,2	23,2	

3.5.–3.7. lentelėse pateikiamos kelių azoto ir deguonies izoelektroninių sekų elementų gyvavimo trukmės. Lygmenų gyvavimo trukmės palygintos su eksperimentiniais ir kitais

teoriniais rezultatais. Kaip matome iš lentelių turime labai gerą sutapimą su eksperimentu, skirtumas yra eksperimento paklaidų ribose.

3.6. lentelė. Lygmenų gyvavimo trukmių palyginimas S X jonui (N-izoelektronė seka). Lygmenų gyvavimo trukmės τ (ms).

Lygmuo	τ_{RCI}	$\tau_{MCHF-BP}$ [27]	τ_{MBPT} [28, 29]	τ_{eks} [31]
$2s^2 2p^3 \ ^2P_{1/2}^o$	5,111	5,085	5,28	$5,20 \pm 0,15$
$2s^2 2p^3 \ ^2P_{3/2}^o$	2,109	2,103	2,16	$2,10 \pm 0,06$

3.7. lentelė. Lygmenų gyvavimo trukmių palyginimas O-izoelektronės sekos jonams. Lygmenų gyvavimo trukmės τ (ms).

Jonas	Lygmuo	τ_{RCI}	$\tau_{MCHF-BP}$ [32]	τ_{eks}
F II	$2s^2 2p^4 \ ^1S$	397,8	430,22	420 ± 12 [33]
Ne III	$2s^2 2p^4 \ ^1S_0$	206,5	216,73	223 ± 11 [34] 213 ± 4 [35]
Si VII	$2s^2 2p^4 \ ^1D_2$	63,87	63,341	$63,6 \pm 0,7$ [36]
P VIII	$2s^2 2p^4 \ ^1D_2$	28,69	28,332	$28,63 \pm 0,08$ [37]
S IX	$2s^2 2p^4 \ ^1D_2$	13,74	13,510	$13,79 \pm 0,05$ [37]
Ar XI	$2s^2 2p^4 \ ^3P_1$	14,97	14,560	$14,8 \pm 1,1$ [38]

Taip pat darbe buvo skaičiuojami skirtingų tipų šuolių tikimybės. Elektriniams šuoliams įvestas parametras R , kuris apibrėžia šuolių tikimybių santykį tarp ilgio ir greičio formų. Kuo šis santykis artimesnis 1, tuo geriau sutampa šuolių tikimybės ilgio ir greičio formose. 3.8. lentelėje pristatomos šuolių tikimybės Fe XIX jonui ir jų palyginimas su kitais teoriniais bei eksperimentiniais rezultatais. Iš lentelės matome, kad turime puikų sutapimą tarp dviejų formų stipriems E1 šuoliams. Šuolių tikimybės A_{NIST} stulpelyje paimtos iš NIST duomenų bazės. Šios vertės yra pagrįstos teoriniais linijų stiprių skaičiavimais ir stebėtais bangos ilgiais, jų tikslumas įvertintas kaip labai prastas (kai kuriais atvejais net $> 50\%$). Turime gerą sutapimą su Breito ir Paulio R -matricos (BPRM) [111] ir SUPERSTRUCTURE

(SS) [98] metodų rezultatais, kurie buvo gauti naudojantis eksperimentiniais bangos ilgiais ir suskaičiuotais linijų stipriais.

3.8. lentelė. Šuolių tikimybių palyginimas Fe XIX (O-izoelektronė seka). Šuolių tikimybės A (s^{-1}).

Lygmenys		Šis darbas					
Aukštesnis	Žemesnis	A_{RCI}	R	A_{NIST} [17]	A_{MCDF} [26]	A_{SS} [39]	A_{BPRM} [40]
E1 šuoliai							
$2s2p^5\ ^3P_2^o$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	3,370e+10	1,00	3,9e+10 ^C	3,57e+10	3,492e+10	3,35e+10
$2s2p^5\ ^3P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	2,779e+10	1,01	3,17e+10 ^C	2,91e+10	2,855e+10	2,77e+10
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	1,099e+10	1,01	1,3e+10 ^E	1,15e+10	1,083e+10	1,12e+10
$2s2p^5\ ^3P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_0$	1,406e+10	1,00	1,6e+10 ^C	1,49e+10	1,451e+10	1,40e+10
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_0$	1,248e+09	1,02	1,6e+09 ^E	1,34e+09	1,281e+09	1,19e+09
$2s2p^5\ ^3P_2^o$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	9,038e+09	0,99	1,04e+10 ^C	9,60e+09	9,383e+09	9,02e+09
$2s2p^5\ ^3P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	1,094e+10	1,00	1,26e+10 ^C	1,16e+10	1,133e+10	1,09e+10
$2s2p^5\ ^3P_0^o$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	5,278e+10	1,00	6,05e+10 ^C	5,57e+10	5,445e+10	
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	8,495e+08	1,03	9,3e+08 ^E	8,41e+08	8,436e+08	8,57e+08
$2s2p^5\ ^3P_2^o$	$2s^22p^4\ ^1D_2$	1,912e+09	0,97	2,2e+09 ^E	1,94e+09	1,935e+09	1,96e+09
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s^22p^4\ ^1D_2$	1,323e+11	1,00	1,49e+11 ^C	1,42e+11		1,32e+11
$2s2p^5\ ^3P_1^o$	$2s^22p^4\ ^1S_0$	5,970e+08	0,96	7,9e+08 ^E	6,35e+08	6,364e+08	5,86e+08
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s^22p^4\ ^1S_0$	9,591e+09	0,99	1,1e+10 ^C	1,03e+10	9,798e+09	
$2p^6\ ^1S_0$	$2s2p^5\ ^3P_1^o$	1,040e+10	1,03	1,2e+10 ^E	1,06e+10	1,026e+10	1,09e+10
$2p^6\ ^1S_0$	$2s2p^5\ ^1P_1^o$	1,358e+11	1,00	1,61e+11 ^C	1,50e+11	1,403e+11	1,35e+11
E2 šuoliai							
$2s^22p^4\ ^1D_2$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	5,934e+00	1,04	6,00e+00 ^E	6,18e+00		
$2s^22p^4\ ^1S_0$	$2s^22p^4\ ^1D_2$	4,857e+01	1,07	4,9e+01 ^E	4,83e+01	4,889e+01	
M1 šuoliai							
$2s^22p^4\ ^3P_1$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	1,449e+04		1,45e+04 ^C	1,42e+04		
$2s^22p^4\ ^1D_2$	$2s^22p^4\ ^3P_2$	1,693e+04		1,73e+04 ^C	1,69e+04	1,652e+04	
$2s^22p^4\ ^3P_1$	$2s^22p^4\ ^3P_0$	4,046e+01		4,0e+01 ^C		4,117e+01	
$2s^22p^4\ ^1D_2$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	6,605e+02		6,70e+02 ^D	6,99e+02	6,320e+02	
$2s^22p^4\ ^1S_0$	$2s^22p^4\ ^3P_1$	1,398e+05		1,50e+05 ^C	1,39e+05	1,404e+05	
$2s2p^5\ ^1P_1^o$	$2s2p^5\ ^3P_1^o$	9,250e+03		9,40e+03 ^D		9,173e+03	

C, D, E žymos A_{NIST} stulpelyje parodo šuolių tikimybių tikslumą. C: $\leq 25\%$, D: $\leq 50\%$, E: $> 50\%$.

