

# VU TEORINĖS FIZIKOS IR ASTRONOMIJOS INSTITUTAS

(direktorė habil.dr. Gražina Tautvaišienė)

## 2005 m. ATASKAITA

### Darbuotojai, mokslo publikacijos

2005 m. institute dirbo 103 darbuotojai, iš jų 66 mokslo darbuotojai ir kiti tyrėjai (13 habilituotų daktarų ir 32 mokslų daktarai) ir 7 doktorantai. Pagrindinėse pareigose dirbo 38 mokslininkai. Institute veikė penki moksliniai padaliniai: Astronomijos observatorija (AO), Atomo teorijos skyrius (ATS), Branduolio teorijos sektorius (BTS), Plazmos spektroskopijos laboratorija (PSL), Vyksmų ir sandarų teorijos skyrius (VSTS) ir Studijų katedra. Dalis PSL darbų buvo atliekama Tarpinstitutinėje izotopinės analizės laboratorijoje, įsteigtoje kartu su Puslaidininkių fizikos ir Fizikos institutas. VU TFAI planetariume dirbo 19 darbuotojų, iš jų 3 mokslo darbuotojai. Instituto darbuotojai 2005 m. paskelbė 84 VU TFAI vardu įregistruotas mokslines publikacijas, iš jų 52 – užsienio leidiniuose, įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų bazę bei 32, publikuotas kituose žurnaluose bei tarptautinių konferencijų darbuose. Institutas 2005 m. išleido 4 tarptautinio mokslinio žurnalo „Baltic Astronomy“ numerius (ISI žurnalas nuo 2003 metų, 48 sp. l.), monografiją „Fizika ir taikomųjų mokslų pradžia Lietuvoje“, 12-osios tarptautinės daugiakrūvių jonų konferencijos darbus „The Physics of Highly Charged Ions“, du „Fizikų žinios“ numerius, leidinį „Lietuvos dangus 2006“ bei mokymo priemonę „Dvinarės ir daugianarės žvaigždės“. 10 instituto darbuotojų buvo 8 mokslo leidinių atsakingais redaktoriais ir redkolegijų nariais.

### Mokslinė veikla

Pagrindinės instituto mokslinės veiklos kryptys (Lietuvos Respublikos Vyriausybės 2002 02 15 d. nutarimas Nr. 24) yra šios:

1. Efektyvių matematinės fizikos metodų plėtojimas ir taikymas daugiadalelių sistemų, jų netiesinės dinamikos ir kvantuotų laukų teoriniam tyrimui.
2. Atomų, subatominių dalelių, molekulių, jų darinių ir plazmos spektroskopijos tyrimai, jų taikymas nanofizikoje ir astrofizikoje.
3. Galaktikos, žvaigždžių ir tarpžvaigždinės medžiagos struktūros ir evoliucijos tyrimai.

Instituto darbuotojai 2005 metais dalyvavo Europos 6 bendrosios programos „Programuojama dirbtinių ląstelių evoliucija“ (PACE) ir Baltic Grid (BalticGrid) projektuose, COST „Ikibiotinė chemija ir ankstyvoji evoliucija“ (Prebiotic Chemistry and Early Evolution), „Rizikos fizika“, „Integruojanti skaičiuojamoji chemija“ (Integrative Computational Chemistry) ir „Nuo molekulės iki molekulių prietaisų (From Molecules to Molecular Devices: Control of Electronic, Photonic, Magnetic and Spintronic Behaviour) projektuose, „Taivano ir Baltijos padrikųjų žvaigždžių spiečių tyrimai“ (Taiwan Baltic Open Cluster Study) projekte, Europos kosminės agentūros kosminio palydovo „Gaia“, „Visos Žemės teleskopo“ (Whole Earth Telescope, WET) projekte ir kituose tarptautiniuose mokslo projektuose. Organizuoti tarptautiniai Šiaurės ir Baltijos šalių aukštieji astrofizikos kursai „Žvilgsnis į žvaigždžių gelmes“. Vykdam šiuos projektus, o taip pat į stažuotes, mokyklas ir mokslo organizacinius reikalais į užsienį buvo išvykę 23 instituto darbuotojai. Institute lankėsi 17 užsienio svečių.

Instituto darbuotojai dalyvavo organizuojant Lietuvoje rengiamas konferencijas ir parodas. Buvo dalyvauta organizuojant 36-ąją Lietuvos nacionalinę fizikos konferenciją, skirtą pasauliniams fizikos metams, ir XIII Pasaulio lietuvių mokslo ir kūrybos simpoziumą, prisidėta prie mokslo festivalio „Erdvėlavis Žemė“ organizavimo, parengta paroda „Einšteinas ir Visata“. Darbuotojai

taip pat įsijungė į keliaujančios po Europą ES parodos „Termobranduolinės sintezės tyrimai – Energijos pasirinkimas ateičiai“ rengimą. Z.Rudzikas dalyvavo rengiant ir pravedant apskritojo stalo konferenciją „Aktualūs Baltarusijos ir Lietuvos mokslininkų inovacinės veiklos klausimai“ (2005 10 05, *Litekspo* rūmai) bei tarptautinę konferenciją, skirtą Tarptautinio termobranduolinio eksperimentinio reaktoriaus (ITER) parodos atidarymui gruodžio 1 d. *Litekspo* rūmuose. Molėtų observatorijoje, atsiliepiant į Europos Komisijos iniciatyvą, įvyko atvirų durų renginys „Europos ryšio naktis“.

ATS darbuotojai P. Bogdanovičius, R. Karazija, A. Kupliauskienė ir Z. Rudzikas buvo apdovanoti Lietuvos Mokslų akademijos vardine akademiko A. Jucio premija už darbų ciklą „Šiuolaikiniai daugiaelektronų atomų teorijos plėtojimas ir taikymai“ (1984–2004 m.). P.Bogdanovičius gavo LR prezidento padėkos raštą už vadovavimą Lietuvos moksleivių komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje. G. Gaigalas gavo Lietuvos prezidento sveikinimo raštą už gerą mokinių parengimą ES jaunųjų mokslininkų konkursui.

## **FP6 projektai**

Instituto darbuotojai pradėjo vykdyti **“Baltic Grid” (BalticGrid)** (2005 11 01 – 2007 04 30, vad. G.Tautvaišienė) projektą, kuriame dalyvauja 10 institucijų iš 6 Europos šalių. Lietuvai šiame projekte atstovauja VU TFAI ir VU matematikos ir informatikos fakultetas, kordinuojaktys ir kitų Lietuvos mokslo ir studijų bei verslo institucijų įsijungimą į Pabaltijo regiono kompiuterinį tinklą bei darbus lygiagrečiųjų skaičiavimų srityje.

VU TFAI tikslas plėtoti naujų informacinių technologijų taikymą atomo ir branduolio teorijos vystymo darbuose bei astrofizikiniuose tyrimuose: 1) bus vystomi *GAMESS* ir *Gaussian* programinių paketų taikymai, kurių tikslas – nustatyti įvairių organinių, metalo-organinių bei neorganinių molekulių ir jų darinių geometrinę struktūrą ir paaiškinti šių darinių optines ir magnetines savybes. Ypatingas dėmesys bus skiriamas krūvio pernašos tarp molekulių tyrimui. Tai pat bus nustatomas reakcijose dalyvaujančių molekulių potencinės energijos paviršiaus kreivės ir kai kurie svarbūs šio paviršiaus taškai. Remiantis atliktų tyrimų rezultatais bus atliekamas molekulinis prietaisų modeliavimas ir tyrimas, tikintis numatyti naujas technologijas ir medžiagas, pasižyminčias numatomomis savybėmis; 2) branduolio teorijos vystymo tikslu planuojama sukurti paralelinę uždarų sluoksnių modelio kompiuterinę programą, kurią naudojant galima būtų efektyviai spręsti veiksnių su didelės apimties matricomis problemas; 3) planuojama spręsti atomų ir jonų smūginio sužadavimo ir jonizacijos fotonais ir elektronais uždavinius, nustatyti parametrus, aprašančius fluorescencijos ir *Auger* elektronų poliarizaciją ir kampinį pasiskirstymą; 4) planuojama vykdyti kaskadų daugiaelektroniniuose atomuose tyrimus; 5) planuojama vykdyti sintetinių spektrų skaičiavimus, kurių tikslas optimizuoti astrofizikinius žvaigždžių atmosferų parametrus (temperatūra, slėgis, turbulencijos, detali cheminė sudėtis) tyrimus bei sukurti naujus fotometrinių žvaigždžių stebėjimų *GAIA* kosminėje observatorijoje interpretacijos metodus.

