Докторская диссертация Дзюбы Владимира Андреевича:

Тема: Теория возмущений по экранированному взаимодействию электронов и релятивистские расчеты тяжелых атомов
(01.04.05 - оптика)
Новосибирск, 1990 год.
--
20.04.2006:
Стр. 7, 8, 9 (DDT-8, 9):

Учет поправок второго порядка по остаточному кулоновскому взаимодействию позволяет довести согласие экспериментальных и теоретических данных до уровня ~ 1%, что во многих случаях является достаточно хорошей точностью. Для расчета сверхтонкой структуры, E1 - амплитуд и т.п. необходимо так же учесть поляризационные эффекты, т.е. изменение самосогласованного потенциала остова под действием внешнего поля (магнитного поля ядра, электрического поля фотона и т.д.).
Это достигается с помощью решения уравнений зависящего от времени метода Хартри-Фока (ЗВХФ) или уравнений для самосогласованного атома в стационарном внешнем поле (ХФВП).
Для дальнейшего повышения точности необходимо учитывать корреляционные поправки высших порядков. Поправки высших порядков, вклад которых существенен, можно разбить на три класса:
1) экранировка кулоновского взаимодействия,
2) взаимодействие частица-дырка в поляризационном операторе,
3) итерации массового оператора.
Учет высших порядков сводится в основном к определению кулоновского взаимодействия или, другими словами, к построении теории возмущений по экранировочному взаимодействию электронов.
Такая теория возмущений сходится гораздо быстрее обычной теории возмущений по остаточному кулоновскому взаимодействию, и её применение приводит к значительному повышению точности атомных расчетов.
Например, уровни энергии щелочных атомов воспроизводятся с точностью ~ 0,1%.
Данная диссертация посвящена подробному описанию изложенной выше методики и применению её к расчету уровней энергии, интервалов тонкой и сверхтонкой структуры, амплитуд разрешенных E1 – переходов в тяжелых атомах с одним не спаренным электроном поверх заполненных оболочек (под-оболочек), а так же расчету эффекта не сохранения четности в цезии. Хотя в диссертации рассматриваются только атомы с одним внешним электроном , это не означает, что развитая в ней методика содержит принципиальные ограничения. Она целиком применима к более сложным атомам (таким как Pb, Bi), но должна быть при этом дополнена расчетом взаимодействия внешних электронов между собой. В этой части также используются идеи, изложенные в диссертации. Так, кулоновское взаимодействие внешних электронов между собой должно рассчитываться с учетом его экранировки остальным электронами атома и т.п.
Диссертация состоит из введения, 6-ти глав и заключения. В 1-й главе приводятся уравнения самосогласованного поля в том виде, в котором они удобны для описания атомов с одним не спаренным электроном. Наиболее удобным в этом случае является введенное Келли [21] V^{N-1} - приближение, которое состоит в том, что процедура само-согласования проводится лишь для электронов атомного остова, а состояния внешнего электрона вычисляются в поле замороженного остова.
В этом случае уравнения самосогласованного поля записываются лишь для систем замкнутых электронных оболочек. В параграфе 1.1 приводятся уравнения релятивистского метода Хартри-Фока (РХФ), в параграфе 1.2 – метода зависящих от времени уравнений Хартри-Фока (ЗВХФ), который используется для согласования электронных орбиталей в присутствии внешнего гармонического поля. В параграфе 1.3 приведены уравнения, аналогичные ЗВХФ, но для случая стационарного внешнего поля (ХФВП). Рассмотрим 2 случая, когда внешним полем является магнитное поле ядра (при расчете сверхтонкой структуры), либо слабое взаимодействие электронов …

-

препринты Дзюбы:
\*\*\* Препринт 1:
Институт Ядерной Физики СО АН СССР
630090, Новосибирск, 90, СССР
В. А. Дзюба
Комплекс Программ для Задач Атомной Физики.
I. Метод самосогласованного поля.
Препринт 89-92.
Новосибирск
1989.
Аннотация:
Описана реализация методов Хартри-Фока-Слейтера и Хартри-Фока в релятивистском варианте. Их использование позволяет рассчитать уровни энергии, интервалы тонкой и сверхтонкой структуры, Е1 и М1 амплитуды и т.п. для любых атомов в приближении центрально-симметричного поля а так же получить полный ортонормированный набор состояний дискретного и непрерывного спектров, который необходим для учета поляризационных и корреляционных эффектов по моного-частичной теории возмущений.
1. Введение
Данная работа посвящена описанию комплекса программ для задач атомной физики, который является дальнейшим развитием комплекса программ, описанного в (1), и предназначен для расчета с высокой точностью таких характеристик атомов, как уровни энергии, интервалы тонкой и сверхтонкой структуры, амплитуды Е1- и М1- переходов, g- факторы, эффекты не сохранения четности.
Точность понимается как степень совпадения расчетных параметров с соответствующими экспериментальными (там, где они есть).
Данный комплекс обеспечивает точность расчетов на уровне 0,1-1%. Высокая точность достигается путем использования релятивистского метода Хартри-Фока (РХФ) с последующим учетом поляризационных и корреляционных эффектов:
--
\*\* у меня атом изолированный, т.е. я рассматриваю газообразное состояние.