4. W^{24+} jono spektroskopinių savybių dėsningumai [A5]

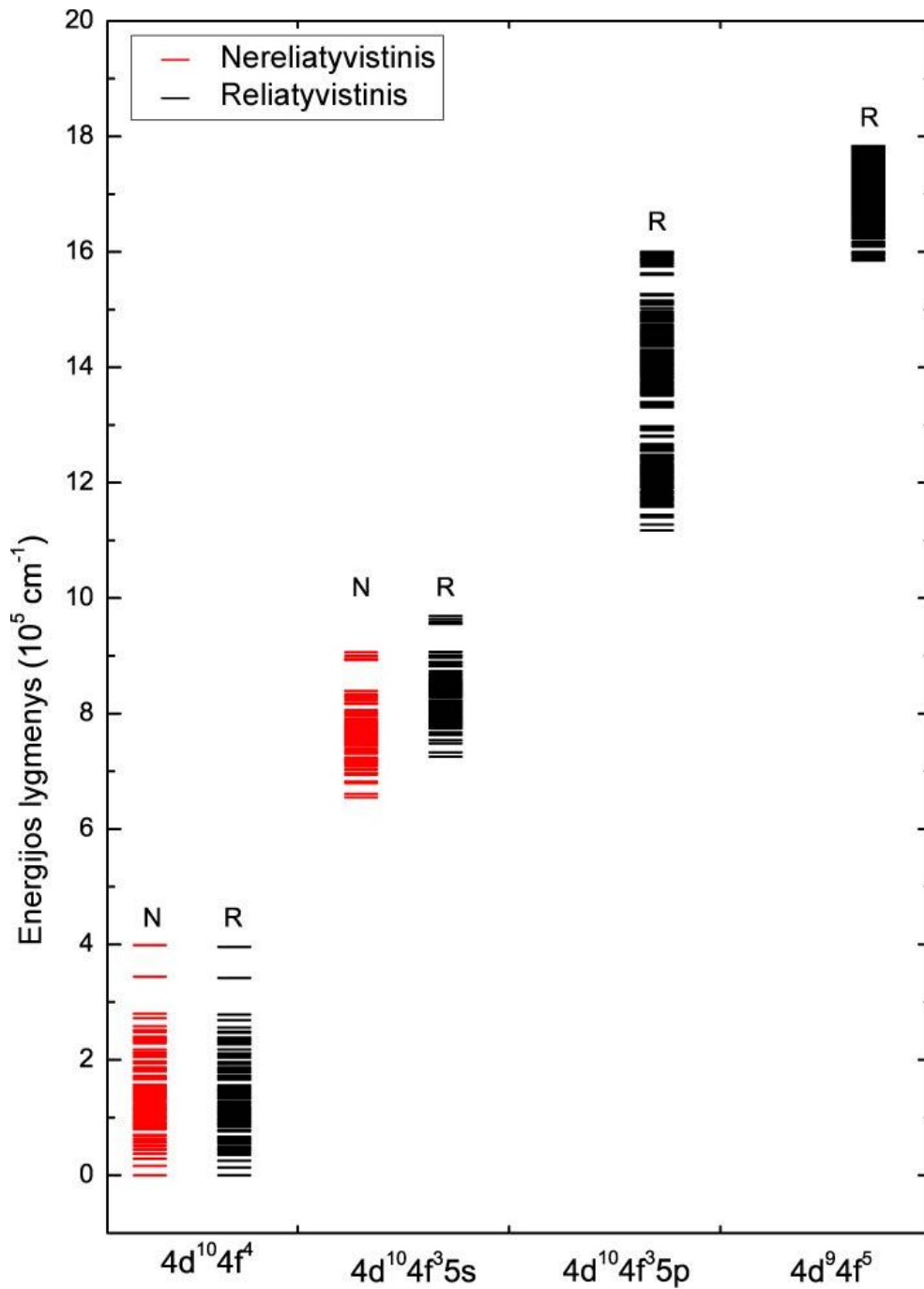
Volframas yra naudojamas kaip sienelių medžiaga esamuose ir planuojamuose statyti termobranduolinės sintezės reaktoriuose. Jonai, turintys paprastas konfigūracijas su atvirais sluoksniais, yra plačiai išnagrinėti tiek eksperimentiškai, tiek teoriškai. Bet jonai turintys atvirą f -sluoksnį, yra mažai ištirti dėl didelio energijos lygmenų skaičiaus.

Darbe naudojami MCHF ir MCDHF metodai, atsižvelgiant į reliatyvistines ir QED pataisas. Nereliatyvistinis konfigūracijų superpozicijos metodas buvo naudojamas siekiant įtraukti BP reliatyvistines pataisas, o RCI metodas buvo naudojamas siekiant įtraukti Breito sąveiką ir QED pataisas (įskaitant savitąją energiją ir vakuomo poliarizaciją). MCDHF skaičiavimai buvo atliekami su GRASP2K [15, 16] programiniu paketu.