ATS toliau vykdė **“Programuojama dirbtinių ląstelių evoliucija” (PACE)** (2004 04 01 – 2008 03 31, vad. A.Tamulis) projektą.

Šiais metais, taikant nuo laiko priklausančius elektronų koreliacijos tankio funkcionalo teorijos metodus, nustatytos elektronų pernašų kryptys šiose schemose: peptidinės nukleininės rūgšties grandinė (PNR) su citozinu (C) ir tyminu, apsupta lipidų sluoksniu ir vandens molekulėmis; o taip pat dviem skirtingom lipidų prekursorių molekulėmis, įjungtomis į PNR grandinę dviem skirtingom sensitizerių molekulėmis ir su įjungta neutralia syringato molekule. Tam, kad sėkmingai vyktų savaiminės replikacijos procesas, taikant tankio funkcionalo metodus, nustatyta, kad, parenkant sensitizerį PNR grandinei su *Adenino* ir *Guanino* (A-G) fragmentu, turi būti patenkinti trys atrankos kriterijai: kurie yra suformuluoti sekančiai: sensitizerio aukščiausia užpildyta

molekulinė orbitalė (*HOMO*) turi būti aukščiau negu lipido; lipido žemiausia neužpildyta molekulinė orbitalė (*LUMO*) turi būti žemiau negu *LUMO* PNR grandinė su *A-G* fragmentu ir sensitizeriu; tarp sensitizerio ir PNR grandinės su *A-G* fragmentu molekulių orbitalių turi būti rezonansinė sąveika. Atlikti kvantinės mechanikos tyrimai parodė, kad viena iš pasiūlytų molekulių gali būti naudojama kaip sensitizeris, kuris prijungiamas prie PNR grandinės su *A* ir *G* bazėmis.

### **Kiti tarptautiniai projektai**

AO skyrius dalyvavo vykdant "**Stromvil fotometrines sistemos kalibravimas**" (2000-2005 m., vad. V. Straizys) projektą.

Vykdamas šį projektą, 2005 m. baigta standartinių žvaigždžių stebėjimų programa. S. Bartašiūtė ir V. Laugalys Arizonos universiteto Stiuardo observatorijoje 1.5 m ir 1 m teleskopais nuo 2004 m. spalio iki 2005 m. vasario stebėjo apie 250 standartinių žvaigždžių su žinomais astrofizikiniais parametrais. Paskelbtas pirmasis straipsnis su 2000–2005 m. stebėtų 780 žvaigždžių fotometrijos rezultatais *Vilniaus* ir *Stromgren* fotometrinėse sistemose, baigiami paruošti dar 2 straipsniai su kalibravimui naudojamų žvaigždžių astrofizikiniais parametrais ir *Stromvil* fotometrinės sistemos spalvos indeksų kalibravimo rezultatais (A. Kazlauskas, V. Straizys).

AO skyrius dalyvavo vykdant projektą "**Padrikųjų žvaigždžių spiečių tyrimas**" (2002-2005 m., vad. G. Tautvaišienė).

2005 m. vykdamas šį projektą, ištirtas padrikasis spiečius NGC 1647 ir jo aplinka, gauta 433 žvaigždžių fotometrija *Vilniaus* sistemoje, atlikta jų fotometrinė spektrinė klasifikacija ir nustatyti atstumai bei tarpžvaigždinė ekstinkcija. Patikslintas spiečiaus nuotolis ir amžius, įvertinti morfologiniai spiečiaus parametrai. Rezultatai paskelbti žurnale *Baltic Astronomy*, **14**, 179, 2005 (J. Zdanavičius, V. Straizys, K. Zdanavičius, A. Kazlauskas, K. Černis ir G. Tautvaišienė bei eilė užsienio autorių iš Taivano ir JAV.). S. Bartašiūtė, ir G. Tautvaišienė paskelbė padriką spiečiaus NGC 7789 milžinių ir raudonosios sankaupos žvaigždžių stebėjimus *Vilniaus* fotometrinėje sistemoje ir nustatė metalingumus ir kitus atmosferų parametrus. Paskelbta publikacija žurnale *Astrophys. & Space Sci*, **294**, 225, 2004; Atliktas spektroskopinis devynių padrikųjų spiečiaus NGC 7789 žvaigždžių atmosferos parametrų nustatymas (G. Tautvaišienė, E. Puzeras ir bendraautoriai iš užsienio). Rezultatai paskelbti žurnale *Astronomy & Astrophysics*, **431**, 933, 2005. Arizonos universiteto Stiuardo observatorijoje 1.5 m ir 1 m teleskopais stebėti fotoelektriniai standartai *Vilniaus* ir *Stromvil* fotometrinėse sistemose padrikuosiuose spiečiuose NGC 1027, NGC 1778, NGC 1807, NGC 1817, NGC 1907, NGC 2129, NGC 2169, NGC 2244, NGC 2264, NGC 6819, NGC 6871, NGC 6913 ir Mellote 15. (S. Bartašiūtė, V. Laugalys). Duomenys apdoroti, atlikta spektrinė šių žvaigždžių klasifikacija. (A. Kazlauskas). Molėtų AO su Maksutovo sistemos ir 165 cm teleskopais, naudojant CCD kamerą, gautos naujos padrikųjų spiečių NGC 6811, NGC 6913 nuotraukos (J. Zdanavičius, K. Zdanavičius). Buvo atliekama 85 žvaigždžių, esančių padrikuosiuose spiečiuose NGC 1883, NGC 1907, NGC 2194, NGC 6996, NGC 7142, NGC 7209, NGC 7772, Basel 12, Basel 15, IC 1369 radialinių greičių analizė (J. Sperauskas).

AO skyrius pradėjo vykdyti „**Artimų Žemei asteroidų ir transneptūninių objektų astrometrija ir fotometrija**“ Pasaulinės laboratorijos koordinuojamą projektą (J. Zdanavičius, K. Černis). Šiame projekte bus ieškoma naujų, prie Žemės artėjančių ir potencialiai pavojingų kosminių kūnų.

ATS darbuotojai dalyvavo vykdamas **NorFA finansuojamame projekte „Kvantinis molekulių medžiagų modeliavimas“ (Quantum Modelling of Molecular Materials (QMMM)**, 2004-2006, vad. A. Tamulis). Šiame projekte nuo laiko priklausančiais elektronų koreliacijos tankio funkcionalo teorijos (TD-DFT) metodais ištirtos neutralios radikalų molekulės, kurios tinka molekulių kvantinių kompiuterių konstravimui.

ATS darbuotojai dalyvavo Crafoord fondo finansuojamame „**Bendradarbiavimas Lundas – Vilnius**“ (2003–2005 m., vad. Z.Rudzikas) projekte, kur buvo atliekami bendri teoretikų ir eksperimentų darbai, tiriant antrojo periodo daugiakrūvių jonų sužadintų būsenų gyvavimo trukmes.

