

VILNIAUS UNIVERSITETAS
TEORINĖS FIZIKOS IR ASTRONOMIJOS INSTITUTAS

OLIVER SCHARF

Hipersmulkiųjų saveikų
daugiaelektroniuose atomuose teorijos
plėtojimas

DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA
FIZINIAI MOKSLAI, FIZIKA (02P)

VILNIUS, 2006

Disertacija rengta 2002–2006 Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institute.
Doktorantūros teisė suteikta su Vilniaus universitetu, 1998 04 14 Lietuvos Respublikos Vyriausybės nutarimas
Nr. 457.

Mokslinis vadovas

Zenonas RUDZIKAS, prof. habil. dr. (Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas,
fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Konsultantas

Gediminas GAIGALAS, prof. habil. dr. (Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas,
fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Doktorantūros komitetas

Pirmininkas

Bronislovas KAULAKYS, prof. habil. dr. (Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas,
fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Nariai

Romualdas KARAZIJA, prof. habil. dr. (Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas,
fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Gintautas KAMUNTAVIČIUS, prof. habil. dr. (Vytauto Didžiojo universitetas, fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Algirdas AUDZIJONIS, prof. habil. dr. (Vilniaus pedagoginis universitetas, fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Kazimieras GLEMŽA, doc. (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Oponentai

Pavelas BOGDANOVIČIUS, prof. habil. dr. (Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas,
fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Dalis BALTRŪNAS, habil. dr. (Fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika, 02P)

Disertacija bus ginama viešame doktorantūros posėdyje, kuris vyks 2006 m. kovo 17 d. val.

Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos instituto salėje.

Adresas: A. Goštauto g. 12, 01108 Vilnius, Lietuva. Tel. 2620939, faks. 2125361

Disertacijos santrauka išsiųsta 2006 m. vasario d.

Su disertacija galima susipažinti Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos instituto bibliotekoje.

VILNIUS UNIVERSITY
INSTITUTE OF THEORETICAL PHYSICS AND ASTRONOMY

OLIVER SCHARF

On the Theory of Hyperfine Structure of Many-Electron Atoms

SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION
PHYSICAL SCIENCES, PHYSICS (02P)

VILNIUS, 2006

The dissertation has been accomplished in 2002 – 2006 at Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius, Lithuania.

The Institute is entitled to give a doctorate with Vilnius University, following resolution No. 457 adopted by the Government of the Republic of Lithuania, April 14, 1998.

Scientific supervisor

Zenonas RUDZIKAS, prof. habil. dr. (Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Physical sciences, Physics, 02P)

Consultant

Gediminas GAIGALAS, prof. habil. dr. (Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Physical sciences, Physics, 02P)

The Doctorate Committee

Chairman

Bronislovas KAULAKYS, prof. habil. dr. (Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Physical sciences, Physics, 02P)

Members

Romualdas KARAZIJA, prof. habil. dr. (Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Physical sciences, Physics, 02P)

Gintautas KAMUNTAVIČIUS, prof. habil. dr. (Vytautas Magnus University, Physical sciences, Physics, 02P)

Algirdas AUDZIJONIS, prof. habil. dr. (Vilnius Pedagogical University, Physical sciences, Physics, 02P)

Kazimieras GLEMŽA, dr. (Vilnius University, Physical sciences, Physics, 02P)

Opponents

Pavelas BOGDANOVIČIUS, prof. habil. dr. (Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Physical sciences, Physics, 02P)

Dalis BALTRŪNAS, habil. dr. (Institute of Physics, Physical sciences, Physics, 02P)

This thesis is scheduled to be maintained at on March 17th, 2006 at Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Address: A. Goštauto 12, 01108 Vilnius, Lithuania.

The thesis summary was posted on February, 2006.

The copies of the entire thesis are exposed at the library of Vilnius University Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Išvadas

Išsiplėtojus didelės skiriamosios gebos spektroskopijai XX a. amžiaus pabaigoje, buvo pastebėta papildoma daugelio atomų ir jonų spektrinių linijų struktūra, paprastai šimtą kartų mažesnė nei smulkioji struktūra. Dalis tų linijų atsiranda dėl skirtingų cheminio elemento izotopų branduolių masių ir tūrių skirtumo. Tačiau vien izotopinis poslinkis negali paaiškinti visų pastebėtų linijų. Papildomos hipersmulkiosios struktūros linijos atsiranda dėl tarp branduolio statinių magnetinio ir elektrinio laukų ir elektronų apvalkalo magnetinių ir elektrinių laukų energijos sąveikos. Suskilimas dėl šios sąveikos energijos E_{hfs} labai tiksliai yra aprašomas Casimir'o formule [1]:

$$E_{\text{hfs}} = \frac{1}{2} C A + \frac{3}{4} \frac{C(C+1) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} B, \quad (1)$$

kurioje $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$. To suskilimo dydis yra proporcingas vadinamajam A daugikliui j šiek tiek patikslinant atsižvelgus į B parametą. Tolesni patikslinimai, išskyrus specialius atvejus, yra dar mažesni ir į juos retai atsižvelgiama. Hipersmulkiosios struktūros linijų skaičių galima gauti iš branduolio judėjimo kiekio momento I ir elektronų rezultatinio momento J vektorinės sudėties į galutinį momentą F ir fotono spinduliuotės atrankos taisyklių. Šiuolaikiniai eksperimentiniai metodai leidžia matuoti praktiškai bet kurio atomo ir jono spektrinių linijų suskilimą, įskaitant ekstremalius jonizacijos laipsnius. Dėl didelio hipersmulkiosios struktūros linijų matavimų tikslumo jos tampa idealiais kalibravimo ir dažnių standartais visame spektriniame intervale. Pvz., sekundės apibrėžimas remiasi cezio izotopo ^{133}Cs smulkiosios struktūros lygmens $^2\text{S}_{1/2}$ hipersmulkiojo suskilimo lygmenimis $F = 4$ ir $F = 3$. Šis šuolis išmatuotas ir apibrėžtas kaip dažnio standartas $\Delta\nu \equiv 9\,192\,631\,770$ Hz [2]. Kita plačiai žinoma hipersmulkiosios struktūros linija atitinka vandenilio pagrindinės būsenos magnetinį dipolinį šuolį tarp hipersmulkiosios struktūros lygmenų $F = 1$ ir $F = 0$. Tai yra 21 cm^{-1} linija, kurios spinduliavimo erdvinis pasiskirstymas Visatoje pirmą kartą parodė Paukščių Tako spiralinę sandarą. Nuo to laikotarpio hipersmulkiosios struktūros tyrimai tampa vis svarbesni analizuojant šiuolaikinius astronominius spektrus [3, 4].

Detalios spektrinių linijų sandaros žinojimas iš esmės padeda interpretuoti ir analizuoti didelės skiriamosios gebos spektrus. Turint tikslias A ir B parametų vertes, galima efektyviai interpretuoti linijų formas, identifikuoti šuolius tarp smulkiosios struktūros linijų sudėtinguose spektruose, kontroliuoti spektro linijų identifikavimą. Pvz., nauji gerai žinomo niobio elemento hipersmulkiosios struk-

tūros matavimai atskleidė, kad standartinėse smulkiosios struktūros lygmenų lentelėse yra klaidingų lygmenų identifikavimo atvejų [5].

Hipersmulkiųjų sąveikų energija E_{hfs} gali būti užrašyta kaip branduolinės $\mathbf{M}^{(k)}$ ir elektronės $\mathbf{T}^{(k)}$ dalių [6] atrištoji sandauga

$$E_{\text{hfs}} = \langle JIF || \mathbf{M}^{(k)} \cdot \mathbf{T}^{(k)} || JIF \rangle$$

$$= \sum_{k=1} (-1)^{J+I+F} \left\{ \begin{array}{ccc} J & I & F \\ I & J & k \end{array} \right\} \langle I || \mathbf{M}^{(k)} || I \rangle \langle J || \mathbf{T}^{(k)} || J \rangle. \quad (2)$$

Tiksliai branduolinių multipolinių momentų išraiškas galima rasti [7] darbe. Branduolio magnetinis dipolinis ($k = 1$) momentas, sutrumpintai žymint jo funkciją $|IM_I\rangle$, gali būti išreikštas kaip matricinis elementas, kurio suminis sukinijs yra I ir jo projekcija $M_I = I$:

$$\mu_I \equiv \langle II | \mathbf{M}_m^{(1)} | II \rangle. \quad (3)$$

Elektrinis kvadrupolinis momentas ($k = 2$) tuomet lygus

$$Q \equiv 2 \langle II | \mathbf{M}_e^{(2)} | II \rangle. \quad (4)$$

Šiame darbe naudojamos eksperimentinės branduolinių dalių vertės. Daugelio atomų didelės apimties branduolio magnetinių dipolinių ir elektrinių kvadrupolinių momentų lentelės publikuotos [8].

Taikant judėjimo kiekio momento teoriją galima išreikšti magnetinę dipolinę konstantą A ir elektrinę kvadrupolinę konstantą B elektronų tenzorinių operatorių $\mathbf{T}_m^{(1)}$, $\mathbf{T}_c^{(1)}$ ir $\mathbf{T}_e^{(2)}$ submatriciniais elementais:

$$A_J = \frac{\mu_I}{I} \frac{1}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \langle J || \mathbf{T}_m^{(k_l k_s)1} + \mathbf{T}_c^{(k_l k_s)1} || J \rangle, \quad (5)$$

$$B_J = Q \sqrt{\frac{4J(2J-1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \langle J || \mathbf{T}_e^{(k_l k_s)2} || J \rangle. \quad (6)$$

Atomo banginė funkcija sutrumpintai pažymėta $|J\rangle$. Tokios formulės tinka bet kuriam atomui, turinčiam bet kokią atvirų elektronų sluoksnių skaičių. Detalesnes elektroninių dalių $\mathbf{T}^{(k)}$ išraiškas galima rasti [9].