MCDHF skaičiavimuose buvo naudojamas MR rinkinys: $[Kr] 4d^{10}4f^4$ ir $[Kr] 4d^{10}4f^35p$ konfigūracijas lyginėms būsenoms ir $[Kr] 4d^{10}4f^35s$ ir $[Kr] 4d^94f^5$ konfigūracijas nelyginėms būsenoms. Lyginės ir nelyginės ASF buvo skaičiuojamos nepriklausomai. CSF buvo gaunamos darant viengubus sužadinius iš visų atvirų sluoksnių į virtualias orbitales taip konstruojant aktyvų rinkinį (active set (AS)). AS rinkinys žymimas pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n , kuris kartu nustato ir orbitinį kvantinį skaičių l . Buvo įtrauktos kampinės simetrijos, s , p ir d orbitalės, su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi iki n ir f orbitalės iki $n-1$. Pavyzdžiui, aktyvus rinkinys $AS_{n=6}$ įtraukia s , p ir d orbitales su kvantiniu skaičiumi iki $n=6$ ir f orbitales iki $n=5$. Aktyvūs rinkiniai buvo sėkmingai išplėsti iki $n=7$. Visais etapais tik naujos orbitalės buvo optimizuotos.

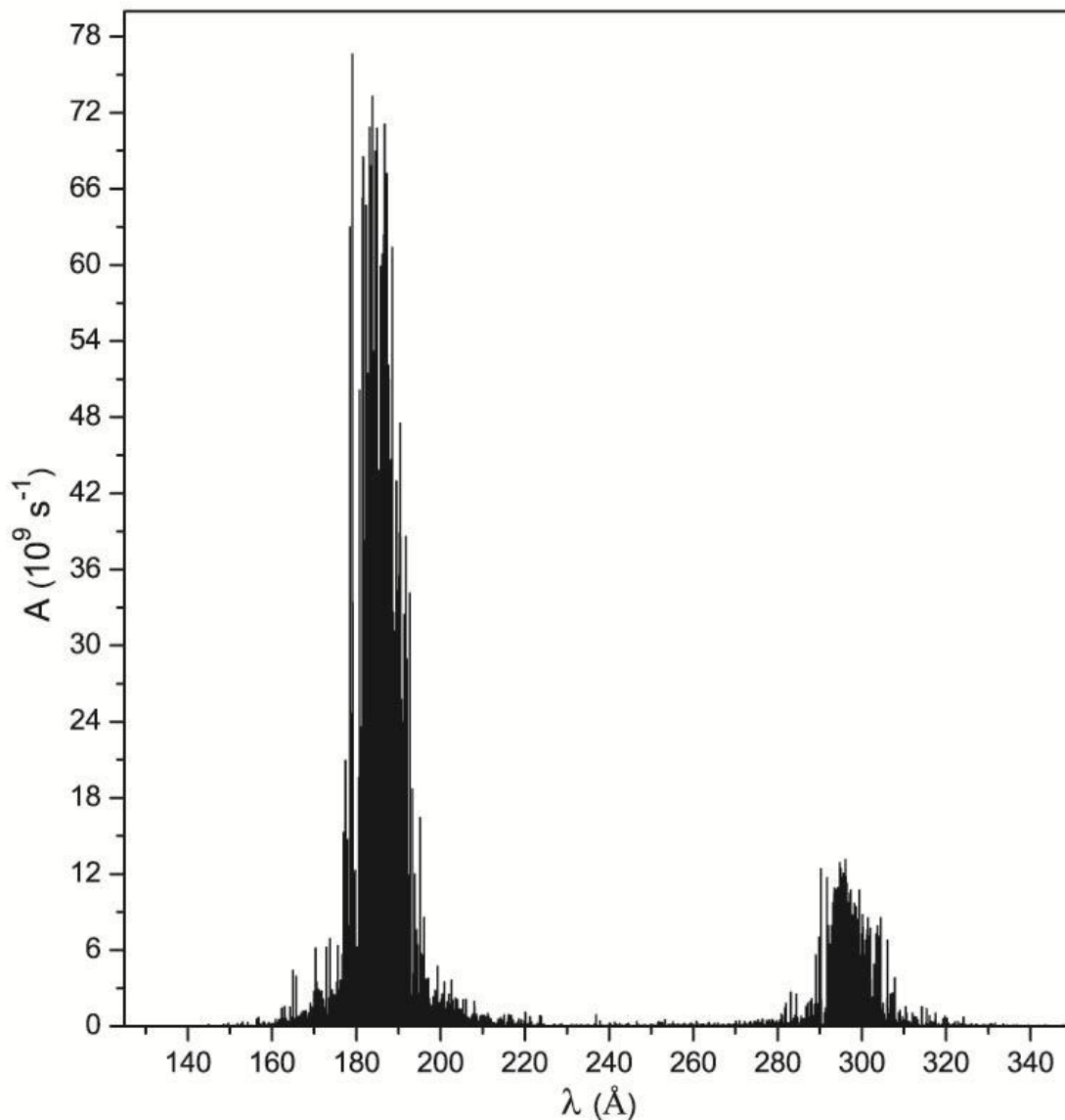
4.1. paveiksle pavaizduotas W^{24+} jono energijos spektras apimantis 977 žemiausius energijos lygmenis, kurie priklauso $[Kr] 4d^{10}4f^4$ (107 lygmenys), $[Kr] 4d^{10}4f^35p$ (82 lygmenys), $[Kr] 4d^{10}4f^35s$ (242 lygmenys) ir $[Kr] 4d^94f^5$ (nepilnas, 546 lygmenys) konfigūracijoms. Pateikti rezultatai yra gauti dviem (nereliatyvistiniu ir reliatyvistiniu) artiniais. 4.2.1. paveiksle matome, kad abiem artiniais gauname panašų $[Kr] 4d^{10}4f^4$ ir $[Kr] 4d^{10}4f^35s$ konfigūracijų energijos spektrą. Tačiau, išsami duomenų analizė rodo, kad yra esminiai skirtumai tarp energijos spektrų gautų abejais artiniais. Taigi, norėdami nagrinėti

tokių jonų energijos spektrus, šuolių tikimybes, gyvavimo trukmes ir t. t., turime naudoti reliatyvistinį artinį. Pagrindinis W^{24+} jono ypatumas – pagrindinė jo konfigūracija turi atvirą tik f sluoksnį, t. y. $4f^4$. Žemiausia sužadinta yra $4f^35s$ konfigūracija.



4.1. pav. W^{24+} jono energijos spektras skirtinguose artiniuose [MCHF+BP raudonai (N) ir MCDHF+B+QED juodai (R)].