PSL darbuotojai vykdė „**Etalonų priedų metodo metrologinis tyrimas**“ (su BNM-LNE (Laboratoire national d'Essais, Paryžius)), atsakingi G. Labarraque ir P. Serapinas. Vykiant šį projektą parodyta, kad priedų metode cheminių elementų kiekių matavimams taikant tinkamus vidinius etalonus galima pasiekti matavimų tikslumą, palyginamą su izotopų skiedimo metodo matavimų tikslumu. Tarplaboratorinis palyginimas NV-4. As, Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Pb and Zn koncentracijos nutekamuosiuose vandenyse. Vadovas A. Galdikas (PFI); P. Serapinas, V. Aninkevičius, D. Lazauskienė, V. Juzikienė (PFI), E. Naujalis (PFI).

VSTS darbuotojai toliau vykdė projektą pagal iš **Alexander'o von Humboldt'o fondo** gautą paramą instituciniam bendradarbiavimui tarp VU TFAI ir Kaiserslautern'o (Vokietija) universiteto. Vadovai: G. Juzeliūnas (VU TFAI) ir M. Fleischhauer (Kaiserslautern'o universitetas). (2004.07 – 2007.07).

AO skyrius dalyvavo vykdant „**ESA orbitinės observatorijos GAIA instrumentinės bazės optimizavimas**“ (1995-2011 m., mokslinis vadovas M. Perryman (ESA-ESTEC), dalyvauja AO darbuotojai V. Straizys, G. Tautvaišienė, A. Kazlauskas, A. Kučinskas, K. Zdanavičius) projektą.

Šiais metais patvirtintos plačiajuostė ir vidurjuostė fotometrines GAIA sistemos ir perorganizuotos darbo grupės. V. Straizys paskirtas 8-sios komisijos „Astrofizikiniai parametrai“ dviejų darbo grupių – „Tarpžvaigždinė ekstinkcija“ ir „Pekuliariosios žvaigždės“ vadovu (2006–2011). Vykiant šį projektą, nagrinėtas optimalus fotometrijos juostų parinkimas žvaigždžių klasifikacijos požiūriu (K. Zdanavičius), paskelbta publikacija žurnale *Baltic Astronomy*, 14, 104-121, 2005. Apie patvirtintas GAIA fotometrines sistemas ir jų teikiamas galimybes įvairių tipų žvaigždžių astrofizinių parametrų nustatymui paskelbta publikacija elektroniniame leidinyje *Standard Star Newsletter* 39 p. 3-8. (E. Hog, C. Jordi, V. Straizys). Atliktas C, N ir O cheminių elementų gausos žvaigždžių atmosferose pokyčių poveikio žvaigždžių spektrams tyrimas, siekiant atsižvelgti į šiuos efektus parenkant GAIA fotometrines sistemos filtrus (G. Tautvaišienė ir B. Edvardson), paskelbta leidinyje „*The Three Dimensional Universe with Gaia*“, eds. C. Turon, K.S. O'Flaherty, M.A.C. Perryman, ESA SP-576, p. 549-552. Įvertintos ESA orbitinės observatorijos galimybės tiriant Vietinės grupės galaktikas bei jų žvaigždėdaros istoriją. Nustatyta, kad GAIA leis išmatuoti vėlyvųjų milžinių radialinius greičius iki 80 kpc atstumo, savuosius judėjimus – iki 150 kpc. Kartu su metalingumų įverčiais iš fotometrijos (iki ~150 kpc) tai leis tirti žvaigždėdaros istoriją Vietinės grupės galaktikose iki 150 kpc (A. Kučinskas su bendraautorais iš Švedijos, Japonijos, Vokietijos ir kitų Lietuvos institucijų). Paskelbtos trys publikacijos leidinyje „*The Three Dimensional Universe with Gaia*“, eds. C. Turon, K.S. O'Flaherty, M.A.C. Perryman, ESA SP-576, p. 591-594, 619-622 ir 695-698.

AO skyrius dalyvavo vykdant **Tarptautinį projektą „Visos Žemės Teleskopas“ (WET)** (nuo 1986 m., koordinatorius Delavaro astrofizinio tyrimų centras (DARC), JAV, direktorė dr. Judi Provençal, dalyvauja 21 pasaulio observatorija, tame tarpe ir Molėtų AO. Projekte dirba AO darbuotojai R. Janulis ir E. Pakštienė).

Vykiant šį projektą, buvo išanalizuoti kintamosios žvaigždės IP Per WET stebėjimų kampanijos rezultatai. Nustatyta daugiaperiodinė šios žvaigždės pulsacijų prigimtis ir identifikuoti mažiausiai 9 pulsacijų dažniai. Parengtas ir priimtas spaudai straipsnis žurnalui *Astronomy & Astrophysics* (V. Ripepi, R. Janulis ir bendraautorai). 2005 m rugsėjo mėn. 5 – 15 d. Molėtų observatorijoje su Maksutovo sistemos teleskopu ir Vilniaus CCD kamera buvo atliekami baltosios nykštukės PG2303+243 stebėjimai. Nustatyta, kad per metus laiko PG 2303+243 žvaigždės Furje transformacijos spektre ties 1.25 mHz dažniu atsirado didelės amplitudės dominuojančios

pulsacijos, kurių amplitudė stebėtų 5 naktų bėgyje kito nuo 11 mmag iki 33 mmag. Šiuo metu baigiami apdoroti šių stebėjimų rezultatai (R. Janulis, E. Pakštienė).

AO skyrius dalyvavo vykdant **“RGB/AGB žvaigždžių atmosferų bei evoliucijos tyrimai”** (2004-2006, A. Kučinskas ir T. Tanabe) projektą, kurį finansuoja Japonijos Nacionalinė astronomijos observatorija). Vykdant šią temą, pirmą kartą suskaičiuotas vėlyvosios milžinės spektras bei fotometrines spalvas naudojant sferinį (3D) hidrodinaminį modelį *CO<sup>5</sup>BOLD*. Parodyta, jog konvekcija turi pastebimą įtaką vėlyvųjų milžinių spektrams bei fotometrinėms spalvoms (dėl konvekcijos sąlygojamos granuliacijos žvaigždės paviršiuje). Skirtumai spalvose siekia iki 0.25 mag (pvz.  $\Delta(V-K) = 0.2$ , arba  $\Delta T_{\text{eff}} = 70$  K). Be to, vidutinių 3D modelio struktūrų neįmanoma atkartoti su 1D stacionariais žvaigždžių atmosferų modeliais, charakterizuojamais skirtingais maišymosi ilgio parametrais bei turbulencijos slėgiais. Šie rezultatai kiekybiškai įrodo, jog maišymosi ilgio teorija naudojama šiuolaikiniuose žvaigždžių atmosferų bei evoliucijos modeliuose nėra tiksli priemonė konvekcijos traktavimui.