A parametras yra branduolio statinio magnetinio momento ir elektronų magnetinio lauko sandauga (žiūr. f-lę (5)). Branduolio magnetinis momentas gali būti išmatuotas tiesiogiai naudojant atomų pluoštelio magnetinio rezonanso

technika, taigi netiriant hipersmulkiosios sąveikos. Tuomet elektronų magnetinis laukas gali būti apskaičiuotas pasitelkiant atomo banginę funkciją.

B parametras yra branduolio kvadrupolinio momento ir elektronų elektrinio lauko gradiento sandauga (žiūr. f-lę (6)). Nėra eksperimentinio būdo tiesiogiai išmatuoti branduolio kvadrupolinius momentus, todėl daugiausiai informacijos apie juos yra gaunama iš hipersmulkiosios struktūros teorinių tyrimų.

Teorinių ir eksperimentinių hipersmulkųjų sąveikų duomenų palyginimas yra tikslus būdas įvertinti reliatyvistinių ir koreliacinių efektų vaidmenį, o kartu ir atomo banginės funkcijos tikslumą.

Artėjant nanotechnologijų erai tikslios banginės funkcijos tampa vis svarbesnės siekiant patenkinti augančius atomų ir jonų įvairių fizikinių savybių poreikius. Per pastaruosius du dešimtmečius pasiekta didelė pažanga plėtojant atomų banginių funkcijų metodus bei kuriant atitinkamus programų paketus [10, 11]. Dabar galima atlikti sudėtingus reliatyvistinius skaičiavimus ir gauti gana tikslius rezultatus [12, 13], tačiau tokie tyrimai reikalauja labai didelės skaičiavimų apimties.

Šiandieninė pažanga atliekant plačius daugiakonfigūracinius ir konfigūracijų superpozicijos skaičiavimus, naudojant modernius galingus kompiuterius, leidžia gauti labai didelio tikslumo lengvųjų atomų hipersmulkiosios struktūros rezultatus [14, 15]. Tačiau sunkiesiems elementams ir atomams, turintiems daug stipriai koreliuotų elektronų, kyla daug įvairių problemų ir hipersmulkiosios struktūros *ab initio* tyrimai tokiu atveju tebelieka didžiulis iššūkis teoretikams.

Didžiausias sunkumas, kylantis vykdant daugiakonfigūracinius skaičiavimus, – rasti efektyvų būdą konfigūracijų būsenų funkcijoms generuoti. Praktiniuose skaičiavimuose, ypač sunkiesiems elementams, jų skaičių riboja turimų kompiuterių atmintis, konvergavimo problemos ir kitos kompiuterių ir jų matematinės įrangos galimybės. Konfigūracijų būsenų skaičius turi būti protingai ribojamas, tačiau būtina atsižvelgti į daugumą pačių svarbiausių koreliacinių efektų. Tai pasiekti yra daug įvairių kelių priklausomai nuo tiriamos atomo charakteristikos pobūdžio.

Hipersmulkiosios sąveikos atveju bene plačiausiai buvo naudojami [16] ir [17] darbuose aprašyti metodai. Tačiau jie buvo taikomi tik atomams ir jonams, turintiems vieną ar du išorinius (valentinius) elektronus. Sudėtingesniems atomams nebuvo atsižvelgiama į kamieno koreliacijas, ir skirtumas nuo eksperimentinių rezultatų išaugo iki 100% [18, 19]. Pastaraisiais metais daugiausia dėmesio buvo skiriama įvertinti B parametras, kuriam koreliaciniai efektai nėra

labai svarbūs [20]. Siekiant gauti didesnio tikslumo A parametro vertes sunkiesiems atomams, reikia detalesnės informacijos apie koreliacinius efektus.

Darbo tikslas

Darbo tikslas – išplėtoti daugiakonfigūracinius hipersmulkiosios struktūros tyrimus į sudėtingų daugiaelektronių atomų ir jonų sritį. Darbe siekiama parengti bendrą tokių tyrimų metodą, įgalinantį išskirti svarbiausius koreliacinius efektus ir įvertinti hipersmulkiosios struktūros parametrų paklaidas daug išorinių (valentinių) elektronų turintiems atomams ir jonams.

Pagrindiniai darbo uždaviniai

Šiam tikslui pasiekti reikalingos efektyvesnės laiko atžvilgiu programos, modernios kompiuterių galimybės bei metodai aprašyti koreliacijas, kurios yra svarbios hipersmulkiajai struktūrai. Todėl formuluojami tokie darbo uždaviniai:

1. Naujausią Racah algebros versiją pritaikyti hipersmulkiausias sąveikas aprašantiems operatoriams $T^{(k_1 k_2) k}$. Transformuoti atitinkamas A ir B parametrų išraiškas iš koordinatinio į antrinio kvantavimo atvaizdavimą atsižvelgiant į kvazisukinio erdvę. Naudojant grafinį metodą gauti galutines A ir B daugiklių išraiškas, aprašančias sudėtingus daugiaelektronus atomus ar jonus, turinčius bet kokį atvirų elektronų sluoksnių skaičių. Tos išraiškos turėtų turėti mažiausią standartinių dydžių (pilnai redukuotų kilminių koeficientų) skaičių.
2. Remiantis RACAH ir JUCYS atomo struktūros skaičiavimų matematine įranga, gautąsias formules išreikšti MAPLE [21] simbolinio programavimo kalba. Naudojantis tomis išplėtotomis elektroninėmis programų sistemomis, sukurti hipersmulkiosios struktūros programų paketą HFS, kuris leistų efektyviai perdirbti ir detalizuoti hipersmulkiausias sąveikas aprašančias išraiškas.
3. Remiantis simbolinio programavimo HFS paketą kūzimo patirtimi, įdiegti integravimo techniką sukininių ir kampinių kintamųjų atžvilgiu į didelės apimties skaičiavimams skirtą ATSP paketo HFS modulį.

4. Įdiegti Vilniaus pedagoginio universiteto BENDROSIOS FIZIKOS KATEDROS kompiuterių spiečiuje parengtą matematinę įrangą daugiakonfigūracinėms banginėms funkcijoms rasti ir patikrinti jos veikimo patikimumą.
5. Parengti ir testuoti konfigūracijų būsenų erdvės generavimo mechanizmą. Metodika turi atsižvelgti į priklausomybę nuo įvairių koreliacijų tipų, turi galėti įvertinti metodo konvergavimą bei hipersmulkiosios struktūros skaičiavimų paklaidas.

Mokslinis naujumas

1. Naujos magnetinių dipolinių ir elektrinių kvadrupolinių parametrų išraiškos galioja bet kuriam atomui ar jonui, turinčiam bet kokį atvirų elektronų sluoksnių skaičių, ir turi minimalų standartinių dydžių (redukuotų kilminių koeficientų) rinkinį.
2. Remiantis nauja programavimo paradigma, RACA ir JUCYS atomo struktūros skaičiavimų matematinė įranga buvo išplėsta įtraukiant svarbių sukinių ir kampinių viendalelių išraiškų integravimo bloką. Tas paketas ne tik generuoja standartines atominių struktūrų teorijos charakteristikas, bet taip pat įgalina atlikti ir simbolinius veiksmus su judėjimo kiekio momento teorijos dydžiais bei juos apskaičiuoti.
3. Praktiniams uždavinių sprendimams buvo naudojamas penkių modų spiečius, sudarantis sąlygas atlikti labai didelės apimties skaičiavimus. Kartu su patobulinta hipersmulkiosios struktūros skaičiavimo programa buvo naudojamas naujas sudėtingų daugiaelektronių atomų hipersmulkiosios struktūros nuoseklių studijų algoritmas. Palyginti su kitais metodais, reikia padaryti mažiau papildomų prielaidų, bet gaunama daugiau informacijos apie koreliacijų įtaką ir jų konvergavimą.

Ginamieji teiginiai

1. Gautos hipersmulkiosios struktūros parametrų išraiškos tinka bet kuriam atomui ar jonui, turinčiam bet kokį atvirų elektronų sluoksnių skaičių. Jos įgalina tiesiogiai atsižvelgti į koreliacinius efektus ir reikalauja mažiau skaičiavimo laiko negu iki šiol žinomos formulės fizikiniams rezultatams gauti.

2. Išplėtota RACA ir JUCYS atomo struktūros skaičiavimų matematinė įranga kartu su hipersmulkiųjų sąveikų paketu HFs yra labai naudingos teoriniams ir eksperimentiniams atomų spektrų tyrimams. Hipersmulkiųjų sąveikų atveju jos leidžias lengvai rasti hipersmulkiąją linijų struktūrą aprašančias formules bei jos skaitines vertes – tiek *ab initio*, tiek ir pusiauempiriškai. Parengta metodika gali būti nesunkiai pritaikyta kitoms fizikinėms problemoms nagrinėti.
3. Pasiūlytas hipersmulkiųjų sąveikų teorinio tyrimo algoritmas leidžia įvairiai aproksimuoti konfigūracijų būsenų funkcijų erdvę, nagrinėti įvairių koreliacijų konvergenciją ir įtaką bei įvertinti skaičiavimų paklaidas.
4. Metodas ir programos leidžia tirti sudėtingų atomų ir jonų hipersmulkiąją struktūrą ir naudojant šiuolaikinių kompiuterių spiečius gauti gana didelio tikslumo rezultatus.

Autoriaus indėlis

Autorius savarankiškai atliko disertacijoje aprašytus teorinius tyrimus. Jis išplėtė JUCYS ir HFs paketų galimybes, parengė efektyvų būdą teoriškai tirti hipersmulkiąją struktūrą, atliko skaičiavimus, jų analizę ir suformulavo išvadas.

Prof. Z. Rudzikas: bendras vadovavimas, konsultacijos šiuolaikinės atomo teorijos ir kvazisukinio klausimais.