Taip pat apskaičiuotos E1 šuolių tikimybės. Iš 4.1. paveikslo matome, kad E1 šuoliai galimi tik tarp sužadintų [Kr] $4d^{10}4f^35p$ ir [Kr] $4d^{10}4f^35s$ konfigūracijų. E1 šuolių, tarp minėtų konfigūracijų, skaičiavimams mes naudojome (single reference (SR)) rinkinį. Lyginės ir nelyginės ASF skaičiuotos nepriklausomai. Šių šuolių duomenys (bangos ilgiai, šuolių tikimybės, linijų stipriai) buvo apskaičiuoti taikant biortogonalinių orbitalių metodą. 4.2. paveiksle pavaizduota elektrinių dipolinių šuolių tikimybių A priklausomybė nuo bangos ilgio. Stipriausi šuoliai lokalizuojasi 170 Å – 198 Å bangos ilgių intervale. Šuolių tikimybės, esančios 285 Å – 310 Å bangos ilgių intervale, yra silpnesnės. Šios sritys yra svarbios termobranduolinei plazmos diagnostikai.



4.2. pav. E1 šuolių tikimybės naudojant MCDHF+B+QED artinį.

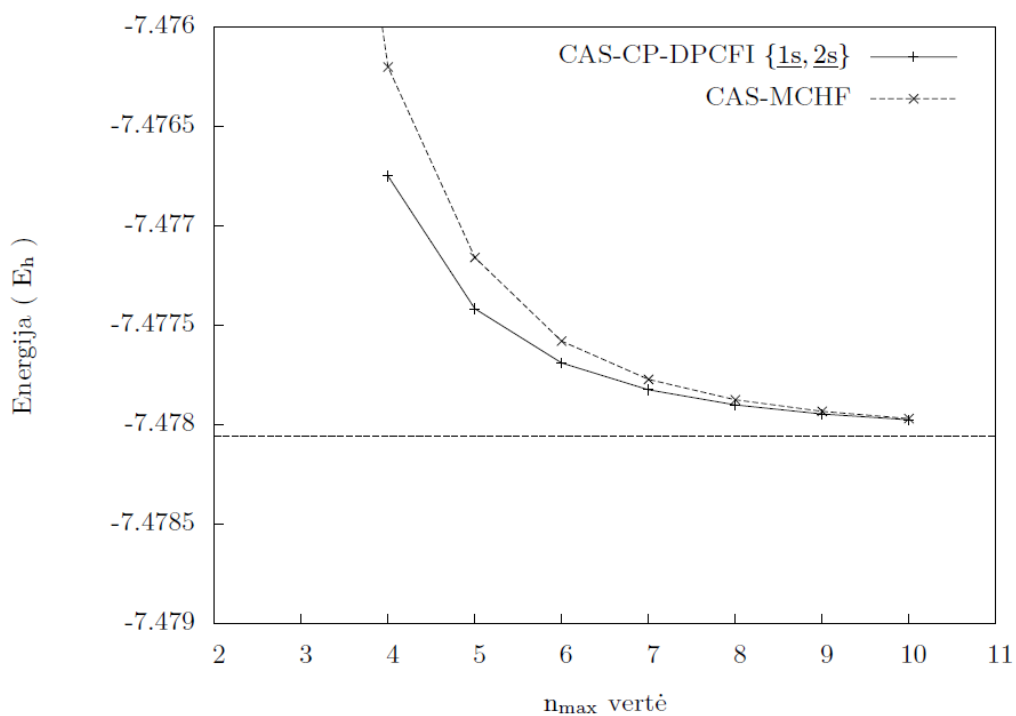
5. PCFI metodo taikymai [A6-A8]

Ankščiau PCFI metodas buvo pritaikytas neutralaus berilio energijos ir specifinės masės poslinkio skaičiavimams [41]. Šiame skyriuje PCFI metodas pritaikytas ličio ir boro atomams.

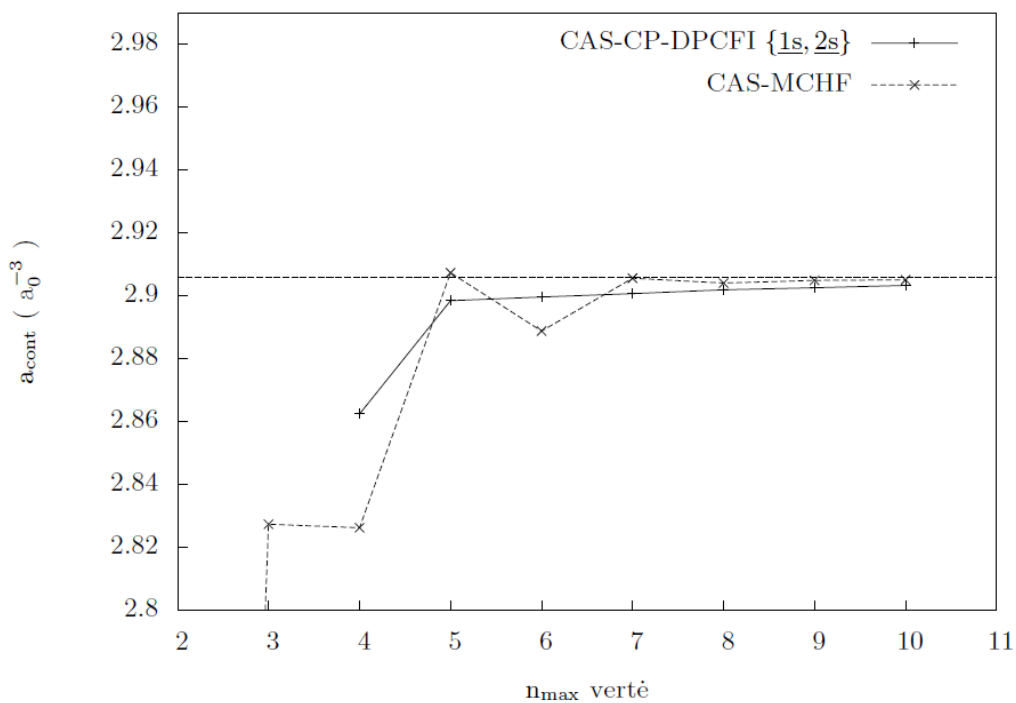
Li-izoelektronės sekos jonai yra įdomūs koreliacijų įtakos tyrinėjimui. Neutralaus ličio savybių tyrimai suteikia puikų vaizdą kaip nesutapimas tarp teorijos ir eksperimento veda į naujų metodų, kurie pagerina tiek teorijos, tiek eksperimento rezultatus, plėtrą.

