

### 3.7. Pagrindiniai moksliniai rezultatai

- Parengta monografija, kurioje apibendrinta ir išplėtota laisvųjų atomų su atvirais sluoksniais Röntgeno ir Auger spektrų teorija.

P. Karazija. *Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов*. Вильнюс: Мокслас, 1987.

R. Karazija. *Introduction to the Theory of X-Ray and Electronic Spectra of Free Atoms*. New York–London: Plenum Press, 1996.

Kviestinis apžvalginis pranešimas *VII Sąjunginėje atomų ir atominių spektrų konferencijoje*, Tbilisi, 1981.

- Suformuluotas bendras atominių dydžių sumavimo pagal visus daugiaelektronius kvantinius skaičius metodas. Juo naudojantis gautos įvairių atominių spektrų bendrųjų charakteristikų algebrinės išraiškos: energijos lygmenų spektro – asimetrijos ir eksceso; emisijos spektro – dispersijos; Auger spektro – vidutinės energijos ir dispersijos. Jos pritaikytos spektrų kitimo dėsningumams izoelektronėse, izobranduolinėse ir neutralių atomų sekose tirti. Pasiūlytos bendros konfigūracijų maišymosi charakteristikos: vidutinė energija tarp dviejų konfigūracijų sąveikaujančių lygmenų ir konfigūracijų sąveikos stipris. Gautos algebrinės jų išraiškos.

P. Karazija. *Суммы атомных величин и средние характеристики спектров*. Вильнюс: Мокслас, 1992, 272 с.

Straipsnių ciklas *Phys. Scripta* **47**(6), 754–764 (1993); **51**(5), 566–577 (1995); **52**(6), 639–648 (1995); **55**(6), 667–675 (1997); **67**(3), 208–218 (2003) (bendraautorai S. Kučas, V. Jonauskas ir eksperimentatoriai I. Martinsonas ir S. Aksela).

R. Karazija, S. Kučas. Summation of atomic quantities over all many-electron quantum numbers. *Lith. J. Phys.* **35**(2), 155–170 (1995) [apžvalginis straipsnis].

R. Karazija, S. Kučas. Average characteristics of the configuration interaction in atoms and their applications. *J. Quantit. Spectr. Rad. Transf.* **129**, 131–144 (2013) [apžvalginis straipsnis].

Apžvalginis kviestinis pranešimas konferencijoje *The Fifth European Conference on Atomic and Molecular Physics*, Edinburgh, 1995.

- Nustatyti nauji elektrono banginės funkcijos kolapso dėsnin-gumai: jis gali būti įvykęs vieniems termams ir dar neįvykęs kitiems tos pačios konfigūracijos termams; nebūtinai visi  $nl^N$  sluoksniu elektronai kolapsuoja to paties elemento atome. Elek-trono kolapsu ir potencinio barjero efektais paaiškinti 3d ir 4d fotosužadavimo ir emisijos spektrų ypatumai.

С.А. Кучас, А.В. Каросене, Р.И. Каразия. Локализация 4f-электро-на в зависимости от термина в конфигурации  $4d^9 4f$  и ее влияние на спектры поглощения  $N_{4,5}$ . *Оптика и спектроск.* **40**(4), 764–765 (1976).

А.А. Майсте, Р.Э. Руус, С.А. Кучас, Р.И. Каразия, М.А. Эланго. Коллапс 4f-электрона в конфигурации  $3d^9 4f$  в ксеноноподобных ионах. *Журнал эксп. и теорет. физики* **78**(3), 941–951 (1980).

Р.И. Каразия. Коллапс орбиты возбужденного электрона и осо-бенности атомных спектров. *Усп. физ. наук* **135**(1), 79–115 (1981) [apžvalginis straipsnis].

Apžvalginiai kviestiniai pranešimai *VI Sąjunginėje atomų ir atominių spektrų konferencijoje*, Voronežas, 1980 m. ir TSRS–Lenkijos seminare *f elektroninių sistemų tyrimai*, Vilnius, 1988 m.

- Įrodytas lygmenų radiacinių ir Auger plokčių bei fluorescenci-jos išeigos apytikris invariantiškumas tam tikrai konfigūracijų klasei.

Р.И. Каразия. Приближенная инвариантность Оже и радиацион-ных ширин уровней и выхода флуоресценции. *Лит. физ. сб./Liet. fiz. rink.* **23**(1), 6–16 (1983).

P. Karazija. Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов. Вильнюс: Мокслас, 1987.

- Sužadintų konfigūracijų  $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2}$ , turinčių du atvirus sluoksnius su vienodu orbitiniu kvantiniu skaičiumi, būsenas pasiūlyta klasifikuoti pagal jų kilmę sekoje  $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2} - n_1 l^{N_1+1} n_2 l^{N_2-1} - n_1 l^{N_1+2} n_2 l^{N_2-2} \dots$  ir įvesta nauja banginių funkcijų bazė. Gautas funkcionalas, kurį naudojant automatiškai užtikrinamas banginių funkcijų ortogonalumas žemiau esančių tos pačios simetrijos konfigūracijų funkcijoms. Plėtodami šio darbo idėjas, J. Kaniauskas ir Z. Rudzikas atomo teorijoje pritaikė izosukinio formalizmą.

П.О. Богданович, Р.И. Каразия, И.И. Борута. Ортогональность волновых функций к функциям энергетически нижележащих конфигураций и теорема Бриллюэна в случае электронной конфигурации  $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2}$ . Лит. физ. сб./Liet. fiz. rink. **20**(2), 15–24 (1980).