Prof. G. Gaigalas: bendros konsultacijos sukininių ir kampinių kintamųjų technikos, daugiakonfigūracinio artutinumo ir praktinių skaičiavimų klausimais. Jis nemažai prisidėjo prie ATSP paketo HFs programos rašymo.

ATSP ir GRASP paketų instaliavimas buvo atliktas bendradarbiaujant su C. Froese Fischer (NIST, JAV).

Jucys blokas buvo tobulinamas bendradarbiaujant su S. Fritzsche (Kaselio technikos universitetas, Vokietija).

Pasiūlymai dėl HFs paketo naudojimo eksperimentiniuose hipersmulkiosios struktūros tyrimuose bei niobio hipersmulkiosios struktūros tyrimai buvo atlikti kartu su S. Kröger (Berlyno technikos universitetas) ir G. Guthöhrlein (Bundesvero universitetas, Hamburgas).

Disertacijos struktūra

Disertacija sudaryta iš penkių skyrių. Pirmame pateikta trumpa hipersmulkiosios struktūros tyrimų istorinė apžvalga. Detaliau analizuojami naudojami metodai, daugiakonfigūracinio artutinumo teoriniai pagrindai ir banginės funkcijos konstravimas atsižvelgiant į kvazisukinio simetriją. Remiantis egzistuojančiomis teorijomis, antrame skyriuje išvestos naujos universalios hipersmulkiosios struktūros operatorių matricinių elementų išraiškos. Detalesnės formulės pateiktos dviejų atvirų elektronų sluoksnių atvejui. Trečiame skyriuje aprašytos kompiuterinės programos, leidžiančios teoriškai tirti šias sąveikas remiantis anksčiau gautomis bendromis formulėmis. Ketvirtame skyriuje naujasis algoritmas pritaikytas vanadžio atomo pagrindinės būsenos hipersmulkiajai struktūrai tirti naudojant tiek daugiakonfigūracinius Hartrio ir Foko, tiek Dirako ir Foko artutinius. Paskutiniame skyriuje pateikiamos išvados ir trumpai formuluojamos tyrimų perspektyvos.

Trumpas skyrių turinys

1 skyrius. Istorinis ir teorinis pagrindas

Hipersmulkiosios struktūros tyrimams labiausiai buvo plėtojami pusiauempiriai, trikdžių teorijos ir daugiakonfigūraciniai metodai. Tarp pastarųjų dažniausiai naudojami daugiakonfigūraciniai Hartrio ir Foko bei Dirako ir Foko artutiniai. Trumpai aptariama jų istorija ir pateikiami skaičiavimų pavyzdžiai.

Elektronų orbitalių radialiosios dalys yra apskaičiuojamos naudojant daugiakonfigūracinį artutinumą. Jos yra daugiakonfigūracinių Hartrio ir Foko ar reliatyvistinių Dirako ir Foko lygčių suderintiniai sprendiniai (žiūr. [22] ir ten cituojamus šaltinius). Apžvelgti tie modeliai ir jų sudarymui pasitelkiamos prielaidos.

Apžvelgiama standartinė pilnos antisimetrinės konfigūracijų būsenų funkcijos $|nl^{NLS}\rangle$ konstravimo procedūra antrinio kvantavimo atvaizdavime atsižvelgiant į kvazisukinio erdvę ir radialiąsias dalis.

2 skyrius. Hipersmulkiosios struktūros teorija

Atitinkamos hipersmulkiosios struktūros išraiškos koordinatiniame atvaizdavime buvo gautos [9]. Šiame darbe jos transformuotos į antrinio kvantavimo

atvaizdavimą papildomai atsižvelgiant į kvazisukinį. Pilnai redukuota (orbitinėje, sukinio ir kvazisukinio erdvėse) surišta tenzorinė šių operatorių forma buvo gauta ir pateikiama darbe.

Galutinė elektrinio multipolinio hipersmulkiosios struktūros operatoriaus išraiška yra tokia (plg. (6)):

$$\mathbf{F}_e = \mathbf{T}_e^{(k)} = i^k \sum_{n_i l_i, n_j l_j} [k]^{-1/2} \langle l_i \| \mathbf{C}^{(k)} \| l_j \rangle \times \langle n_i l_i \| r^{-k-1} \| n_j l_j \rangle \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_i s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_j s)} \right]^{(k0)k}. \quad (7)$$

Analogiški magnetiniai dipoliniai hipersmulkiosios struktūros operatoriai atrodo taip (plg. (5)):

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{T}_c^{(1)} = \frac{\alpha^2}{2\sqrt{2}} \sum_{n_i l_i, n_j l_j} \sqrt{(2l_i + 1)} \langle n_i l_i \| \frac{2}{3} r^{-2} \delta(r) \| n_j l_j \rangle \times \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_i s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_j s)} \right]^{(01)1} \delta(l_i, 0) \delta(l_j, 0) \quad (8)$$

ir

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_m = \mathbf{T}_m^{(k)} = & -i^{k+1} \frac{\alpha^2}{2k\sqrt{k}} \sum_{n_i l_i, n_j l_j} \sqrt{(l_i + l_j + k + 1)(l_j + k - l_i)} \\ & \times \sqrt{(l_i + k - l_j)(l_i + l_j - k + 1)} \langle l_i \| \mathbf{C}^{(k-1)} \| l_j \rangle \\ & \times \langle n_i l_i \| r^{-k-2} \| n_j l_j \rangle \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_i s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_j s)} \right]^{(k0)k} \\ & - \frac{1}{2} \alpha^2 i^{k+3} \sqrt{\frac{(k+1)}{2}} \sum_{n_i l_i, n_j l_j} \langle l_i \| \mathbf{C}^{(k+1)} \| l_j \rangle \\ & \times \langle n_i l_i \| r^{-k-2} \| n_j l_j \rangle \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_i s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_j s)} \right]^{(k+1)k}. \quad (9) \end{aligned}$$

Sferinio tenzorius $\mathbf{C}^{(k)}$ komponentės yra surištos su sferine harmonine funkcija Y_{kq} tokiu būdu:

$$\mathbf{C}_q^{(k)} = \left(\frac{4\pi}{2k+1} \right)^{1/2} Y_{kq}. \quad (10)$$

Elektronų gimimo ir išnykimo operatoriai yra atitinkamai $\mathbf{a}_{1/2}^{(q l s)}$ ir $\mathbf{a}_{-1/2}^{(q l s)}$. Jie tenkina tokią sąlygą:

$$\mathbf{a}_m^{(q)} = \begin{cases} \mathbf{a}^{(ls)} & \text{for } m = 1/2 \\ \tilde{\mathbf{a}}^{(ls)} & \text{for } m = -1/2. \end{cases} \quad (11)$$

Sąveikaujančių elektronų konfigūracijų būsenų funkcijų momentai yra surišti kiekviename sluoksnyje. Sluoksnių rezultatiniai momentai surišami į pilnus momentus. Gautose hipersmulkiųjų sąveikų operatorių išraiškose atrišti momentus galima naudojant galingus grafinius metodus [23]. Tikslios hipersmulkiosios struktūros dydžių A (f-lė (5)) ir B (f-lė (6)) formulės šiame darbe išvestos naudojantis [24] darbo metodika.

Viendalelio neskaliarinio operatoriaus $F^{(k_l k_s)}$ matriciniai elementai tarp konfigūracijos būsenos funkcijų, turinčių u atvirų sluoksnių,

$$|\psi_u(LS)\rangle = |n_1 l_1^{N_1} L_1 S_1 n_2 l_2^{N_2} L_2 S_2 L_{12} S_{12} \dots n_a l_a^{N_a} L_a S_a L_{1\dots a} S_{1\dots a} \dots n_b l_b^{N_b} L_b S_b L_{1\dots b} S_{1\dots b} \dots n_u l_u^{N_u} L_u S_u LS\rangle \quad (12)$$

yra išreiškiami matricinių elementų, kuriuose vienelektronis operatorius veikia į skirtingus sluoksnius, suma, t. y.

$$\langle \psi_u(LS) \| F^{(k_l k_s)} \| \psi'_u(L'S') \rangle = \sum_{n_a, l_a, n_b, l_b} \langle \psi_u(LS) \| F(n_a l_a, n_b l_b) \| \psi'_u(L'S') \rangle, \quad (13)$$

kur

$$\begin{aligned} \langle \psi_u(LS) \| F(n_a l_a, n_b l_b) \| \psi'_u(L'S') \rangle &= (-1)^{\Delta+1} [k_l, k_s]^{-1/2} \\ &\times \mathcal{R}(l_a, l_b, L_a, L_b, L'_a, L'_b, k_l) \mathcal{R}(s, S_a, S_b, S'_a, S'_b, k_s) \\ &\times \left\{ \delta(n_a l_a, n_b l_b) \langle l_a^{N_a} \alpha_a Q_a M_{Q_a} L_a S_a \| \right. \\ &\quad \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_a s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_a s)} \right]^{(k_l k_s)} \| l_a^{N_a} \alpha_a Q_a M_{Q_a} L_a S_a \rangle \\ &\quad + (1 - \delta(n_a l_a, n_b l_b)) \\ &\quad \times \langle l_a^{N_a} \alpha_a Q_a M_{Q_a} L_a S_a \| \mathbf{a}_{1/2}^{(q l_a s)} \| l_a^{N'_a} \alpha_a Q_a M_{Q_a} L_a S_a \rangle \\ &\quad \left. \times \langle l_b^{N_b} \alpha_b Q_b M_{Q_b} L_b S_b \| \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_b s_b)} \| l_b^{N'_b} \alpha_b Q_b M_{Q_b} L_b S_b \rangle \right\} \\ &\times \langle n_a l_a s \| \mathbf{T}^{(k_l k_s)} \| n_b l_b s \rangle. \quad (14) \end{aligned}$$

Galutinės gautosios bendros hipersmulkiosios struktūros išraiškos bet kokiam atvirų sluoksnių skaičiui LS- ryšyje gali būti suskirstytos į tokias dalis:

- perrišimo matricos $\mathcal{R}(l_a, l_b, L_a, L_b, L'_a, L'_b, k_l)$ ir $\mathcal{R}(s, a_b, S_a, S_b, S'_a, S'_b, k_s)$;
- neredukuotinių tenzorinių operatorių $\langle \dots \| \left[\mathbf{a}_{1/2}^{(q l_a s)} \times \mathbf{a}_{-1/2}^{(q l_a s)} \right]^{(k_l k_s)} \| \dots \rangle$ ir $\langle \dots \| \mathbf{a}_{\pm 1/2}^{(q l_b s_b)} \| \dots \rangle$ submatriciniai elementai, išreikšti redukuotais kilminiais koeficientais;

- fazinis daugiklis Δ ;
- vienelektroniai submatriciniai elementai $\langle n_a l_a s \| T^{(k_l k_s)} \| n_b l_b s \rangle$.