Darbe pateikti skaičiavimų rezultatai taikant MCHF ir PCFI metodus neutralaus ličio pagrindinei būsenai. Santraukoje pateikiami keli pavyzdžiai. 5.1. ir 5.2. paveiksluose pateikiami neutralaus ličio pagrindinės būsenos $1s^2 2s^2 S$ energijos ir hipersmulkiosios sąveikos konstantos rezultatai naudojantis pilnos aktyvios erdvės MCHF (complete active space MCHF (CAS-MCHF)) ir pilnos aktyvios erdvės ir kamieno poliarizacijos DPCFI (CAS core polarization DPCFI (CAS-CP-DPCFI)) metodus. Taikant CAS-CP-DPCFI metodą visa funkcija yra suskirstyta į SR funkciją ir 4 koreliacines grupes: 1) Λ_{1s} (viengubi sužadainimai iš $1s$ sluoksnio); 2) Λ_{1s1s} (dvigubi sužadainimai iš $1s$ sluoksnio); 3) $\Lambda_{2s-1s2s}$ (viengubi sužadainimai iš $2s$ sluoksnio, o taip pat dvigubi sužadainimai kai vienas sužadainimas yra iš $1s$ ir vienas sužadainimas yra iš $2s$ sluoksnio); 4) Λ_{1s1s2s} (trigubi sužadainimai).

5.1. ir 5.2. paveiksluose parodyta kaip konverguoja energijos ir hipersmulkiosios sąveikos konstantos vertės didinant kompleksus (CSF bazę) pagal n (n_{\max} reiškia, kad nebuvo taikomi jokie apribojimai orbitiniam kvantiniam skaičiui). Brūkšnine linija pažymėti rezultatai iš [42, 43], kur buvo naudojamas Hylero (Hylleraas) variacinis metodas. Iš paveikslų matome, kad naudojant PCFI metodą rezultatai daug greičiau sukongverguoja.



5.1. pav. Neutralaus ličio pagrindinės būsenos energijos vertės konvergavimas. Brūkšnine linija pažymėti rezultatai iš [42, 43].



5.2. pav. Neutralaus ličio pagrindinės būsenos hipersmulkiosios sąveikos konstantos vertės konvergavimas. Brūkšnine linija pažymėti rezultatai iš [42, 43].

Neutraliam borui nėra stebėti šuoliai tarp ${}^2P^o$ ir 4P termų. Todėl energija, minėtam šuoliui, buvo gauta atliekant izoelektronės sekos ekstrapoliaciją. Edlén ir kt. [44] gavo, kad energijos skirtumas tarp $2s^22p^2P_{3/2}^o$ ir $2s2p^2{}^4P_{5/2}$ termų lygus $28866 \pm 15 \text{ cm}^{-1}$. Kramida ir Ryabstev [45] naudodami praplėstą eksperimentinių duomenų rinkinį patikslino vertę iki $28643,11 + x \text{ cm}^{-1}$ su $1,8 \text{ cm}^{-1}$ paklaida, kur x yra ekstrapoliacijos paklaida. Skirtumas tarp dviejų ekstrapoliuotų verčių yra 223 cm^{-1} .

Šiame darbe pateikti šuolio energijos tarp $2s^22p^2P_{3/2}^o - 2s2p^2{}^4P_{5/2}$ skaičiavimų rezultatai, naudojant MCHF ir PCFI metodus. Rezultatų tikslumas įvertintas atlikus panašius skaičiavimus C II jonui, kur eksperimentiniai rezultatai yra žinomi.

Darbe atlikti sistemingi skaičiavimai, kuriuose orbitalių bazė buvo plečiama didinant pagrindinį kvantinį skaičių n , kuris apibrėžia skaičiavimus. MCHF skaičiavimai buvo atliekami iki $n = 10$ komplekso kai orbitinis kvantinis skaičius $l = 5$. Skaičiavimuose mes naudojome MR rinkinį:

$${}^2P^o: 2s^22p, 2p^3, 2s2p3d, 2s^23p, 2s3s3p, 2p^23p, 2p3s^2, 2p3d^2, 2s2p3s;$$

$${}^4P: 2s2p^2, 2s2p3p, 2p^23d, 2s3d^2, 2s3p^2, 2p3s3p, 2p^23s.$$

Dvi išvardytos būsenos turi $1s^2$ kamieną ir tris valentinius elektronus. Viengubi arba dvigubi sužadainimai iš valentinių orbitalių į virtualias apibrėžiami kaip valentiniai-valentiniai (valence-valence (VV)) koreliaciniai efektai, viengubas sužadainimas iš kamieno ir viengubas iš valentinio sluoksnio apibrėžiami kaip kamieno-valentiniai (core-valence (CV)) koreliaciniai efektai, o dvigubi sužadainimai iš kamieno apibrėžiami kaip kamieno-kamieno (core-core (CC)) koreliaciniai efektai.

5.1. lentelėje parodyti šuolio energijos tarp ${}^2P^o$ ir 4P termų rezultatai naudojant dvi skirtingas MCHF metodo strategijas. Naudojant nepriklausomą (independent) strategiją kiekvienos būsenos banginė funkcija ortogonalinių orbitalių bazėje buvo varijuojama atskirai. Naudojant priklausomą (simultaneous) strategiją dvi būsenos varijuojamos kartu, taigi tokios pat orbitalės yra naudojamos abejoms banginėms funkcijoms.

5.1. lentelė. Šuolio energijos tarp $2s^22p^2P^o - 2s2p^2^4P$ palyginimas naudojant įvairias skaičiavimo strategijas. Šuolio energija ΔE (cm^{-1}), pilnutinė energija E (E_h). Konfigūracinių būsenų skaičius, N , didžiausiam aktyviam rinkiniui ($10h$) $^2P^o$ ir 4P termams pateikiamas lentelėje.

n	$E (^2P^o)$	$E (^4P)$	ΔE
„independent“			
4	-24,639611871	-24,510683384	28296,53
5	-24,646858826	-24,517481734	28394,99
6	-24,650292338	-24,519781873	28643,74
7h	-24,651852635	-24,520806644	28761,27
8h	-24,652552770	-24,521246474	28818,40
9h	-24,652880597	-24,521452001	28845,24
10h	-24,653049725	-24,521555084	28859,74
N	101472	68558	
„simultaneous“			
4	-24,639619089	-24,509994715	28449,26
5	-24,646817680	-24,517094023	28471,05
6	-24,650320310	-24,519604775	28688,74
7h	-24,651845860	-24,520717113	28779,43
8h	-24,652512201	-24,521187717	28822,39
9h	-24,652849227	-24,521400399	28849,68
10h	-24,653024991	-24,521518982	28862,23
N	101472	68558	

Taip pat atlikome šuolio energijos tarp $^2P^o$ ir 4P termų skaičiavimus naudojant PCFI metodą. MR rinkinys pasirinktas toks pat kaip ir MCHF skaičiavimuose. Taikant PCFI metodą MR funkcija pataisoma trijų tipų (VV, CV, CC) koreliacijomis ir užrašoma kaip tiesinė suskirstytų funkcijų, pažymėtų Λ_i , kombinacija

$$\Psi_1 = \alpha_1 \Lambda_1 + \alpha_2 \Lambda_2 + \alpha_3 \Lambda_3 . \quad (5.1)$$

Kiekviena iš Λ_i yra tiesinė CSF kombinacija, o maišymosi koeficientai ir orbitalės gaunamos sprendžiant MCHF lygtis $\Psi_0 + \Lambda_i$ banginei funkcijai. Toliau taikomi žingsniai aprašyti antro skyriaus pabaigoje.