Atliktas detalus vėlyvųjų milžinių sintetinių (PHOENIX, MARCS ir ATLAS modeliai) bei stebėtų fotometrinių spalvų palyginimas prie metalingumų  $[M/H] = 0.0$  ir  $-2.0$ , parodyti fotometrinių spalvų eigos ir skirtumų ypatumai, nustatytos skirtumus sąlygojančios priežastys bei tikslumo ribos. Sukurtos trys naujos pusiau-empirinės  $T_{\text{eff}} - \text{spalvos rodiklis}$  kalibracijos vėlyvosios milžinės bei nauja empirinė  $T_{\text{eff}} - \log g$  skalė vėlyvosios milžinės (prie  $[M/H] = 0.0$ ). Naudojant PHOENIX žvaigždžių atmosferų modelius suskaičiuotas naujas Johnson-Cousins-Glass *BVRIJHKL* sintetinių fotometrinių spalvų tinklas (tinklo parametrai:  $T_{\text{eff}} = 3000 \div 5000$  K,  $\log g = -0.0 \div +3.5$ ,  $[M/H] = +0.5 \div -4.0$ ). Gauti rezultatai paskelbti A. Kučinsko ir bendraautorių straipsnyje žurnale *A&A*, 442, 281-308, 2005, ir leidinyje "Cool Stars, Stellar Systems and the Sun" No13, eds. F. Favata, G. Hussain & B. Battrick, ESA SP-560, p. 319-325. A. Kučinskas taip pat pristatė žodinius ir standinius pranešimus Japonijos astronomų draugijos metinėje konferencijoje, vykusioje 2005 m. spalio mėn. 5–8 d. ir IAU simpoziume 232, vykusiame Keiptaune (PAR) 2005 m. lapkričio 14-18 d. Pastarojo simpoziumo medžiaga bus publikuojama leidinyje "The Scientific Requirements for Extremely Large Telescopes", eds. P. Whitelock, B. Leibundgut, M. Dennefeld, IAU Symp. 232.

### ***COST ir PHARE projektai***

VSTS darbuotojai dalyvavo vykdant COST D26 **“Integruojanti skaičiuojamoji chemija”** (2004 05 27 – 2006 10 25). Jame dalyvauja 18 šalių mokslininkai ir G.Vektaris (kartu su Biochemijos institutu) G. Vektaris 2005 m. parašė programą apdorojančią kvantinės chemijos skaičiavimų programos GAMESS išvesties failus ir ištraukiančią reikiamą informaciją.

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant COST D27 **„Prebiotinė chemija ir ankstyvoji evoliucija“** (*Prebiotic Chemistry and Early Evolution*) (2002 – 2007) projektą. Jame dalyvauja A.Tamulis ir kt. mokslininkai iš 20 šalių. Vykdant šią temą tirta, kokia gyvybės forma pirmiausia atsirado Žemėje ir kosmose, bei bandoma sukurti programuojamus nano biorobotus. Keliose pasaulio mokslinėse laboratorijose eksperimentiškai kuriamos paprasčiausios nanometrinių dydžio gyvybės rūšys. Todėl teoriškai modeliuojami tokios gyvybės savaiminio susidarymo, augimo bei dauginimosi vyksmai. Kvantiniais elektronų koreliacijos DFT naujausių potencialų metodais sumodeliuotas JAV Los Alamos Nacionalinėje laboratorijoje (LANL) gaminamo dirbtinio gyvio fotosintetinės sistemos savi-susidarymas iš vandenyje esančių peptidinės nukleininės rūgšties (PNR), sensitizerių ir lipidų prekursorių molekulių. Klasikinės molekulių dinamikos (GROMACS) programų paketu sumodeliuotas visas dirbtinis gyvis, apvilktas lipidų dvigubo sluoksnio membrana ir sudarytas iš šimtų tūkstančių atomų.

ATS darbuotojai vykdė COST D35 „**Nuo molekulių iki molekulinio prietaisų**“ (2005 01 21-2010 02 21, vad. A. Tamulis) projektą. Šiais metais kvantiniais elektronų koreliacijos DFT naujausių potencialų metodais sumodeliuoti molekuliniai XOR bei CntrlNot loginiai vartai, tinkami molekulinio elektroninio ir spintroninio nano prietaisų konstravimui.

VSTS darbuotojai dalyvavo vykdant COST P10 „**Rizikos fizika**“ (2004 05 27 – 2006 10 25) ir LVMSF parama dalyvavimui COST P10 'Rizikos fizika' programos veikloje (2005.01 – 2005.12). Jame dalyvauja 21 šalies mokslininkai. Lietuvos atstovai vykdomajame komitete yra V.Gontis ir B.Kaulakys. 2005 metais detalai aprašytas paprastas taškinio vyksmo modelis, kurio signalo galios spektrinis tankis yra  $1/f^\beta$  pobūdžio su įvairiomis laipsnio rodiklio  $\beta$  reikšmėmis. Signalą šiame modelyje sudaro impulsų arba įvykių seka. Įvairiai vadinamas (tarpimpulsinis, tarp įvykių, tarp atvykimų, rekurentinis ar laukimo laikas) pasiūlytame modelyje aprašomas apibendrinta Lanževano lytimi su multiplikatyviuoju triukšmu, t.y., jis difuziniu būdu stochastiškai kinta užduotame intervale, pasiskirstydamas pagal laipsninį skirstinį. Išvestos netiesinės stochastinės diferencialinės lygtys signalui su  $1/f^\beta$  pobūdžio spektriniu tankiu ir  $1/x^\lambda$  intensyvumo skirstiniu įvairioms parametru  $\beta$  ir  $\lambda$  reikšmėms. Metodas gali būti panaudotas analizuoti stochastinius procesus įvairiose sistemose, kur pasireiškia laipsniniai skirstiniai, ilgalaikės autokoreliacijos ir saviorganizacijos elementai. Pasiūlytas paprastas informacijos srautų kompiuterių tinkluose modelis su ilgalaikėmis autokoreliacijomis ir laipsniniu spektriniu tankiu. Modelis informacijos srautą vaizduoja kaip Puasono seką bylų, kurių dydis yra atsitiktinai pasiskirstęs pagal laipsninį dėsnį. Tokiame modelyje ilgalaikės autokoreliacijos yra nepriklausomos nuo tinklo savybių ir nuo laiko tarp atvykstančių paketų pasiskirstymo.

PSL darbuotojai vykdė „**Patikimos infrastruktūros chemijos matavimų srityje Lietuvoje pagal geriausią ES praktiką tobulinimas**“ (PHARE projektas Nr. 2003.004-341.03.02) (Developing reliable infrastructure in the fields of measurements in chemistry in Lithuania according to the best EU practices, 2004-2006, 1.85 MEUR) projektą. Projekto vadovas V. Zabolotnas (Valstybinė metrologijos tarnyba). P. Serapinas – vienas iš trijų dalių koordinatorius, kaip plazmos fizikos ir cheminių matavimų neapibrėžties ekspertas. Koordinuotas Lietuvos ir Vokietijos atitinkamų įstaigų darbas pagal pirmąją projekto dalį, teikti siūlymai matavimų chemijoje sistemos tobulinimui, naujai Metrologijos įstatymo redakcijai, dalyvauta ekspertais CPVA sudarytos cheminių matavimų įrangos pirkimo konkurso komisijos darbe ir atrinkta atitinkama įranga.

### ***Struktūrinių fondų ir kiti Lietuvos projektai***

PSL darbuotojai vykdė „**Mokslinės kompetencijos ir tęstinio mokymo plėtra saugioms ir ekologiškoms maisto žaliavoms gaminti**“ (MOKOTEM) projektą. Jis vykdytas, įgyvendinant 2004-2006 metų Bendrojo programavimo dokumento 2.4 priemonę „Mokymosi visą gyvenimą sąlygų plėtojimas“, registracijos Nr. ESF/2004/2.4.0-K-01-090/SUT-240, kartu su LŽŪU ir KPKC, projekto vadovas V. Pranckietis (LŽŪU), trukmė 2005 m. – 2008 m., VU TFAI projekte dirba P. Serapinas ir J. Šalkauskas. Pagrindinis darbo rezultatas yra saugių ir ekologiškų maisto žaliavų mokymo priemonės skyriaus „Augalinės žaliavos falsifikavimo išvengimo galimybių tyrimų metodai“ parengimas bei perskaitytas atitinkamas paskaitų ciklas LŽŪU dėstytojams. Taip pat atlikti kai kurių žemės ūkio žaliavų elementinės sudėties tyrimai.