- Gautos atomo su vienu atviru sluoksniu pagrindinio ir kitų aukščiausiojo multipletiškumo bei su jais susijusių lygmenų energijų algebrinės išraiškos. Jomis remiantis, interpretuota dydžių, susijusių su pagrindiniu lygmeniu (ryšio energijų, sistemų skirtumo ir kt.), simetrija atžvilgiu ketvirčio sluoksnio.

Ю.М. Каняускас, Р.И. Каразия. Алгебраические выражения для энергии термов максимальной мультиплетности и связанных с ними термов, а также основного и высшего уровней. Лит. физ. сб./Liet. fiz. rink. **25**(2), 31–41 (1985).

R. Karazija, A. Udriš, A. Kynienė, S. Kučas. On the symmetry with respect to a quarter of electronic shell for the intensities of the strongest lines in lanthanide spectra. J. Phys.B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**(1), L405–L409 (1996).

R. Karazija, A. Kynienė. Symmetry of some properties of lanthanides with respect to a quarter of  $f^N$  shell. J. Phys. Chem. A. **102**(6), 897–903 (1998).

R. Karazija. Additional symmetry properties of atomic states with one and two open shells. *Lith. J. Phys.* **54**(4), 205–216 (2014) [apžvalginis straipsnis].

- Pirmą kartą atliktas išsamus elementariųjų procesų kaskado atome skaičiavimas atsižvelgiant į sužadintų būsenų sukūrimą, radiacinius bei neradiacinius šuolius ir konfigūracijų maišymą. Išplėtotas kaskadų modeliavimo naudojantis bendrosiomis spektrų charakteristikomis metodas. Teoriškai įrodytas esminis daugiaelektronių Auger šuolių vaidmuo vykstant kaskadams kriptono atomuose po vakansijų subvalentiniuose sluoksniuose susidarymo. Interpretuoti didelio tikslumo Auger spektrai, užregistruoti sutapimų metodu, vykstant 3p ir 3d kaskadams kriptone.

Р.И. Каразия, С.А. Кучас. Заселение конфигураций Ar II и Ar III при электронном ударе и последующих процессах и структура эмиссионного спектра  $L_{2,3}$ . *Лит. физ. сб./Liet. fiz. rink.* **19**(4), 495–504 (1979).

J. Paladoux, P. Lablanquie, L. Andric, K. Ito, E. Shigemasa, J.H.D. Eland, V. Jonauskas, S. Kučas, R. Karazija and F. Penent. Multielectron spectroscopy: Auger decays of the krypton 3d hole. *Phys.Rev. A* **82**(4), 043419, p. 1–13 (2010).

V. Jonauskas, S. Kučas, R. Karazija. Auger decay of 3p-ionized krypton. *Phys. Rev. A* **84**(5), 053415, p. 1–7 (2011).

R. Karazija, S. Kučas, V. Jonauskas. Investigation of the cascades in atoms using the global characteristics of spectra. *Lith. J. Phys.* **44**(3), 183–198 (2004) (apžvalginis straipsnis).

Kviestinis apžvalginis pranešimas konferencijoje *The Fifth European Conference on Atomic and Molecular Physics*, Edinburgh, 1995.

- Nustatytos siauros intensyvių linijų grupės susidarymo emisijos ir fotosužadinimo spektruose sąlygos. Paaiškinti tokios intensyvios 5 nm srityje volframo jonų spinduliuotės, sukeliančios

radiacinius nuostolius tokamakuose, susidarymo dėsningumai. Dipoliniams šuoliams tarp to paties komplekso konfigūracijų įvesta nauja atrankos taisyklė. Nustatyta, kad  $\text{Sn}^{9+}$ – $\text{Sn}^{11+}$  ir  $\text{Sb}^{10+}$ – $\text{Sb}^{11+}$  jonai yra atominiu požiūriu labiausiai tinkami siekiant sukurti 13,5 nm bangos ilgio intensyvios spinduliuotės šaltinį, kuris yra reikalingas mažų matmenų integrinio grandyno elementams formuoti.

S. Kučas, R. Karazija. Coulomb exchange interaction between electrons in the atom and structure of complex configurations. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **24**(13), 2925–2936 (1991).

A. Bernotas, R. Karazija. Additional selection rule for some emission, photoexcitation and Auger spectra. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **34**(23), L741–L747 (2001).

R. Karazija, S. Kučas, A. Momkauskaitė. Integral characteristics of spectra of ions important for EUV lithography. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**(14), 2973–2978 (2006).

S. Kučas, R. Karazija, V. Jonauskas, A. Momkauskaitė. Interaction of  $4p^5 4d^{N+1}$  and  $4p^6 4d^{N-1} 4f$  configurations and its influence on the photoexcitation and emission spectra in the isoelectronic and isonuclear sequences. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **42**(20), 205001, p. 1–10 (2009).

R. Karazija, S. Kučas, V. Jonauskas, A. Momkauskaitė. Formation of a narrow group of intense lines in the emission and photoexcitation spectra. In: *New Trends in Atomic and Molecular Physics*. Springer, Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, v. 76, 2013, p. 167–188 [apžvalginis straipsnis].

Kviestinis apžvalginis pranešimas konferencijoje *3rd International Conference on Current Developments in Atomic, Molecular, Optical and Nano Physics with Applications*, Delhi, 2011.