Ši formulė detaliai išanalizuota, kai yra du atviri elektronų sluoksniai.

3 skyrius. Metodikos realizavimas kompiuterinėse programose

Darbe sukurtos metodikos pagrindu buvo parašytos dvi kompiuterinės programos, leidžiančios skaičiuoti hipersmulkiąsias atomų būsenų funkcijas. Pagrindinis jų uždavinys yra atlikti skaičiavimus pagal (14) formulę.

Pirmoji programa HFS [25] remiasi MAPLE simbolinio programavimo kalba. Per pastaruosius metus buvo sukurta standartinių judėjimo kiekio momento ir atomo elektronų sluoksnių elektroninė duomenų bazė MAPLE kalba. Ji apima 3nį bei Klebšo ir Gordano koeficientus, taip pat įvairius sferinių funkcijų integralus. Kitų judėjimo kiekio momento dydžių ir funkcijų spartus ir efektyvus skaičiavimas aprašytas [26–29]. Šiame darbe ši matematinė ir programinė įranga yra išplėsta siekiant apimti papildomus atomo elektronų sluoksnių dydžius [30, 31], kurie remiasi antrinio kvantavimo ir kvazisukinio surištame tenzoriniame pavidale koncepcijomis.

Visi šie patobulinimai hipersmulkiųjų sąveikų matriciniams elementams apskaičiuoti padėjo sukurti naują hipersmulkiųjų sąveikų teorinio tyrimo paketą, pavadintą HFS [32]. Jį naudojant, dydžiai A ir B parametrizuojami sukininės ir kampinės α ir radialiosios dalies a pavidalu. Įgyta patirtis eksperimentiškai tiriant niobio hipersmulkiąją struktūrą [5], buvo pritaikyta rengiant duomenų struktūras ir kai kurias kitas procedūras.

Pusiauempiriuose hipersmulkiųjų sąveikų tyrimuose [33] minėti radialieji integralai traktuojami kaip optimizuojami parametrai. Naudojant mažiausių kvadratų metodą, jie suderinami su eksperimentinėmis A ir B vertėmis. Jei to nepavyksta pasiekti, tai reiškia, kad yra klaidingi eksperimentiniai duomenys arba neteisingai identifikuoti energijos lygmenys. Pusiauempiriai ir *ab initio* artutiniai yra sujungti į vieną programų paketą, kuris leidžia efektyviai ir optimaliai teoriškai nagrinėti hipersmulkiąsias sąveikas.

Siekiant testuoti programų paketą ir pademonstruoti jo galimybes buvo pusiauempiriškai atlikta niobio atomo hipersmulkiosios struktūros analizė. Mažiausių kvadratų metodu nustatyti radialieji parametrai yra 1 lentelėje, o galutinės A dydžių vertės – 2 lentelėje. Radialieji parametrai, rasti naudojant HFS paketą, sutampa su rezultatais, gautais [34].

1 lentelė. $4d^45s\ ^6D$ ir $4d^35s^2\ ^4F$ būsenų magnetinės dipolinės sąveikos parametrizavimas mažiausių kvadratų metodu. Radialieji parametrai yra lyginami su analogiškais parametrais, gautais darbe [34].

Radialieji parametrai	Šis darbas [MHz]	Iš [34] [MHz]
$\alpha_{01}^{4d}(4d^35s^2)$	395,1(2)	395,39(0,25)
$\alpha_{01}^{4d}(4d^45s^1)$	351,49(3)	351,67(0,58)
$\alpha_{10}^{4d}(4d^35s^2)$	-224(1)	-225,84(1,97)
$\alpha_{10}^{4d}(4d^45s^1)$	-501(2)	-511,47(30,47)
$\alpha_{10}^{5s}(4d^45s^1)$	6658(7)	6700(118)
$\alpha_{12}^{4d}(4d^35s^2)$	234(3)	238,34(3,19)
$\alpha_{12}^{4d}(4d^45s^1)$	275,5(1)	276,08(2,17)

2 lentelė. $4d^45s\ ^6D$ ir $4d^35s^2\ ^4F$ būsenų A daugiklių parametrizavimas mažiausių kvadratų metodu. Apskaičiuotos A_{calc} vertės palygintos su eksperimentiniais rezultatais iš [34]. Jų skirtumas yra stulpelyje Δ . Paskutiniame stulpelyje yra pateikti [34] darbo pusiauempiriai rezultatai.

Lygmuo	A_{calc} [MHz]	A_{exp} [34] [MHz]	Δ [MHz]	A_{calc} [34] [MHz]
(5D)6D 1/2	1868(8)	1868,218(2)	0,218	1868,217
(5D)6D 3/2	852(4)	852,543(3)	0,543	852,573
(5D)6D 5/2	719(3)	719,476(2)	0,476	719,414
(5D)6D 7/2	690(3)	690,198(2)	0,198	690,248
(5D)6D 9/2	691(2)	691,614(3)	0,614	691,580
4F 3/2	644(1)	644,160(54)	0,16	644,91
4F 5/2	372,4(4)	372,485(2)	0,085	372,485
4F 7/2	292,2(5)	292,202(2)	0,002	292,203
4F 9/2	269,5(8)	269,632(3)	0,132	269,631

Daugiakonfigūracinio Hartrio ir Foko metodo programa MCHF generuoja daugiaelektronio atomo daugiakonfigūracinių banginių funkcijų radialiąsias dalis. Ši programa sujungta su kitomis programomis, kurios integruoja išraiškas sukininių, kampinių ir radialiųjų kintamųjų atžvilgiu, taip suformuojant atomų struktūros paketą ATSP atomų savybėms tirti [10]. Integravimo sukininių ir kampinių kintamųjų atžvilgiu procedūra remiasi [35] darbe aprašyta metodika.

Hipersmulkiajai sąveikai skaičiuoti skirta programa HFs [36], kuri yra ATSP pakete. Joje integravimas sukininių ir kampinių kintamųjų atžvilgiu atliekamas [35] metodu. Darbe naudojama modifikuota HFs programa, kurioje senoji integravimo kampinių ir sukininių kintamųjų atžvilgiu metodika yra pakeista efektyvesne. Ši metodika pateikta 2 skyriuje. Joje naudojami subkilminiai koeficientai, operatoriaus $W^{(k_q k_l k_s)}$ submatriciniai elementai ir $3nj$ koeficientai, randami panaudojant Fortrano biblioteką SAI [37]. Naujoji programa testuota skaičiuojant ličio [38] ir berilio [39] hipersmulkiają struktūrą.

4 skyrius. Daugiakonfigūraciniai *ab initio* skaičiavimai

Šiame skyriuje naujoji hipersmulkiųjų sąveikų skaičiavimo programa buvo panaudota detaliems vanadžio hipersmulkiosios struktūros tyrimams. Tik naujoji programa atvėrė galimybę atlikti tokius detalius tyrimus.

Vanadžio pagrindinės būsenos $3d^3 \text{ } ^4F$ $4s^2 \text{ } ^4F$, lygmenys $J = 3/2$ ir $J = 9/2$ yra labai geri kandidatai patikrinti programų paketą ir pademonstruoti jo privalumus. Energetiškai gerai atskirtos pagrindinės būsenos smulkioji struktūra išmatuota [40] darbe. Pusiauempiriai tyrimai [41] parodė, kad žemų lyginių konfigūracijų elektronai yra nereliatyvistiniai ir nukrypimai nuo LS ryšio yra maži [42]. Nestebima hipersmulkioji anomalija. Todėl daugiakonfigūracinis Hartrio ir Foko artutinumas turėtų gerai tikti.

Vienkonfigūracinis Hartrio ir Foko artutinumas neaprašo kontaktinių sąveikų indėlio, nes visi ns sluoksniai yra užpildyti. Atsižvelgus į koreliacijas, 3d sluoksnis poliarizuos ns sluoksnius. Geras vienkonfigūracinio Hartrio ir Foko rezultatų sutapimas su eksperimentiniais yra atsitiktinis ir liudija apie poliarizacinių efektų kompensaciją ns sluoksniuose. Kadangi vanadis turi 13 elektronų, todėl tikslių hipersmulkiosios struktūros rezultatų gavimas yra didelis iššūkis. Naujasis metodas leidžia efektyviai tirti priemaišinių orbitalių įtaką magnetinei dipolinei sąveikai nuosekliai didinant priemaišinių orbitalių grupių skaičių. Tokiu būdu galima įvertinti artutinumo paklaidas ir gauti detalų koreliacinių efektų vaizdą.

Tai padeda apriboti konfigūracijų būsenų funkcijų erdvę labiausiai įtakojančiomis koreliacinius efektus ir tokiu būdu atverti kelius sudėtingų atomų tyrimams.