VSTS darbuotojai dalyvavo vykdant prioritetinės Lietuvos mokslinių tyrimų ir eksperimentinės plėtros programos mokslinių tyrimų projektą „**Naujos kartos nanometrinių protakų su dvimatėmis elektronų dujomis fliuktuacinė spektroskopija (FLIUKTUACIJOS)**“ (2005 m. liepa – 2006 m. birželis). Už projekto vykdymą atsakinga institucija PFI; kartu su TFAI, VU FF, KTU FEI. Vykdytojai nuo TFAI B. Kaulakys, M. Alaburda ir J. Ruseckas. Vykdančią šį projektą

sukurtos kompiuterinės programos, skirtos skaitiniam taškinių ir iš įvairios formos impulsų sudarytų stochastinių signalų generavimui, jų skirstinių, spektrų, multifraktališkumo ir kitų charakteristikų analizei bei pademonstruotas programų tinkamumas suformuluotiems tikslams. Sukurtos ir aprašytos bendros signalų generavimo, pasiskirstymų nustatymo, spektrų generavimo klasės. Vėliau kiekviena šių bendrųjų klasių buvo papildyta išvestinėmis klasėmis, kur kiekviena išvestinė klasė aprašo konkretų modelio generavimo ar įvairių charakteristikų skaičiavimo algoritmą. Išvestinių klasių naudojimas leidžia greitai pakeisti ar papildyti skaičiavimo modelį. Užtenka sukurti naują modelį atitinkančią išvestinę klasę, nekeičiant bendrosios klasės.

### ***VU TFAI Tarybos patvirtintos temos***

AO skyrius dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą **“Guldo juostos žvaigždėdaros rajonų ir dulkių debesų tyrimas”** (2003–2005 m., vad. V. Straižys, vykdytojai: S. Bartašiūtė, K. Černis, A. Černiauskas, A. Kazlauskas, V. Laugalys, G. Valiauga, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius) temą. Vykdam šią temą, ištirta tarpžvaigždinė ekstinkcija ir žvaigždžių pasiskirstymas Galaktikoje Cam OB3 asociacijos kryptimi (V. Straižys, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius). Paskelbtos dvi publikacijos žurnale *Baltic Astronomy*, **14**, 31-40, 2005 ir **14**, 313-322, 2005. Ištirta tarpžvaigždinė ekstinkcija molekulinio debesies MBM12 Avino žvaigždyne kryptimi (V. Straižys, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius, A. Kazlauskas, K. Černis, V. Laugalys). Rezultatai pristatyti sausio mėn. vykusiam JAV astronomų draugijos (AAS) suvažiavime San Diege (Kalifornija). (AAS 205 5905, 2004). Molėtų observatorijoje gauta CCD stebėjimų medžiaga Vilniaus fotometriniame sistemoje šiuose sklypuose: spiečiai NGC 6811, M29, NGC 1027 ir Mel 15, Cefejo debesis NGC 7023, standartinė aikštelė SA 64. Rezultatai apdorojami (V. Straižys, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius, J. Černiauskas, G. Valiauga, V. Laugalys).

AO skyrius dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą **„II populiacijos vizualinės dvinarės ir daugianarės žvaigždės: astrometrinės, fotometrines ir kinematinės charakteristikos“** (2002–2005 m., vad. A. Bartkevičius, vykdytojai: J. Sperauskas, D. Bartkevičienė) temą. Vykdam šią temą, išanalizuoti 91 II populiacijos dvinarės radialiniai greičiai. Atrastos 9 naujos dvinarės žvaigždės su kintamu radialiniu greičiu. BD +39 1828 nustayta preliminarinė orbita  $P = 5.3$  d. (A. Bartkevičius, J. Sperauskas). Rezultatai publikuoti žurnale *Baltic Astronomy*, **14**, 511-525, 2005. Ištirta storjo disko dvinarės žvaigždės BD +82 565 A nario spektroskopinė orbita. Atlikta sistemos analizė. Tyrimo rezultatai paskelbti žurnale *Baltic Astronomy*, **14**, 527-533, 2005. Atlikta vizualinių orbitinių dvinarių erdvinių atstumų tarp narių analizė (A. Bartkevičius, D. Bartkevičienė). MAO su 0.63 m ir 1.65 m teleskopais ir radialinių greičių matuokliu išmatuoti 21 didelio greičio vizualinių dvinarių žvaigždžių radialiniai greičiai (115 atskirų matavimų). Gauta preliminarinės spektroskopinės orbitos žvaigždės: BD +39 1828 ( $P = 5.3$  d), HIP 375D ( $P \sim 7$  d), BD +20 5152 ( $P = 5.715$  d) (A. Bartkevičius, J. Sperauskas).

AO skyrius dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą **„Žvaigždžių atmosferų cheminė sudėtis ir evoliucija“** (2005 – 2009 m., vad. G. Tautvaišienė, vykdytojai: E. Puzeras, E. Stasiukaitis, A. Ivanauskas, A. Kaučikas, Š. Mikolaitis, J. Čornij bei eilė bendraautorių iš Švedijos, Italijos, JAV, Kanados, Čilės, Šveicarijos) temą. Vykdam šią temą, baigiama ištirti apie 70-ties Galaktikos lauko raudonosios sankaupos žvaigždžių detali atmosferų cheminė sudėtis (pirmieji rezultatai paskelbti konferencijose, vykusiose Hamburge (Vokietija) ir Arcetryje (Italija) (G. Tautvaišienė, E. Puzeras, E. Stasiukaitis, A. Ivanauskas). Buvo analizuojami milžinių ir raudonosios sankaupos žvaigždžių aukštos dispersijos spektrai, gauti La Palmoje (Kanarų salos) veikiančiu 3.5 m Italijos teleskopu Telescopio Nazionale Galileo padrikuosiuose spiečiuose NGC 2506, NGC 6134, NGC 6819, Collinder 261, IC 4651 (G. Tautvaišienė, A. Ivanauskas, Š. Mikolaitis). Atlikta detali spektroskopinė šešių padrikojo spiečiaus NGC 7789 milžinių ir trijų raudonosios sankaupos žvaigždžių analizė, nustatyti apie 20 cheminių elementų santykiniai gausumai šių žvaigždžių

atmosferose (G. Tautvaišienė, E. Puzeras ir bendraautorai iš užsienio). Rezultatai paskelbti žurnale *Astronomy & Astrophysics*, **431**, 933, 2005. Su VLT 8.2 m teleskopu pirmą kartą gauti ir pradėti analizuoti trijų vietinės grupės galaktikos IC 1613 žvaigždžių spektrai (G. Tautvaišienė), pirmuosius rezultatus bendraautorius D. Geisleris pristatė konferencijoje Pietų Afrikoje.