5.2. lentelėje pateikiami rezultatai iš PCFI skaičiavimų. Palyginus juos su rezultatais iš MCHF skaičiavimų matome, kad komplekse $n=10$ pilnutinės energijos yra žemesnės.

5.2. lentelė. Neutralaus boro $^2P^o$ ir 4P termų nereliatyvistinės pilnutinės energijos E (E_h) ir šulio energija ΔE (cm^{-1}) gautos naudojantis PCFI metodu.

n	$E(^2P^o)$	$E(^4P)$	ΔE
4	-24,644046909	-24,514398526	28454,53
5	-24,650782918	-24,519740851	28760,40
6	-24,652391314	-24,520979432	28841,57
7	-24,652978136	-24,521441671	28868,91
8	-24,653244882	-24,521636963	28884,59
9	-24,653383550	-24,521735733	28893,35
10	-24,653464335	-24,521792201	28898,69

Naudojant PCFI metodą ištirėme kokią įtaka turi reliatyvistinis poslinkis, funkcijų nesuvaržymas, MR rinkinio padidinimas ir kt. Rezultatai yra pateikti 5.3. lentelėje. Sudėjus visas pataisas gauname, kad šulio energija tarp $2s^22p^2P_{3/2}^o$ ir $2s2p^2^4P_{5/2}$ būsenų lygi 28959 cm^{-1} ir yra kiek didesnė už Edlén [44] vertę 28866 cm^{-1} ir Kramida ir Ryabstev vertę $28643,11 \text{ cm}^{-1}$.

5.3. lentelė. Įnašo į šulio energiją (cm^{-1}) tarp $2s^22p^2P_{3/2}^o - 2s2p^2^4P_{5/2}$ suvestinė.

Šulio energija (PCFI (MR))	28898,69
Reliatyvistinis poslinkis	43,37
Smulkioji struktūra	-0,74
Nesuvaržytos CSF (DPCFI)	7,05
Ekstrapoliacija	8,10
Didesnis MR rinkinys	2,26
Baigtinė masė	-6,20
Kitos koreliacijos	6,58
(remainder)	
Suminė šulio energija	28959 ± 5
Edlén ir kt. [44]	28866 ± 15
Kramida ir Ryabstev [45]	$28643,1 \pm 1,8$

6. Pagrindiniai rezultatai ir išvados

1. Energijos lygmenys, šuolių tikimybės ir lygmenų gyvavimo trukmės apskaičiuotos šiems izoelektroninių sekų elementams: B-sekai: N III – Zn XXVI; C-sekai: F IV – Ni XXIII; N-sekai: F III – Kr XXX; O-sekai: F II – Kr XXIX. Apskaičiuoti energijos lygmenys labai gerai sutampa su eksperimentinėmis vertėmis. Daugeliui, nagrinėtų izoelektroninių sekų, jonų skirtumas, tarp gautų energijos lygmenų ir eksperimento, siekia iki kelių šimtų cm^{-1} (mažiau negu 0,1 proc.).
2. Darbe atlikta teorinių rezultatų analizė rodo, kad N-izoelektroninės sekos Si VIII $2s2p^4 \ ^2P_{1/2}$ lygmens eksperimentinė energija turėtų būti 2000 cm^{-1} aukštesnė negu pateikiama NIST duomenų bazėje. Taip pat Kr XXX $2s2p^4 \ ^2P_{3/2}$ lygmens eksperimentinė energijos vertė, pateikiama NIST duomenų bazėje, yra 2000 cm^{-1} aukštesnė palyginus su mūsų rezultatais.
3. O-izoelektroninės sekos As XXVI, Se XXVII ir Br XXVIII elementams pastebėjome galimą klaidingą linijų identifikavimą. Energijos lygmenys šiems elementams daug geriau sutampa su pusiauempirinėmis vertėmis negu su rezultatais pateiktais NIST duomenų bazėje.
4. Nagrinėtiems izoelektroninių sekų elementams apskaičiuotos lygmenų gyvavimo trukmės puikiai sutampa su eksperimentu, jo paklaidų ribose.
5. Įvertinus nagrinėtų izoelektroninių sekų šuolių tikimybių rezultatus, galime teigti, kad stipriems šuoliams gauname labai gerą sutapimą tarp dviejų (greičio ir ilgio) formų. Silpnesniems šuoliams sutapimas yra prastesnis.
6. Darbe pirmą kartą ištirta W^{24+} jono energijos spektro struktūra apimanti keturių žemiausių konfigūracijų energijos lygmenis.
7. Apskaičiuotos E1 šuolių tikimybės W^{24+} jonui. Šio tipo stipriausių šuolių sutapimas, tarp dviejų formų, yra apie 2,5 proc.

8. Darbe sukurtas efektyvus, biortogonalinių orbitalių pagrindu, PCFI metodas su keliomis jo modifikacijomis: i) PCFI (suvaržytas); ii) dalinai suvaržytas; iii) DPCFI (nesuvaržytas).
9. Darbe yra modifikuotos Breito ir Paulio operatorių matricinių elementų išraiškos, atsizvelgiant į biortogonalinių orbitalių metodo specifiką.
10. Apskaičiuota šuolio energija tarp $2s^22p \ ^2P_{3/2}^o$ ir $2s2p^2 \ ^4P_{5/2}$ termų lygi $28959 \text{ cm}^{-1} \pm 5 \text{ cm}^{-1}$. Ji yra didesnė už Edlén vertę $28866 \pm 15 \text{ cm}^{-1}$ ir Kramida ir Ryabstev vertę $28643,11 \text{ cm}^{-1}$.
11. Pasiūlytas MCHF ir biortogonalinių orbitalių pagrindu darbe sukurto PCFI metodų apjungimas leidžia padidinti variacinių metodų tikslumą.
12. Energijų skaičiavimui yra tinkamas PCFI metodas. Norėdami skaičiuoti hipersmulkiosios struktūros konstantas ir specifinės masės poslinkį naudojantis PCFI metodu turime naudoti PCFI modifikaciją - DPCFI.