Skaičiavimai buvo atlikti naudojant Vilniaus pedagoginio universiteto BENDROSIOS FIZIKOS KATEDROS kompiuterių spiečių. Nauja nepublikuota MCHF atomų struktūros paketo [43] versija, kuri remiasi dinaminio atminties išdėstymu, išsklaidytų matricių metodais ir nauja kampų biblioteka, buvo naudojama atlikti daugiakonfigūracinius Hartrio ir Foko skaičiavimus.

Pirmuose tyrimuose konfigūracijų būsenų funkcijų erdvė, kurioje atsižvelgiama į valentines koreliacijas, buvo sumažinta nuo 25 069 iki 12 630 svarbiausių konfigūracijų būsenų funkcijų. Šis konfigūracijų būsenų skaičiaus sumažinimas buvo atliekamas taip, kad ta konfigūracijų grupė, kurios indėlis yra mažesnis nei 1 MHz, yra neįtraukiama į tolesnius skaičiavimus. Pavyzdžiui, toks konfigūracijų atmetimas $J = 3/2$ lygmeniui duoda 6 MHz paklaidą. Detalus skaičiavimai liudija, kad įvertinta valentinių koreliacijų paklaida yra apie 2%. Pastebėta stipri 3s ir 4s orbitalių kontaktinių sąveikų indėlio kompensacija.

Vėliau buvo nagrinėjama apribota konfigūracijų būsenų funkcijų erdvė kamieno koreliacijoms tirti. 1s sluoksnio kamieno koreliacijų indėlis yra mažesnis nei 1%, ir į jį neatsižvelgiama. Daugiakonfigūracinis artutinumai blogai konverguoja įtraukus paskutinės grupės koreliacines funkcijas. Tokiu atveju konvergencijos paklaida siekia 5%.

Daugiakonfigūraciniai skaičiavimai naudojant bangines funkcijas, atsižvelgiančias į valentines koreliacijas, konverguoja tolygiai 2% tikslumu. Abiem atvejais dvikonfigūracinės būsenų funkcijos, gautos pakeičiant vieną 2s elektroną vienu s elektronu iš antros koreliacinių funkcijų grupės βs ,

$$2s^1 2s^1 S \ 3d^3 3d^3 F \ 3F \ \beta s^2 S \ 4F \quad (15)$$

ir

$$2s^1 2s^1 S \ 3d^3 3d^3 F \ 5F \ \beta s^2 S \ 4F \quad (16)$$

daro stiprų poveikį kontaktiniam nariui.

Valentinės ir kamieno koreliacijos buvo bendrai tiriamos daugiakonfigūraciniu Hartrio ir Foko artutinumumu. Naudota apribotoji konfigūracijų būsenų funkcijų erdvė, ištirta dviejų anksčiau minėtų konfigūracijų būsenų funkcijų įtaka. Orbitiniai, sukinių dipoliniai ir kvadrupoliniai nariai praktiškai nesikeičia

atsižvelgiant į bet kurią iš tų dviejų konfigūracijų būsenų funkciją. Skirtingą A dydžio priklausomybę nuo atsižvelgimo į atskirų funkcijų grupių įtaką lemia tik kontaktinių narių indėlis (1 paveikslas).

Atsižvelgus į kamieno ir valentines koreliacijas, nukrypimai nuo eksperimentinių verčių siekia 15%. Atmetus koreliacines pataisas $2s$ orbitalei, A parametro nukrypimai $J = 3/2$ lygmeniui siekia 10%. Atmetus (15) formulės konfigūracijų būsenų funkciją, teorinė A vertė viršija eksperimentinę 4%, atmetus ir kitą funkciją, A gaunama 4% mažesnė nei eksperimentas.

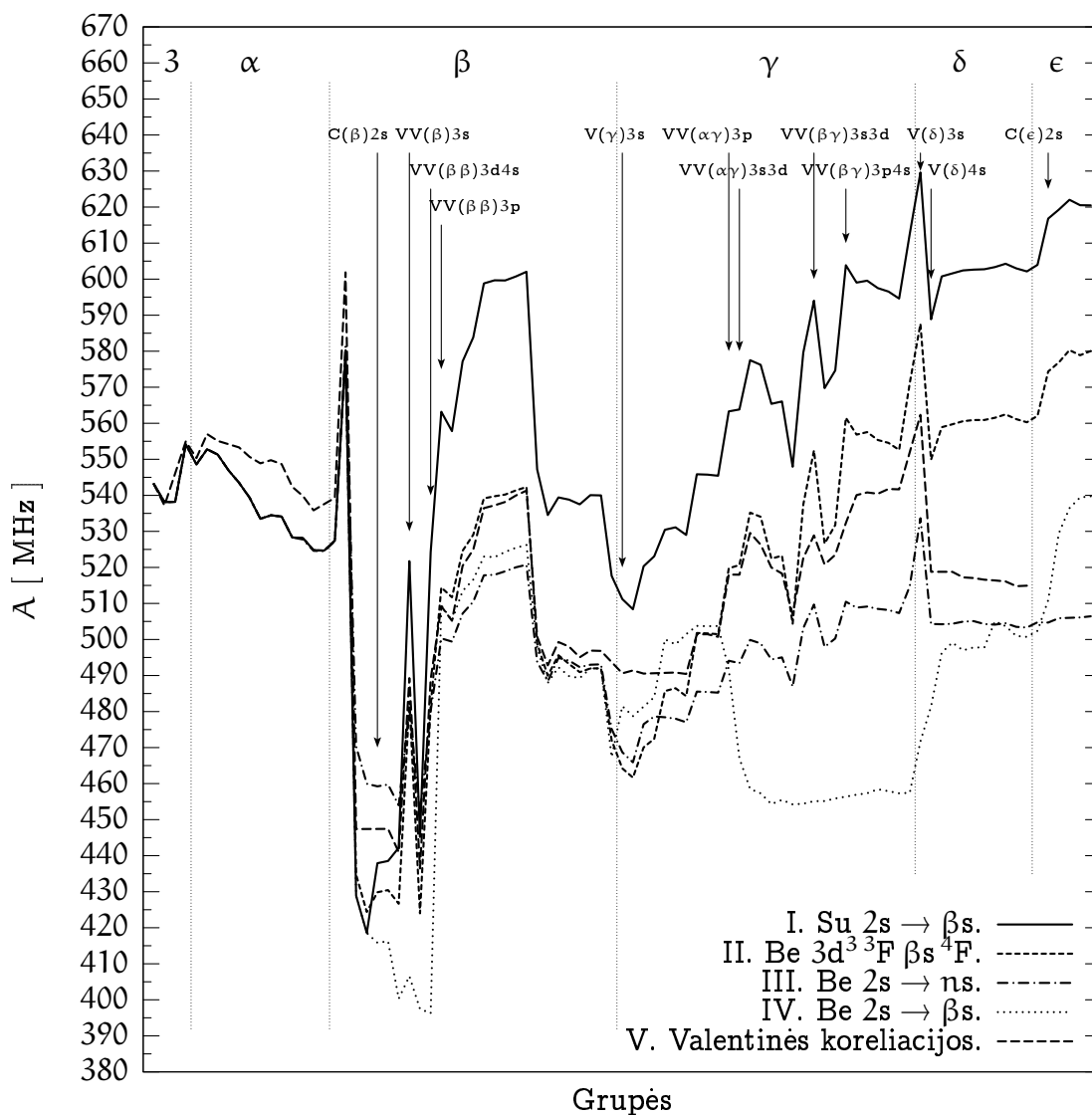
Skirtinga atskirų grupių koreliacinių efektų priklausomybė, kai neatsižvelgima į minėtąsias dvi konfigūracijų būsenų funkcijas, ir grupių konvergencijos eiga gali būti taip paaiškinta. $C(\beta s)2s$ grupės neįskaitymas reikštų, kad kitų orbitalių koreliacijos jau įskaitytos anksčiau ir $C(\beta s)2s$ grupė yra įskaityta kaip $C(\gamma s)2s$. Tai keičia koreliacijas su $2s$ orbitale taip išvengiant stiprios poliarizacijos. Kitais žodžiais, $2s$ poliarizacijos įskaitymas prieš pasirodant kitoms koreliacijoms sukelia stiprią βs orbitalės poliarizaciją. Tolimesnės koreliacinės orbitalės, priklausančios kitai grupei, negali keisti šios jau fiksuotos orbitalės. Tai nulemia blogą $C2s$ grupės konvergenciją ir pervertina A dydžio vertę. Tuo remiantis, tolesniuose skaičiavimuose neatsižvelgsime į minėtąsias dvi konfigūracijų būsenų funkcijas.

Toliau neatsižvelgsime taip pat ir į orbitalių relaksaciją. Kamieno-valentinė koreliacijos buvo įskaitytos konfigūracijų superpozicijos metodu. Šių korelacių konvergencija yra sparti ir jos indėlis į A vertes yra mažesnis nei 1%.

Galutiniuose konfigūracijų superpozicijos skaičiavimuose konfigūracijų grupės, kurios buvo eliminuotos iš konfigūracijų būsenų funkcijų erdvės, palaipsniui vėl įtraukiamos. Stebima gera orbitinių, sukinių dipolinių ir kvadrupolinių narių konvergencija.

Detalūs skaičiavimai leido įvertinti paklaidas, kurias lėmė atskirų grupių konvergencija. Ši A dydžio paklaida yra 5% ir iš esmės apsprendžiama $2s$ kamieno koreliacijos. $1s$ sluoksnio bei trigubų ar aukštesnių sužadinių indėliai neviršija 2%.