AO skyrius dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą „**Pozicinė neįprastųjų asteroidų ir kometų astrometrija**“ (2005 - 2009 m., vad. K. Černis, vykdytojai: R. Janulis, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius) temą. Vykdam šią temą, SOHO orbitinės observatorijos nuotraukose atrastos 4 naujos kometos (K. Černis). Apie atradimus paskelbta IAU cirkuliaruose Nr. 8475 (kometa C/2005 B2), Nr. 8516 (kometa C/2005 D3), Nr. 8570 (kometa C/2005 L10) ir Nr. 8576 (kometa C/2005 M10). Kometų orbitų elementai publikuoti leidiniuose M.P.E.C. Nr. 2005-B62 (kometa C/2005 B2). Nr. 2005-G40 (kometa C/2005 D3), Nr. 2005-N75 (kometa C/2005 L10) ir Nr. 2005-O35 (kometa C/2005 B2). Buvo atliekama vizualinė 6 kometų fotometrija. (K. Černis). Fotometrijos rezultatai paskelbti žurnale *International Comet Quarterly* Nr. **27**, No.2, 104-122, 2005. ir Nr. **27**, No.3, 171-206 (2005). Molėtų AO buvo atliekama 5 kometų stebėjimo programa, siekiant patikslinti jų orbitų elementus (K. Černis, J. Zdanavičius). Rezultatai publikuoti leidiniuose M.P.E.C. Nr. 2005-U04 ir Nr. 2005-V88 (kometa P/2005 R1 NEAT), Nr. 2005-V90 (kometa P/2005 S3, Read), Nr. 2005-V91 (kometa P/2005 T2, Christensen), ir Nr. 2005-V95 (kometos P/2005 S2, Skiff ir P/2005 R2, Van Ness). Molėtų AO buvo vykdoma asteroidų stebėjimų ir jų paieškų programa. MAO stebėta daugiau kaip 963 skirtingi asteroidai, 5 kometos, jų tarpe NEO, TNO objektai, paskelbta 4263 astrometrinės pozicijos. Atrasti 36 nauji asteroidai (K. Černis, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius). Rezultatai skelbti leidiniuose M.P.C. Nr. 53631, 54346, 54967 ir pristatyti Ukrainoje, Krymo observatorijoje rugsėjo mėn. vykusioje jubiliejinėje konferencijoje.

ATS darbuotojai pradėjo vykdyti VU TFAI Tarybos patvirtintą „**Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams: teorija ir interpretavimas**“ (2005 – 2009 m., vadovas R. Karazija) temą. Šiais metais parodyta, kad atomams su atvirais elektronų sluoksniais įvedant plačiai naudojamus dydžius – vakantinių būsenų natūraliuosius pločius, yra daroma paklaida, įvertintas jos dydis. Nustatyti ir paaiškinti  $L_1$ - $M_{4,5}$  kvadrupolinių elektrinių šuolių lantaniduose dėsningumai. Remiantis statistiniais duomenimis, nustatyti kai kurie bendri Lietuvos fizikos raidos XX a. II pusėje dėsningumai.

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą „**Reliatyvistinių ir koreliacinių pataisų skaičiavimo metodų plėtra ir jų taikymas sunkiųjų bei vidutinio sunkumo atomų diskretiniams spektrams tirti**“ (2002 – 2006, vad. P. Bogdanovičius) temą. Vykdam planinę temą sudaryti keli kvazireliatyvistinių Hartrio ir Foko lygčių variantai, sukurtos atitinkamos programos, patikrintas tų lygčių variantų tinkamumas. Parodyta, kad sprendžiant kvazireliatyvistines lygtis nereikia naudoti supaprastintų aproksimacinių potencialų. Planinės temos rėmuose, kartu su Olsterio universiteto astrofizikais, atliktas geležies dvidešimt antrojo jono spektrinių charakteristikų tyrimas ir rezultatų lyginimas su daugiakonfigūraciniu Dirako, Hartrio ir Foko metodu. Tiriant daugiakrūvius jonus pirmą kartą pereita nuo atskirų jonų spektrų analizės prie ilgos izoelektrinės sekos nagrinėjimo, analizuojant dvielektronių šuolių reikšmę konfigūracijos  $2s3p$  lygmenų gyvavimo trukmėms. Tiriant deguonies izoelektroninę seką pirmą kartą nuosekliai išanalizuota koreliacinių pataisų įskaitymo galimybė priklausomai nuo atrinktų pataisinių konfigūracijų kiekio. Šiomet palyginus daug teko dirbti už planinės temos ribų. Parašytas apžvalginis straipsnis apie R. Wybourne metodo taikymą teoriniuose skaičiavimuose.

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą „**Poliarizacijos reiškinų teorinis nagrinėjimas atomų ir jonų jonizacijos procesuose**“ (2002 06 – 2006, vad. A. Kupliauskienė) temą. 2005 metais kartu su VU FF darbuotojais (doc. K. Glemža ir studentai), naudojant atomo teorijos metodus, pritaikytus poliarizacijos reiškiniams tirti, ir Borno artinio operatoriaus panašumą į fotojonizacijos operatorių, surasta bendroji poliarizuoto atomo jonizacijos



greitais nepoliarizuotais elektronais diferencialinio skerspjuvio išraiška. Ji panaudota lėtesniojo elektrono kampinio pasiskirstymo ir jonizuoto atomo rikiavimo parametrus surasti, kai jonizuojami poliarizuoti ir nepoliarizuoti atomai, bei poliarizuoto atomo jonizacijos pilnutinio skerspjuvio magnetiniam dichroizmui aprašyti. Borno artinyje surasta poliarizuotų atomų sužadavimo greitaisiais nepoliarizuotais elektronais diferencialinio skerspjuvio bendroji išraiška, išvesti poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinio skerspjuvio magnetinis dichroizmas bei nepoliarizuotais elektronais sužadinto atomo rikiavimas kaip atskiri bendrosios išraiškos atvejai.

Kartu su JAV, Ukrainos ir Rusijos mokslininkais teoriškai ir eksperimentiškai tirta K atomo  $3p^6 4s^2 S_{1/2} \rightarrow 3p^5 4s^2 P_J$  sužadavimo skerspjuvio padidėjimo ties 22 eV žadinančio elektrono energija priežastis. Buvo atlikti labai tikslūs radiacinių šuolių  $3p^5(4s4pL_1S_1)LSJ \rightarrow 3p^5 4s^2 P_J$  ir  $3p^5(4s4pL_1S_1)LSJ \rightarrow 3p^6 4p P_J$  energijų, bangų ilgių ir tikimybių skaičiavimai. Padaryta išvada, kad eksperimente pastebėtas maksimumas atsiranda ne dėl kaskadinių šuolių iš aukštesnių lygmenų. Jis galėtų būti neigiamo K jono rezonansas.

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant VU TFAI Tarybos patvirtintą „**Šiuolaikinis atomo teorijos uždavinių modeliavimas remiantis įprastu ir simboliniu programavimu**“ (2003 – 2007, vad. G. Gaigalas) temą. Tarp gautųjų šiomet rezultatų verta paminėti izosukinio formalizmo *LS* ryšyje dviem atviriems sluoksniams realizaciją *Maple* programavimo kalboje (paketas *Jahn*).

