**Семенов, Роберт Иванович.**
Полуэмпирические расчеты реальных атомных систем : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.05. - Санкт-Петербург, 1999. - 216 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Семенов, Роберт Иванович

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. Волновые функции промежуточной связи коэффициенты связи) и способы их определения

1.1. Независимые от радиальных частей матричных элементов соотношения между экспериментальными величинами реальных атомных систем и коэффициенты связи

1.2. Графический метод

1.3. Вычисление коэффициентов связи из экспериментальных значений гиромагнитных отношений

1.4. Вычисление коэффициентов связи из экспериментальных значений наблюдаемых величин, связанных с излучением

1.5. Расчет коэффициентов связи из интервалов энергии для случаев, когда число уровней с одинаковым значением I в конфигурации не превышает двух

ГЛАВА 2. Матричные элементы оператора энергии в модельном представлении

2.1. Задача вычисления спектроскопических характеристик реальных атомных систем

2.2. Матричные элементы оператора энергии для конфигураций, имеющих в-электрон

2.2.1. Взаимодействие спин-чужая орбита

2.2.2. Взаимодействие спин-спин

2.2.3. Взаимодействие орбита-орбита

2.2.4. Контактные взаимодействия

2.2.5. Матричные элементы конфигураций с Б-электроном

2.2.6. Вычисление центра тяжести конфигурации Еау

2.2.7. Сравнение с литературными данными

2.3. Матричные элементы оператора энергии для прп'р и пр5п'р конфигураций

2.4. Матричные элементы оператора энергии для конфигураций pd, dp, p5d, d9p

2.5. Матричные элементы оператора энергии конфигураций р

ГЛАВА 3. Расчет параметров тонкой структуры и их коэффициентов связи реальных атомных систем

3.1. Параметры тонкой структуры и их связь с радиальными частями матричных элементов оператора энергии

3.2. Полуэмпирический расчет параметров тонкой структуры для конфигурации с s-электроном

3.2.1. Параметры конфигурации p5s

3.2.2. Параметры конфигурации d9s

3.2.3. Параметры конфигурации ps

3.3. Расчет конфигураций с s-электроном, для которых имеются экспериментальные данные в "сильных" магнитных полях

3.3.1. Расчет конфигураций nsn'd

3.3.2. Особенности картины расщепления уровней nsn'd конфигураций в магнитном поле

3.3.3. Магнитные дипольные переходы в "сильных" магнитных полях

3.3.4. Расчет параметров тонкой структуры конфигураций Isnp

3.4. Расчет параметров тонкой структуры конфигураций пр5п'р

3.5. Расчет параметров тонкой структуры p5d конфигурации

3.6. Расчет параметров тонкой структуры конфигураций пр и