Remiantis detalia hipersmulkiųjų sąveikų analize ir taip gautu paklaidų įvertinimu, galima daryti išvadą, kad dviejų konfigūracijų būsenų neįskaitymas (f-lės (15) ir (16)) nukelia tą kamieno koreliaciją į kitą grupę. Tačiau tuomet atsiranda kitos koreliacijos, kurios yra fiksuotos. Kamieno koreliacija yra



1 paveikslas. A parametro koreliacijos daugiakonfigūraciniu Hartrio ir Foko artutiniu, naudojant apribotą valentinių ir kamieno konfigūracijų būsenų funkcijų erdvę. Pastarosios suskirstytos į 93 grupes. Įskaičius vieną konfigūracijų būsenų funkcijų grupę, parametras A yra apskaičiuojamas naudojant naująją atomo būsenų funkciją. Valentinės ir kamieno koreliacijos įskaitomos kiekvienoje grupėje, grupės įtaka tiriama įvairiais atvejais: I. Su $C(\beta)2s$ grupe; II. Be $3d^3 3F \beta s^4 F$ grupės funkcijos $C(\beta)2s$; III. Be bet kurios $C(n)2s$ grupės funkcijos; IV. Be $C(\beta)2s$ grupės dviejų konfigūracijų būsenų funkcijų; V. Tik valentinės koreliacijos.

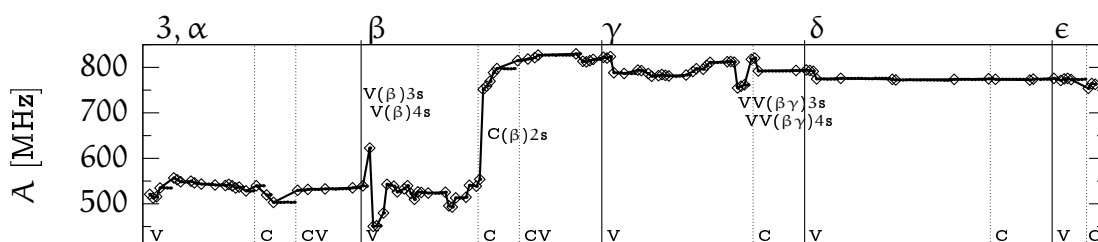
3 lentelė. Vanadžio pagrindinės būsenos $3d^3 3F 4s^2 4F$ hipersmulkioji struktūra. Apskaičiuotos A vertės palygintos su eksperimentiniais (Exp.) [42] ir pusiauempiriais (Sem.) [41] duomenimis. Pateikti Hartrio ir Foko (HF), riboto daugiakonfigūracinio Hartrio ir Foko (MCHF), konfigūracijų superpozicijos be Breito ir Paulio pataisų (CI) ir konfigūracijų superpozicijos su Breito ir Paulio pataisomis (CI+BP) skaičiavimų duomenys. Paskutinėje eilutėje nurodyti konfigūracijų būsenų funkcijų skaičiai (Csf).

J	HF [MHz]	MCHF [MHz]	CI [MHz]	CI+BP [MHz]	Exp. [42] [MHz]	Sem. [41] [MHz]
3/2	543	540(27)	562(28)	561	560,069(2)	547,923
5/2	336	320(16)	322(16)	323	321,251(3)	321,575
7/2	276	256(13)	252(13)	253	249,752(2)	255,368
9/2	259	237(12)	230(12)	230	227,136(1)	237,025
Csf	1	11411	29052	29059		

mažiau svarbi. Tai lemia palyginti gerą duomenų tikslumą 5% paklaidų ribose. Sutapimas su eksperimentu siekia 2% (žiūr. 3 lentelę).

Reliatyvistinės pataisos šiems rezultatams buvo gautos Breito ir Pauli artutinu. Visos septynios papildomos konfigūracijų būsenų funkcijos, kylančios iš konfigūracijos $3d^3 4s^2$, buvo pridėtos prie konfigūracijų būsenų erdvės. Atomo banginių funkcijų svoriai tarpiniame ryšyje (iš LSJ) buvo gauti naudojant programą BPCI [44]. Priemaišinių termų svoriai buvo mažesni nei 0,002. Kaip galima pastebėti iš 3 lentelės, reliatyvistiniai efektai Breito ir Pauli artutinu yra nykstamai maži.

Naudojant GRASP paketą [11], atlikti panašūs pilnai reliatyvistiniai daugiakonfigūracinio Dirako ir Foko skaičiavimai siekiant įsitikinti darbe sukurto metodo efektyvumu naudojant pilnai reliatyvistinį artėjimą. Pirmiausia pagrindinė būseną buvo užrašyta naudojant reliatyvistinius žymėjimus bei apžvelgtas reliatyvistinių skaičiavimų algoritmas. Per 600 000 superponuotų konfigūracijų būsenų funkcijų apibrėžia jų erdvę vanadžio pagrindinės būsenos atveju atsižvelgiant į viengubus ir dvigubus kamieno ir valentinių elektronų sužadinius penkiose koreliacinėse grupėse, turinčiose aukščiausią $l = i$. Kamieno bei valentinių konfigūracijų būsenų funkcijos daugiau nei dvigubai išplėtė šią erdvę.



Grupės

2 paveikslas. Hipersmulkiosios struktūros A dydžio priklausomybė nuo koreliacinių grupių Dirako ir Foko artutinumu, kai $J = 3/2$. Grupės, kurių įtaka į A dydį yra mažesnė nei $0,2\%$, yra pažymėtos taškais, o grupės, kurių įtaka yra didesnė nei $0,2\%$, pažymėtos rombais. Pjūvių reikšmės yra atidėtos grafiko viršuje. Vertikalios punktyrinės linijos atskiria koreliacijų grupes; grupės priklausančios valentinėms koreliacijoms žymimos V, kamieno C ir kamieno-valentinėms CV.

Apsiribojimas grupėmis, kurios keičia A daugiau nei $0,2\%$ (t.y. 1 MHz , kai $J = 3/2$), apriboja taip pat ir grupių kiekį nuo 71 iki 12. Panaši situacija ir kitoms J vertėms. Taigi pasiektas šios erdvės apribojimas tik pačiomis svarbiausiomis konfigūracijų būsenų funkcijomis.

Tačiau konfigūracijų erdvės sumažinimas yra nepakankamas ir tam tikrais atvejais turi būti naudojama papildoma kondensacija. Pasirinkta tokia riba, kad skirtumas tarp nekondensuotų ir kondensuotų daugiakonfigūracinių skaičiavimų neviršytų 1% . Rezultatai, kai $J = 3/2$, yra pateikti 2 paveiksle.

Daugiakonfigūraciniuose skaičiavimuose valentinės grupės gerai konvergavo 1% tikslumu, o kamieno grupės – 2% tikslumu. Išimtį sudarė $J = 3/2$, kuriam paklaida siekė 4% . Įvertinta 4% paklaida yra gerokai mažesnė nei 36% nukrypimas nuo eksperimentinių rezultatų. Panaši tendencija stebima ir naudojant daugiakonfigūracinį Hartrio ir Foko artutinumą.

Valentinių konfigūracijų superpozicijos skaičiavimai, atlikti atsižvelgiant į taip stipriai kondensuotą konfigūracijų būsenų funkcijų erdvę, demonstruoja puikią 1% tikslumo konvergenciją. Kamieno koreliacijos yra nuosekliai skaičiuojamos kiekvienai koreliacijų grupei. Įvairių koreliacijų grupių indėlio analizė liudija, kad labai didelę įtaką turi $C(\beta s)2s$ grupės $[3d_{3/2}][3d_{5/2}]^2$ reliatyvistinis pogrupis. Panašus efektas buvo stebėtas ir daugiakonfigūracinio Hartrio ir Foko artutinumo atveju.

Kol kas skaičiavimų atitikimas eksperimentiniams rezultatams nepasiekia pačių skaičiavimų paklaidos. Geras teorinių rezultatų sutapimas su ekspe-

4 lentelė. Vanadžio pagrindinės būsenos hipersmulkiosios struktūros A dydis. Apskaičiuotos A vertės palygintos su eksperimentiniais (Exp.) [40] ir pusiauempiriais (Sem.) [41] duomenimis. Pateikti Hartrio ir Foko (HF), riboto daugiakonfigūracinio Hartrio ir Foko neįskaitant $C(\beta s)2s$ grupės (MCHF), išplėstų konfigūracijų superpozicijos (MCHF+CI) ir išplėstų konfigūracijų superpozicijos su Breito ir Paulio pataisomis (MCHF+BPCI) skaičiavimų duomenys. Taip pat pateikti Dirako ir Foko (DF), daugiakonfigūracinio Dirako ir Foko įskaitant $C(\beta s)2s [3d_{3/2}][3d_{5/2}]^2$ pogrupį bei išplėstų konfigūracijų superpozicijos (MCDF+CI) ir daugiakonfigūracinio Dirako ir Foko be $C(\beta s)2s [3d_{3/2}][3d_{5/2}]^2$ pogrupio bei išplėstų konfigūracijų superpozicijos (MCDF+CI,excl.) skaičiavimų duomenys. Lenktiniuose skliaustuose pateiktos skaičiavimų paklaidos.

Artutinumai	Hipersmulkiosios struktūros A dydis [MHz]			
	$J = 3/2$	$J = 5/2$	$J = 7/2$	$J = 9/2$
HF	543	336	276	259
MCHF	539(27)	320(16)	256(13)	237(12)
MCHF+CI	562(28)	322(16)	252(13)	230(12)
MCHF+BPCI	561	323	253	230
DF	521	330	274	258
MCDF+CI	685(27)	327(6)	214(4)	172(4)
MCDF+CI,excl.	564(23)	318(6)	270(5)	225(5)
Exp, [40]	560,069(2)	321,251(3)	249,752(2)	227,136(1)
Sem, [41]	547,923	321,575	255,368	237,025

rimentiniais duomenimis apskritai pasiekiamas, jei ignoruojamas $C(\beta s)2s$ konfigūracijų būsenų funkcijų $[3d_{3/2}][3d_{5/2}]^2$ pogrupis. Galutiniai vanadžio pagrindinės būsenos hipersmulkiosios struktūros A dydžio rezultatai yra pateikti 4 lentelėje. Palyginus su eksperimentiniais duomenimis, patvirtintos anksčiau įvertintos skaičiavimų paklaidos, išskyrus $J = 7/2$ atvejį, kuriam nukrypimas nuo eksperimento siekė 8%.