BTS darbuotojai vykdė VU TFAI Tarybos patvirtą „**Elementariųjų dalelių barionų bei jų sistemų tyrimai, taikant grupių ir kvantinių algebrų teorijos metodus**“ (2001 – 2005 m., vad. S. Ališauskas) temą. Vykdamas baigiamą temą, E. Norvaišas, A. Acus, D. Jurčiukonis ir V. Regelskis 2005 m. toliau teoriškai nagrinėjo *Skyrme* modelį. Elementariųjų dalelių ir branduolio fizikoje plačiai taikomas  $SU(3)$  *Skyrme* modelis buvo apibendrintas bet kuriam šios grupės įvaizdžiui. Taikant kanoninio kvantavimo procedūrą buvo gautos tikslios energijos funkcionalo bei kitų fizikinių dydžių išraiškos kolektyvinių koordinacių artutinyje. Nustatyta chiralinę simetriją pažeidžiančio nario, bei *Wess*, *Zumin* ir *Witten* nario priklausomybės nuo įvaizdžio  $SU(2)$  *Skyrme* modelyje racionalaus atvaizdžio artutinyje buvo taikytas tirti keturių nukleonų branduoliui ir, konkrečiai, helio fizikinėms charakteristikoms apskaičiuoti. Naudojant *Manton* pasiūlytą racionalių atvaizdžių aproksimaciją buvo išspręstos 2004 metais išvestos lygtys (galiojančios bet kurioms racionalių atvaizdžių aproksimacijoms bei visiems  $SU(2)$  grupės įvaizdžiams) ir apskaičiuotos svarbiausios šio branduolio charakteristikos: masė, radiusas ir krūvio formos faktorius įvairiems  $SU(2)$  grupės įvaizdžiams. Apskaičiuoti šio branduolio elektriniai formos faktoriai. Ištirta helio branduolio apskaičiuotų fizikinių dydžių priklausomybė nuo įvaizdžių. Rasta su modeliu susijusi įdomi topologinių integralų šeima. Nors užrašytos analizinės išraiškos kol kas įrodyti nepavyko, tačiau didelio tikslumo skaitinis integravimas rodo, kad formulė yra teisinga visoms racionalioms funkcijoms. Modifikuotame MIT maišų modelyje (V. Šimonis) buvo suskaičiuotos sunkiųjų hadronų (su vienu, dviem bei trimis *c* ar *b* kvarkais) pagrindinių būsenų masės. S. Ališauskas tęsė kvantinių grupių formalizmo tyrimus ir fizikinių taikymų paieškas, studijavo *Yang* ir *Baxter* lygčių sprendinius, pagrįstus Lie algebrų ir kvantinių grupių įvaizdžių teorija, ryšius su simetrinių grupių ir Hecke's algebrų savybėmis. Naudodami bozonų koncepcijos formalizmą konstruojant unitariųjų grupių neredukuotinių įvaizdžių pagrindines būsenas ir pletizmo teoremą apie redukavimo taisyklę, O. Katkevičius su bendraautorais iš Latvijos ir Brazilijos gavo redukuotinio pletizmo dimensijų formulę. Ši formulė apibendrinta *k*-redukuotinio pletizmo atvejui. Be to, atlikti skaičiavimai ir ruošiamas straipsnis apie nelyginių - nelyginių  $Z=N$  branduolių ( $A < 41$ ) energetinių būsenų ir perėjimo tikimybių bei magnetinių dipolinių momentų skaičiavimus.

PSL darbuotojai vykdė VU TFAI Tarybos patvirtą temą „**Jonizacijos dujų plazmoje su kondensuotomis dalelėmis tyrimas masių spektrometrijos metodu**“ (2004-2008, vad. P. Serapinas; vykdytojai J. Šalkauskas, Ž. Ežerinskis, V. Aninkevičius, V. Juzikienė (PFI), E. Naujalis (PFI)). Atlikti preliminarūs pusiausvyrinio modeliavimo skaičiavimai, derinant su eksperimentiniais

duomenimis. Taip pat buvo vykdyti Cu, Zn, Mn ir Se tyrimai reumatinių ligonių kraujyje pagal susitarimą su VU Eksperimentinės ir klinikinės medicinos institutu (dr. B. Butkienė ir L. Jasevičiūtė). Atlikti elementų kiekių matavimai apie šimte kraujo serumo ėminių.

VSTS darbuotojai vykdė VU TFAI Tarybos patvirtą temą **“Šaltų atomų ir kondensuotų darinių optinių savybių teorijos plėtra”** (2005-2009 metai, vad. G.Juzeliūnas). Vykdamas šią temą Teoriškai išnagrinėtas dviejų šviesos pluoštų, turinčių santykinį orbitinį judesio kiekio momentą, poveikis šaltų atomų dujoms. Naudojantis adiabatine aproksimacija gautos atomų, esančių tamsioje būsenoje, masių centro judėjimo lygtys. Lygtyse atsiranda nariai, analogiški magnetinio lauko vektoriniam potencialui, bei papildomas skaliarinis potencialas. Išnagrinėti du atvejai, kai efektyvusis vektorinis potencialas negali būti eliminuotas: šviesos pluoštai sklindantys ta pačia kryptimi ir turintys šviesos sukurius bei priešpriešiais sklindantys šviesos pluoštai. Efektyviojo magnetinio lauko erdvinį pasiskirstymą galima reikiama suformuoti, pasirenkant atitinkamos formos šviesos pluoštus. Todėl atomų dujose gali pasireikšti elektronų teorijoje žinomų magnetinių efektų analogai, nors patys atomai yra elektriškai neutralios dalelės, kurių neveikia tikras magnetinis laukas. Daugelio lygmenų atomams, kai egzistuoja kelios išsigimusios adiabatinės būsenos, galima gauti efektyviuosius neabelinius laukus. Buvo išnagrinėta tripodo lygmenų schema, gautos sąlygos kada potencialai yra neabeliniai. Naudojant statmenus šviesos pluoštus su orbitiniu judesio kiekio momentu galimas efektinis magnetinis laukas turintis magnetinio monopolio lauko dedamąją. Nagrinėtas savaiminis spinduliavimas prie dviejų susikertančių metalo paviršių. Skirtingai nuo ankstesnių tyrimų, dabar metalo paviršiai gali susikirsti nebūtinai stačiu kampu. Ištirta savaiminio gesimo priklausomybė nuo atomo orientacijos, erdvinės padėties bei plokštumų susikirtimo kampo.

VSTS darbuotojai vykdė VU TFAI Tarybos patvirtą temą **“Laipsniniai skirstiniai ir 1/f fluktuacijos dinaminėse chaotinėse ir stochastinėse sistemose”** (2005-2009 metai, vad. B.Kaulakys). Vykdamas šią temą Apibendrintas ir visapusiškai ištirtas taškinių vyksmų modelis, kurio signalo galios spektrinis tankis yra  $1/f^\beta$  pobūdžio su įvairiomis laipsnio rodiklio  $\beta$  reikšmėmis. Šio modelio generuojamo signalo statistinės savybės palygintos su kito žinomo (*McWhorter*) modelio, kai signalas sudaromas iš įvairiomis tiesinės relaksacijos trukmėmis signalų sumos. Parodyta, kad taškinių vyksmų modelis, priešingai *McWhorter* modelio signalų intensyvumo Gauso skirstiniui, generuoja signalus su laipsniniais intensyvumo skirstiniais. Įvairūs tarpimpulsinio, tarp įvykių ir pan. trukmių kitimo modeliai su įvairiais skirstiniais sąlygoja  $1/f^\beta$  triukšmus su artimais laipsniniais intensyvumo skirstiniais. Iš autoregresinio taškinio modelio gauta ir išanalizuota stochastinių netiesinių diferencialinių lygčių klasė. Šių lygčių generuojamų signalų savybės analogiškos atitinkamo taškinio vyksmo signalų savybėms. Parodyta, kad taškinių vyksmų modelio generuojami signalai yra multifraktaliniai. Priešingai *McWhorter* modelio signalams, kurie yra monofraktaliniai. Nustatyta, kad taškinis procesas, aptinkamas keturmačiuose fraktaluose, kilusiuose iš netiesinio logistinio atvaizdžio kvaternijonams, yra  $1/f$  tipo triukšmas kaip norima plačiame dažnių  $f$  intervale. Ištirtos Mandelbroto aibės savybės tuo atveju kai parametras  $r$  ir kintamieji  $z_n$  yra kvaternijonai, o  $1$  yra kvaternijoninis vienetas. Klasikinė Mandelbroto fraktalinė aibė apibrėžta kompleksinėje erdvėje, o kvaternijonų aritmetika apibendrina kompleksinę keturmačiams dydžiams. Ištirtos įvairios dvimatės (2D) kvaternijoninės Mandelbroto aibės projekcijos, fiksuojant dvi  $r$  komponentes lygias 0, o likusioms dviem leidžiant kisti. Nustatyta, kad, priklausomai nuo kintančių  $r$  komponentių pasirinkimo, šios dvimatės projekcijos arba sutampa su Mandelbroto aibe (fraktalu) kompleksinėje erdvėje, arba yra sudarytos iš skritulio ir begalinio skaičiaus fraktališkai išsidėsčiusių apskritimų, gaubiančių skritulį. Gauta, kad taškinis procesas, sudarytas iš tokių fraktalinių apskritimų spindulių, yra  $1/f$  triukšmas kaip norima plačiame dažnių  $f$  intervale.