Literatūra

1. H.-K. Chung, P. Jönsson, and A. Kramida, *Notes on Critical Assessment of Theoretical Calculations of Atomic Structure and Transition Probabilities*, *Atoms* **1**, 14 (2013).
2. M. Godefroid, P. Jönsson, and C. Froese Fischer, *Atomic structure variational calculations in spectroscopy*, *Phys. Scr.* **T78**, 33 (1998).
3. W. R. Johnson, *Atomic Structure Theory: Lectures on Atomic Physics*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007).
4. I. Lindgren, *Relativistic Many-Body Theory: A New Field-Theoretical Approach*, (Springer-Verlag, Berlin, 2011).
5. V. A. Dzuba and V. V. Flambaum, *Core-valence correlations for atoms with open shells*, *Phys. Rev. A* **75**, 052504 (2007).
6. W. R. Johnson, U. I. Safronova, A. Derevianko, and M. S. Safronova, *Relativistic many-body calculation of energies, lifetimes, hyperfine constants, and polarizabilities in ${}^7\text{Li}$* , *Phys. Rev. A* **77**, 022510 (2008).
7. M. S. Safronova, M. G. Kozlov, W. R. Johnson, and Dansha Jiang, *Development of a configuration-interaction plus all-order method for atomic calculations*, *Phys. Rev. A* **80**, 012516 (2009).
8. M. J. Vilkas, Y. Ishikawa, and E. Träbert, *Relativistic many-body Møller-Plesset perturbation theory calculations of the energy levels and transition rates in Na-like to P-like Xe ions*, *At. Data Nucl. Data Tables* **94**, 650 (2008).
9. Y. Ishikawa, J. A. Santana, and E. Träbert, *Relativistic multireference many-body perturbation theory for open-shell ions with multiple valence shell electrons: the transition rates and lifetimes of the excited levels in chlorinelike Fe X*, *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* **43**, 074022 (2010).
10. P.-Å . Malmqvist, *Calculation of transition density matrices by nonunitary orbital transformations*, *Int. J. Quantum Chem.* **30** 479 (1986).
11. J. Olsen, M. Godefroid, P. Jönsson, P.-Å . Malmqvist, and C. Froese Fischer, *Transition probability calculations for atoms using non-orthogonal orbitals*, *Phys. Rev. E* **52**, 4499 (1995).
12. M. J. Vilkas, Y. Ishikawa, and E. Träbert, *Relativistic many-body perturbation calculations of boron-like silicon, Si X*, *Phys. Scr.* **72**, 181 (2005).
13. V. Jonauskas, P. Bogdanovich, F. P. Keenan, R. Kisielius, M. E. Roord, R. F. Heeter, S. J. Rose, G. J. Ferland, and P. H. Norrington, *Energy levels and transition probabilities for boron-like Fe XXII*, *A&A* **455**, 1157 (2006).

14. A. K. Bhatia and G. A. Doschek, *Atomic data and spectral line intensities for C-like Ne V*, At. Data Nucl. Data Tables **55**, 315 (1993).
15. P. Jönsson, X. He, C. Froese Fischer, and I. P. Grant, *The grasp2K relativistic atomic structure package*, Comput. Phys. Commun. **177**, 597 (2007).
16. P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I. P. Grant, *New version: GRASP2K relativistic atomic structure package*, Comput. Phys. Commun. **184**, 2197 (2013).
17. Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team (2011). NIST Atomic Spectra Database (ver. 4.1.0), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2012, January 13]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
18. M. J. Vilkas, Y. Ishikawa, *Relativistic multireference Möller-Plesset perturbation theory calculations for the term energies and transition probabilities of ions in the nitrogen isoelectronic sequence*, Advances in Quantum Chemistry **39**, 261 (2001).
19. A. K. Bhatia, J. F. Seely, and U. Feldman, *Atomic data and spectral line intensities for the nitrogen isoelectronic sequence (Ar XII through Kr XXX)*, At. Data Nucl. Data Tables **43**, 99 (1989).
20. S. N. Nahar, *Atomic data from the Iron Project*, A&A **413**, 779 (2004).
21. 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, *Energy levels and transition probabilities for nitrogen-like Fe XX* A&A **433**, 745 (2005).
22. M. J. Vilkas, Y. Ishikawa, and K. Koc, *Relativistic multireference many-body perturbation theory for quasidegenerate systems: Energy levels of ions of the oxygen isoelectronic sequence*, Phys. Rev. A **60**, 2808 (1999).
23. U. I. Safronova and A. S. Shlyaptseva, *Inner-shell excitation energies and autoionization rates for C-, N-, O-, and F-like ions with $Z = 654$* , Phys. Scr. **60**, 36 (1999).
24. G. Gaigalas, J. Kaniauskas, R. Kisielius, G. Merkelis, and M. J. Vilkas, *Second-order MBPT results for the oxygen isoelectronic sequence*, Phys. Scr. **49**, 135 (1994).
25. E. Landi and M. F. Gu, *Atomic data for high-energy configurations in Fe XVII-XXIII*, ApJ **640**, 1171 (2006).
26. V. Jonauskas, 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, *Dirac-Fock energy levels and transition probabilities for oxygen-like Fe XIX*, A&A **424**, 363 (2004).
27. G. I. Tachiev and C. Froese Fischer, *Breit-Pauli energy levels and transition rates for nitrogen-like and oxygen-like sequences*, A&A **385**, 716 (2002).
28. G. Merkelis, M. J. Vilkas, R. Kisielius, G. Gaigalas, and I. Martinson, *Electric dipole transitions in ions of the N I isoelectronic sequence*, Phys. Scr. **56**, 41 (1997).