Išvados

1. Naudojant metodą, besiremiantį judėjimo kiekio momento, apibendrinto grafinio metodo, antrinio kvantavimo metodo surištame tenzoriniame pavidale, kvazisukinio metodo bei pilnai redukuotų kilminių koeficientų deriniu, galima rasti hipersmulkiosios sąveikos operatorių bendrą neredukuotinį tenzorinį pavidalą bei jų matricinius elementus, įskaitant tiek diagonalius, tiek ir nediagonalius konfigūracijų atžvilgiu matricinius elementus. Tai atveria galimybes bendru atveju atsižvelgti į koreliacinius efektus tiriant hipersmulkiasias sąveikas.
2. Išplėtotą RACAH ir JUCYS atomo struktūros skaičiavimų matematinė įranga leidžia sukurti specializuotus daugiaelektronų atomų tyrimų (šiam darbe – hipersmulkųjų sąveikų) programų paketus, kurie remiasi simboliu programavimu.
3. Parengtas metodas teoriškai tirti hipersmulkiają struktūrą naudojant daugiakonfigūracinę atomų būsenų funkciją atveria galimybes detalai nagrinėti sudėtingų daugiaelektronų atomų hipersmulkiają struktūrą. Pasiūlyta metodika padeda įvertinti procesų konvergavimą, atskirų koreliacinių grupių įtaką ir tuo būdu efektyviai pasirinkti konfigūracijų būsenų funkcijų erdvę.
4. Vanadžiui A parametro priklausomybė nuo koreliacinių grupių yra panaši naudojant Hartrio ir Foko bei Dirako ir Foko artutinumus. $3s$ ir $4s$ koreliacinės grupės stipriai poliarizuoja šias orbitales, tačiau bendras jų efektas kompensuojasi. Valentinės koreliacijos įskaitomos po trečios grupės. Kamieno ir valentinės koreliacijos bei kamieno ir kamieno koreliacijos tarp dviejų skirtingų grupių yra nesvarbios.
5. Vanadžiui abiejų artutinumų (daugiakonfigūraciniai Hartrio ir Foko bei Dirako ir Foko) naudojimas leidžio pasiekti gerą sutapimą su eksperimentu tik tuomet, kai atsižvelgiama į koreliacijas, kurios leidžia įskaityti kamieno elektronų kontaktinių narių indėlį, taip pat atsižvelgti į gana didelę kitų koreliacijų apimtį.
6. Sukurtas automatizuojantis skaičiavimus skriptas leidžia valdyti įvedimo ir išvedimo duomenis tarp ATSP ir GRASP programų paketų. Jo veikimas pademonstruotas vanadžio atomui, tačiau jis gali būti naudojamas bet kuriam atomui ar jonui.

Tyrimų perspektyvos

Atlikti tyrimai parodė, kad šiuolaikinis daugiakonfigūracinis artutinumai leidžia detaliam išnagrinėti sudėtingų daugiaelektroninių atomų ir jonų hipersmulkiąją struktūrą bei pasiekti tikslumą, palyginamą su pusiauempirinių skaičiavimų tikslumu. Tačiau ateityje ypač svarbu detaliau ir plačiau ištirti kamieno koreliacinių grupių įtaką. Būtų įdomu tai sujungti su trikdžių teorijos taikymu. Dalis išplėtos matematinės įrangos yra sukurta naudojantis HFs simbolinio programavimo aplinka ir prisidės prie tolesnio sudėtingų daugiaelektroninių atomų ir jonų teorijos plėtojimo, žinoma, įskaitant ir hipersmulkiųjų sąveikų teoriją.

Autoriaus publikacijų sąrašas

Darbo rezultatai pateikti 6 straipsniuose:

1. S. Kröger, O. Scharf and G. Guthöhrlein. New and revised energy levels of atomic Niobium. *Europhysics Letter*, 66(3): pp. 344 – 349, 2004.
2. G. Gaigalas, Z. Rudzikas and O. Scharf. Hyperfine Structure Operator in the Tensorial Form of Second Quantization. *Central European Journal of Physics*, 2: pp. 720 – 736, 2004.
3. G. Gaigalas, O. Scharf and S. Fritzsche. Maple procedures for the coupling of angular momenta. VIII. Spin-angular coefficients for single-shell configurations. *Computer Physics Communications*, 166: pp. 141 – 169, 2005.
4. O. Scharf, G. Gaigalas, S. Fritzsche, M. Gedvilas, E. Gaidamauskas and G. Kirsanskas. Application of the Racah package for dealing with the expressions from the atomic shell model. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 235: pp. 135 – 139, 2005.
5. G. Gaigalas, O. Scharf and S. Fritzsche. Hyperfine structure parametrization in Maple. *Computer Physics Communications*, 174(3): pp. 202 – 221, 2006.
6. O. Scharf and G. Gaigalas. Large scale multiconfiguration Hartree-Fock calculation of the hyperfine structure of the ground state of Vanadium. *Central European Journal of Physics*, 4: pp. 42 – 57, 2006.

Darbo rezultatai pristatyti 5 mokslinių konferencijų pranešimuose:

1. 35th Conference of the European Group for Atomic Spectroscopy, Bruxelles (Belgium), July 15th – 18th, 2003.
2. 8th European Conference on Atomic and Molecular Physics, Rennes (France), July 6th – 10th, 2004.
3. 12th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Vilnius (Lithuania), September 6th – 11th, 2004.
4. 36th Lithuanian National Physics Conference, Vilnius (Lithuania), June 16th – 18th, 2005.
5. 37th Conference of the European Group for Atomic Systems, Dublin (Ireland), August 3rd – 6th, 2005.

Trumpos žinios apie doktorantą

Oliver Scharf gimė Berlyne (Vokietija). 1995–2002 m. studijavo Berlyno technikos universitete (Technische Universität Berlin), kurį sėkmingai baigė 2002 m. ir įgijo fiziko diplomą. 2002–2006 m. – Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos instituto doktorantas.

Autorius dėkoja prof. G. Gaigalui už mokslines konsultacijas, pagalbą, draugiškumą už kantrybę. Prof. Z. Rudzikui – už pagalbą įgyvendinant šį projektą. Taip pat dėkoja Instituto personalui už geranoriškumą ir kūrybišką atmosferą. Dėkingas savo šeimai – už meilę ir paramą, Susan Aurich, padėjusiai tobulinti disertacijos anglų kalbą, ir Frédérique – už buvimą kartu visą tą laiką.

Literatūra

- [1] H. B. G. Casimir. *On the interaction between atomic nuclei and electrons*. San Francisco, W.H. Freeman, 1963.
- [2] Bureau International des Poids et Mesures. *The international System of Units*. Organisation Intergouvernementale de la Convention du Mètre, 7th edition, 1998.
- [3] R. L. Kurucz. Atomic data for interpreting stellar spectra: isotopic and hyperfine data. *Physica scripta*, T47:110 – 117, 1993.
- [4] D. S. Leckrone, S. Johansson, G. M. Wahlgren, and S. J. Adelman. High resolution UV stellar spectroscopy with the HST/GHRS, challenges and opportunities for atomic physics. *Physica scripta*, T47:149 – 156, 1993.
- [5] S. Kröger, O. Scharf, and G. Guthöhrlein. New and revised energy levels of atomic Niobium. *Europhysics Letter*, 66(3):344 – 349, 2004.
- [6] R. D. Cowan. *The Theory of atomic structure and spectra*. University of California Press, first edition, 1981.
- [7] Z. Rudzikas. *Theoretical Atomic Spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [8] P. Raghavan. Table of nuclear moments. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 42:189, 1989.
- [9] I. Lindgren and A. Rosén. Relativistic self-consistent-field calculations with application to atomic hyperfine interaction. Part II: Relativistic theory of atomic hyperfine interaction. *Case Studies in Atomic Physics*, 4:150 – 196, 1974.
- [10] C. Froese Fischer. The MCHF atomic structure package. *Computer Physics Communications*, 64:369 – 398, 1991.
- [11] F. A. Parpia, C. Froese-Fischer, and I. P. Grant. GRASP92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations. *Computer Physics Communications*, 94:249 – 271, 1996.
- [12] Z. Cai, V. M. Umar, and C. F. Fischer. Large-scale relativistic correlation calculations: Levels of Pr^{+3} . *Physical Review Letters*, 68:297 – 300, 1992.

- [13] S. Fritzsche and I. P. Grant. Ab initio calculation of the $2s^2\ ^1s_0 - 2s3p\ ^3p_1$ intercombination transition in beryllium like ions. *Physica scripta*, 50:473 – 480, 1994.
- [14] P. Jönsson. Multi-configuration Hartree- and Dirac-Fock calculations of atomic hyperfine structures. *Physica scripta*, 48:678, 1993.
- [15] J. Carlsson, P. Jönsson, M. Godefroid, and C. F. Fischer. Accurate multi-configuration Hartree-Fock calculations of isotope shifts in C I and C IV. *Journal of Physics B*, 28:3729 – 3740, 1995.
- [16] T. Brage and C. F. Fischer. Systematic studies of correlation in complex ions. *Physica Scripta*, T47:18 – 28, 1993.
- [17] J. Bieroń, F. A. Parpia, C. Froese Fischer, and P. Jönsson. Large-scale multiconfiguration Dirac-Fock calculation of hyperfine interaction constants for nd^2 levels of Sc^+ and Y^+ . *Physical Review A*, 51(6):4603 – 4610, 1995.
- [18] W. J. Childs and U. Nielsen. Hyperfine structure of the $(5d + 6s)^3$ configuration of $^{139}La\ I$: New measurements and *ab initio* multiconfiguration Dirac-Fock calculations. *Physical Review A*, 37(1):6 – 15, 1988.
- [19] L. Young, W. J. Childs, T. Dinneen, C. Kurtz, H. G. Berry, and L. Engström. Hyperfine structure of $Sc\ II$: Experiment and theory. *Physical Review A*, 37(11):4213 – 4219, 1988.
- [20] J. Bieroń. Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of the hyperfine structures of Radium. *Journal of Physics B*, 38:2221 – 2228, 2005.
- [21] Maple is a registered trademark of Waterloo Maple Inc.
- [22] Z. Rudzikas. Self-consistent field method in various approximations: 'forgotten ideas'. *Molecular Physics*, 98(16):1205 – 1212, 2000.
- [23] G. Gaigalas, J. Kaniauskas, and Z. Rudzikas. A diagrammatic technique in the angular momentum theory and second quantization. *Lietuvos Fizikos Rinkinyys*, 25(6):3 – 13, 1985.
- [24] G. Gaigalas, Z. Rudzikas, and C. Froese Fischer. An efficient approach for spin-angular integrations in atomic structure calculations. *Journal of Physics B*, 30:3747 – 3771, 1997.

- [25] O. Scharf, G. Gaigalas, S. Fritzsche, M. Gedvilas, E. Gaidamauskas, and G. Kirsanskas. Application of the Racah package for dealing with the expressions from the atomic shell model. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 235:135 – 139, 2005.
- [26] S. Fritzsche. Maple procedures for the coupling of angular momenta I. Data structures and numerical computations. *Computer Physics Communications*, 103:51 – 73, 1997.
- [27] S. Fritzsche, S. Varga, D. Geschke, and B. Fricke. Maple procedures for the coupling of angular momenta II. Sum rule evaluation. *Computer Physics Communications*, 111:167 – 184, 1998.
- [28] S. Fritzsche, G. Gaigalas, and B. Fricke. Maple procedures for the coupling of angular momenta III. Standard quantities for evaluating many-particle matrix elements. *Computer Physics Communications*, 135:219 – 237, 2001.
- [29] T. Inghoff, S. Fritzsche, and B. Fricke. Maple procedures for the coupling of angular momenta IV. Spherical harmonics. *Computer Physics Communications*, 139:297 – 313, 2001.
- [30] S. Fritzsche, T. Inghoff, T. Bastug, and M. Tomaselli. Maple procedures for the coupling of angular momenta V. Recoupling coefficients. *Computer Physics Communications*, 139:314 – 326, 2001.
- [31] G. Gaigalas and S. Fritzsche. Maple procedures for the coupling of angular momenta VI. LS-jj transformations. *Computer Physics Communications*, 149:39 – 69, 2002.
- [32] O. Scharf, S. Fritzsche, and G. Gaigalas. Hyperfine structure parametrization in Maple. *Computer Physics Communications*, in press, 2006.
- [33] P. G. H. Sandars and J. Beck. Relativistic effects in many-electron hyperfine structure. I. Theory. *Proceedings of the Royal Society of London*, 289:97 – 113, 1965.
- [34] S. Büttgenbach and R. Dicke. Hyperfine structure of nine levels in two configurations of ^{93}Nb . *Zeitschrift für Physik A*, 275:197 – 202, 1975.

- [35] A. Hibbert and C. Froese Fischer. A general program for computing angular integrals of the non-relativistic Hamiltonian with non-orthogonal orbitals. *Computer Physics Communications*, 64:417 – 430, 1991.
- [36] P. Jönsson and C.-G. Wahlström. A program for computing magnetic dipole and electric quadrupole hyperfine constants from MCHF wave functions. *Computer Physics Communications*, 74:399 – 414, 1993.
- [37] G. Gaigalas. The library of subroutines for calculating standard quantities in atomic structure theory. *Lithuanian Journal of Physics*, 41(1):39 – 54, 2001.
- [38] M. Tong, P. Jönsson, and C. Froese Fischer. Convergence studies of atomic properties from variational methods: Total energy, ionization energy, specific mass shift, and hyperfine parameter for Li. *Physica Scripta*, 48:446 – 453, 1993.
- [39] P. Jönsson and C. Froese Fischer. Large-scale multiconfiguration Hartree-Fock calculations of hyperfine-interaction constants for low-lying states in Beryllium, Boron, and Carbon. *Physical Review A*, 48(6):4113 – 4123, 1993.
- [40] W. J. Childs and L. S. Goodman. Hyperfine structure of nine levels in two configurations of V^{51} . I. Experimental. *Physical Review*, 156(1):64 – 70, 1967.
- [41] P. Unkel, P. Buch, J. Dembczyński, W. Ertmer, and U. Johann. Sternheimer free determination of the ^{51}V nuclear quadrupole moment from hyperfine structure measurements. *Zeitschrift für Physik D: Atoms, Molecules and Cluster*, 11:259 – 271, 1989.
- [42] W. J. Childs. Hyperfine structure of nine levels in two configurations of V^{51} . II. Theoretical. *Physical Review*, 156(1):71 – 81, 1967.
- [43] C. Froese Fischer, G. Tachiev, G. Gaigalas, and M. Godefroid. An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations. Unpublished documentation of the new version based on dynamic memory allocation, sparse matrix methods, and a recently developed angular library, 2003.
- [44] A. Hibbert, R. Glass, and C. F. Fischer. A general program for computing angular integrals of the Breit-Pauli Hamiltonian. *Computer Physics Communications*, 64:455–472, 1991.

Summary

The hyperfine structure lines in the spectra of atoms arise from the orientation energy between the static magnetic and electric fields of the nucleus and the static magnetic and electric fields of the electron core. The separation between two hyperfine lines is proportional to the A factor with some correction given by the B factor. Additional corrections are, except for special cases, even smaller and rarely resolved. Modern experimental methods allow the measurement of this splitting for practically any atom and ion, including extreme ionization degrees. For the spectroscopist, the distinct structure of the lines considerably contribute to the interpretation and analysis of high resolution spectra. Knowledge of the A and B factors helps to interpret line forms, to identify fine structure transitions in many line spectra and to identify the fine structure level designation.

The thesis is organized into five chapters. Chapter 1 presents a historical overview of the developments in the field of hyperfine structure calculations. The common approaches are reviewed and the theoretical background of the multiconfiguration approach as well as symmetry-adapted wave functions in quasispin space are explained in more detail. Based on this theory, new explicit expressions of the hyperfine structure matrix elements are derived in Chapter 2. The explicit expressions for a two-shell system are presented. The third chapter shows the implementation of the underlying theory, in particular the general expression for the hyperfine structure, in computer codes. In Chapter 4 the new method for hyperfine structure calculation is developed. It is applied to the ground state hyperfine structure calculation of Vanadium, in both multiconfiguration Hartree-Fock and Dirac-Fock approximations. The thesis ends with the conclusions and outlook.

This thesis adapted the hyperfine structure operators to the new developments in the spin-angular integration techniques. General valid expressions for the A and the B factors for an any open shell atom or ion were obtained. The technique based on the combination of the angular momentum theory, on a generalized graphical approach, on the second quantization in coupled tensorial form, on the quasispin approach and on the use of fully reduced coefficients of fractional parentage, allowed one to find the general irreducible tensorial form of the hyperfine interaction operator as well as the matrix elements of the above-mentioned operator, diagonal and off-diagonal with respect to electronic configurations included, thus accounting for the correlation effects in a general case (compare 7, 8, 9 and 14). Based on these expressions, a universal program that allows for both

ab initio multiconfiguration Hartree-Fock and semiempirical hyperfine structure calculations was developed. The general underlying technique was made available in the form of the symbolic programming language of MAPLE, allowing a fast adaption of the approach to similar physical problems. The existing atomic structure electronic databases RACAH and JUCYS were extended for one-particle spin-angular integration of atomic state functions. These enhanced databases were used to program the hyperfine structure utility HFS that allows the efficient manipulation and calculation of hyperfine structure expressions. The program was tested on the semiempirical hyperfine structure analysis of the first nine levels of Niobium. It was also installed at the Universität Kassel, Fachbereich Physik[†].

The new spin-angular integration was further implemented into a program for multiconfiguration Hartree-Fock hyperfine structure calculations for the atomic structure package ATSP. The unpublished new version of the MCHF atomic-structure package, based on dynamic memory allocation, sparse matrix methods, and the new angular library, was installed in tight collaboration with C. F. Fischer (NIST, USA) on the BENDROSIOS FIZIKOS KATEDROS cluster at Vilnius Pedagogical University, division of general physics. The GRASP package for multiconfiguration Dirac-Fock calculations was installed, too.

The programs and computing capacities allow for a new algorithm that observes precisely the contribution and compensation of various correlation groups formed by configuration state functions. With this algorithm the convergence of these groups can be estimated and their influence on the hyperfine factor can be estimated. Thus well defined approximations on the configuration state function space can be made, the error of the calculation can be assigned and detailed information about the correlation effects can be obtained. This is shown on the hyperfine structure calculation of the four ground state levels of Vanadium, $3d^3 4s^2 4F_J$ with $J = 3/2, 5/2, 7/2$ and $J = 9/2$ in both the multiconfiguration Hartree-Fock and Dirac-Fock approximation.

For Vanadium, both the multiconfiguration Hartree-Fock approximation and the Dirac-Fock approximation lead to good agreement with the experimental results only if the correlations leading to the contact contribution of the core electrons are included after sufficient other correlations have been accounted for.

The results of the studies were published in six articles and presented at five national and international conferences.

[†]<http://www.physik.uni-kassel.de/fritzsche/programs.html>