29. G. Merkelis, I. Martinson, R. Kisielius, and M. J. Vilkas, *Ab initio calculation of electric quadrupole and magnetic dipole transitions in ions of the N I isoelectronic sequence*, Phys. Scr. **59**, 122 (1999).
30. E. Träbert, A. G. Calamai, J. D. Gillaspay, G. Gwinner, X. Tordoir, and A. Wolf, *Intercombination and forbidden transition rates in C- and N-like ions (O^{2+} , F^{3+} , and S^{9+}) measured at a heavy-ion storage ring*, Phys. Rev. **62**, 022507 (2000).
31. E. Träbert, P. H. Heckmann, W. Schlagheck, and H. v. Buttlar, *Beam-foil lifetime studies of highly ionized silicon*, Phys. Scr. **21**, 27 (1980).
32. C. Froese Fischer and G. Tachiev, MCHF/MCDHF Collection, Version 2, Ref. No., Available online at <http://physics.nist.gov/mCHF>. (2012). National Institute of Standards and Technology.
33. A. G. Calamai, G. Gwinner, X. Tordoir, E. Träbert, and A. Wolf, *Electric quadrupole and magnetic dipole transition probabilities within the ground configuration of F^+* , Phys. Rev. A **61**, 062508 (2000).
34. A. Daw, W. H. Parkinson, P. L. Smith, and A. G. Calamai, *Transition probabilities for the 1815 and 3344Å forbidden lines of Ne III*, Astrophys. J. Lett. **533**, 179 (2000).
35. E. Träbert, A. Wolf, X. Tordoir, E. H. Pinnington, E. J. Knystautas, G. Gwinner, A. G. Calamai, and R. L. Brooks, *Lifetime of metastable Ne^{2+} ions measured at a heavy-ion storage ring*, Can. J. Phys. **79**, 145 (2001).
36. E. Träbert, A. Wolf, E. H. Pinnington, J. Linkemann, E. J. Knystautas, A. Curtis, N. Bhattacharya, and H. G. Berry, *Heavy-ion storage ring measurement of forbidden transition rates between ground-configuration levels in Si^{6+} and Si^{8+} ions*, Can. J. Phys. **76**, 899 (1998).
37. E. Träbert, M. Grieser, J. Hoffmann, C. Krantz, R. Repnow, and A. Wolf, *Heavy-ion storage-ring-lifetime measurement of metastable levels in the C-, N-, and O-like ions of Si, P, and S*, Phys. Rev. A **85**, 042508 (2012).
38. L. Yang, D. A. Church, S. Tu, and J. Jin, *Measured lifetimes of selected metastable levels of Ar^{q+} ions ($q=2, 3, 9, \text{ and } 10$) stored in an electrostatic ion trap*, Phys. Rev. A **50**, 177 (1994).
39. E. Landi, *Radiative transition probabilities in the O-like sequence*, A&A **434**, 365 (2005).
40. S. N. Nahar, *Oscillator strengths and transition probabilities for allowed and forbidden transitions in Fe XIX*, At. Data Nucl. Data Tables **97**, 403 (2011).
41. S. Verdebout, P. Jönsson, G. Gaigalas, M. Godefroid, and C. Froese Fischer, *Exploring biorthonormal transformations of pair-correlation functions in atomic structure variational calculations*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **43**, 074017 (2010).

42. Z.-C. Yan and G. W. F. Drake, *Theoretical lithium 2^2S-2^2P and 2^2P-3^2D oscillator strengths*, Phys. Rev. A **52**, R4316 (1995).
43. Z.-C. Yan, D. K. McKenzie, and G. W. F. Drake, *Variational calculations of the Fermi contact term for the 2^2S , 2^2P , and 3^2S states of Li and the 2^2S state of Be^+* , Phys. Rev. A **54**, 1322 (1996).
44. B. Edlén, H. Palenius, K. Bockasten, R. Hallin, and J. Bromander, *Spin forbidden resonance multiplets in light elements*, Sol. Phys. **9**, 432 (1969).
45. A. E. Kramida and A. N. Ryabtsev, *A critical compilation of energy levels and spectral lines of neutral boron*, Phys. Scr. **76**, 544 (2007).

Summary

The main goals of the study are: to develop the biorthogonal orbital method for calculation of energies and other important atomic data; to obtain more accurate atomic data (energy levels, transition rates, and lifetimes) using *ab initio* method.

The doctoral dissertation consists of six chapters. Chapter 1 introduces the main goals, main tasks of the study and statements presented for defence. Chapter 2 is designed to describe theoretical methods that were used in the thesis. There is also an account of the newly developed Partitioned Correlation Function Interaction (PCFI) method based on biorthogonal transformations and the modifications in spin-angular part that were needed.

The other three chapters are devoted to presenting the results obtained in the dissertation. Each of them has a scientific review of the research and importance. Also the results obtained in this work are compared with other authors' theoretical and experimental data. Chapter 3 presents the calculation of spectroscopic data (such as energy levels, transition probabilities, and lifetimes) of boron, carbon, nitrogen and oxygen isoelectronic sequences. Such data are needed in astrophysics, for the examination of the phenomena occurring in the plasma. Chapter 4 presents the results of the W^{24+} calculations: energy spectra structure, the strongest electric dipole transitions, and the lifetimes. Tungsten is used as a wall material for existing and planned constructions of fusion reactors. It is therefore necessary for the tungsten ion energy spectra and other characteristics, in order to control the tungsten ions in fusion plasma. In Chapter 5 applications of PCFI approach are presented for lithium and boron. For neutral boron the $2s^2 2p^2 \ ^2P^o$ and $2s 2p^2 \ ^4P$ transition energy was calculated using MCHF and PCFI methods. Chapter 6 presents the conclusions of the study.

Trumpos žinios apie doktorantą:

Vardas, pavardė: Pavel Rynkun

Gimimo data: 1984-12-01

Gyvenamoji vieta: Vilniaus raj., Mickūnų sen., Uosininkų I km., Vilianovo g. 4

E-paštas: pavel.rynkun@gmail.com, pavel.rynkun@vu.tfai.lt

Išsilavinimas: aukštasis universitetinis

2009 – 2013 m. doktorantūros studijos Lietuvos edukologijos universitete;

2009 m. Vilniaus pedagoginiame universitete įgytas fizikos magistro laipsnis;

2007 m. Vilniaus pedagoginiame universitete įgytas fizikos bakalauro laipsnis ir mokytojo kvalifikacija;

Darbo patirtis: nuo 2012 m. jaunesnysis mokslo darbuotojas Teorinės fizikos ir astronomijos institute, Vilniaus universitetas;

2010 – 2012 m. vyresnysis laborantas Fizikos ir technologijos fakultete, Lietuvos edukologijos universitetas;

2007 – 2008 m. fizikos mokytojas Vilniaus raj. Lavoriškių ir Kalvelių Stanislavo Moniuškos vidurinėse mokyklose.