VSTS darbuotojai pradėjo vykdyti VU TFAI Tarybos patvirtą temą **“Daugiatomių junginių elektroninių spektrų ir cheminio reakcingumo teorijos plėtra”** (2005-2009 metai, vad. V. Gineitytė). Buvo toliau plėtojamas anksčiau pasiūlytas originalus cheminių reakcijų teorinio tyrimo būdas, besiremiantis nekanoniniu molekulinėse orbitalėse metodu. Siekta išaiškinti tarpmolekulinės cheminės sąveikos, atsirandančios reakcijos pradžioje, įtaką dalyvaujančių molekulių vidinės sandaros kitimui alilo jonų (katijono ir anijono) pavyzdžiu. Plėtojant alternantinių angliavandenilių ir jų darinių elektroninės sandaros teoriją, gautos algebrinės išraiškos vadinamųjų perturbuotųjų alternantinių angliavandenilių bendros vienelektronės tankio matricos antros eilės pataisoms ir ištirtas šių pataisų vaidmuo cheminių jungčių stiprumo kitimams veikiant perturbacijai. Vienelektronės tankio matricos ir stabilizacijos energijos išraiškos palygintos tokioms molekulėms, kurios susiformuoja iš to paties angliavandenilio veikiant skirtingoms perturbacijoms. Nustatytas įdomus ir netrivialus šių molekulių elektroninės sandaros panašumas. Detaliai išnagrinėtas pavyzdys – piridino ir bifenilo molekulės. Anksčiau pasiūlyta blokinės diagonalizacijos uždavinio molekulės hamiltoniano matricai ir komutacinės lygties vienelektroninei tankio matricai sprendimo metodika pritaikyta taip pat alternantinių angliavandenilių dariniams su elektrono-donoriniais ir akceptoriniais pakaitais. Gautos algebrinės išraiškos šių sistemų tankio matricos eilutei ir nekanoninėms jų molekulinėse orbitalėse. Nustatyti bendri elektroninio tankio pasiskirstymo dėl pakaitų įtakos šiose sistemose dėsniniai. Pasiūlytas paprastas dviejų orbitalių modelis alternantinių angliavandenilių darinių elektroninei sandarai atvaizduoti, kuriame išskiriama sąveika tarp pakaito orbitalės ir vienos nekanoninės angliavandenilio molekulinės orbitalės.

Teoriškai apskaičiuoti SbSeI kristalo spektrai (V. Lazauskas, J. Narušis). Jie aproksimuoti ir gerai dera su pirmą kartą pasaulyje išmatuotais fotoelektroniniais spektrais. Nustatyta, kokios elektroninės būsenos lemia fotoelektroninių spektrų juostų formas. Teoriška tirtas  $A^5B^6C^7$  ( $A^5=Sb$ ;  $B^6=Bi$ ;  $I, C^7=Br, Cl$ ) kristalų optinių savybių pasikeitimas fazinio virsmo metu. Naudojant molekulinio klasterio modelį nustatyta, kad ne tik valentinių, bet ir vidinių elektroninių juostų lygmenys priklauso nuo gardelės atomų poslinkio. Eksperimentinis Rentgeno spektras palygintas su teoriniu būsenų tankiu, kuriame atsižvelgta į klasterių SbSI ir SbSeI virpesių būsenas.

VSTS darbuotojas G. Vektaris kartu su BCHI vykdė elektrofilinio prisijungimo reakcijų prie asimetrinių  $\alpha,\beta$ -nesočių darinių  $\pi$  ryšio teorinę analizę. Buvo atliekama pradinių junginių molekulių, jų reakcijos produktų, bei reakcijos metu susidarančių tarpinių junginių geometrijos optimizacija pusiau empiriniais ir tankio funkcionalo metodais bei jų elektroninės sandaros teorinis tyrimas. Gauta, kad solvatacinė aplinka stipriai poliarizuoja vieno iš regentų metilsulfenchlorido molekulę, ko pasėkoje S-Cl jungtis, poliarizuojama iki ryšio, artimo joniniam. Todėl metilsulfido katijono kaip individualios dalelės egzistavimas gali inicijuoti elektrofilinio prisijungimo prie nesočios jungties reakcijos pradžią. Dėl šios priežasties metilsulfido katijonui buvo suskaičiuotas ir įvertintas ribinių orbitalių užpildymas. Gauti rezultatai rodo, kad metilsulfido katijonas gali lengvai reaguoti su įvairiais alkenais, sudarydamas katijono tipo tarpinius kompleksus.

## **Pedagoginė veikla**

2005 m. institutui kartu su VPU suteikta dar viena fizikos krypties (P190, P260, P520) doktorantūros teisė. 2005 m. pabaigoje institute mokėsi 7 fizinių mokslų fizikos doktorantai (J. Ruseckas, M. Mašalas, O. Rancova, D. Jurčiukonis, V. Nelkinas, A. Černiauskas ir Vokietijos pilietis O. Scharf), du iš jų priimti 2005 metais. 2005 m. institute apginta viena fizinių mokslų (fizikos) daktaro disertacija (M. Alaburda). P. Bogdanovičius vadovauja moksliniam aspirantės iš Jakutijos M.K. Amosovo vardo valstybinio universiteto darbui.

2005 m. rugpjūčio 7–21 d. VU TFAI Molėtų observatorijoje jau trečią kartą vyko Šiaurės ir Baltijos šalių aukštieji astrofizikos kursai pavadinimu **“Žvilgsnis į žvaigždžių gelmes”** (koordinatore G. Tautvaišienė). Kursų tema ši kartą buvo žvaigždžių pulsacijos ir astroseismologija. Kursų dalyviai buvo supažindinti su stebėjimų metodais ir teorinėmis žvaigždžių gelmių

modeliavimo galimybėmis, su žvaigždžių dėmių, kurios atsiranda dėl magnetinių laukų kitimo, dydžio ir nustatymo būdais. Kursuose mokėsi 22 dalyviai iš Danijos, Estijos, Latvijos, Lietuvos, Norvegijos, Portugalijos, Rusijos, Suomijos ir Švedijos. Paskaitas, pratybas ir stebėjimus vedė žinomi pasaulio mokslininkai iš Danijos, Norvegijos, Pietų Afrikos respublikos, Šveicarijos, JAV ir 8 lektoriai ir stebėjimų instruktoriai iš Lietuvos: R. Janulis, R. Lazauskaitė, E. Pakštienė, J. Sperauskas, V. Straizys, J. Sūdžius, G. Tautvaišienė ir J. Zdanavičius. 2005 m. stebėjimai vyko ne tik su trimis Molėtų observatorijos teleskopais, bet ir 2.56 m Šiaurės optiniu teleskopu ir Teidės observatorijos 80 cm teleskopu, esančiais Kanarų salose. Šių teleskopų stebėjimų laikas buvo paskirtas nemokamai. Kursų klausytojų parengti moksliniai projektai bus išleisti 2006 m. atskiru leidiniu. Pagrindinis šių kursų iniciatorius ir rėmėjas yra Šiaurės šalių mokslinių tyrimų valdyba (*NordForsk*). Kursus taip pat parėmė LR švietimo ir mokslo ministerija ir Lietuvos valstybinis mokslo ir studijų fondas.

Instituto darbuotojai skaitė paskaitas ir vedė pratybas universitetuose: VU – 5 darbuotojai, VPU – 11 darbuotojų, VDU – 1 darbuotojas, LŽŪU – 1 darbuotojas. Mokslininkai vadovavo 19 VU, 2 VDU ir 7 VPU studentų darbams, paruošė 2 metodines mokymo priemones. Molėtų observatorijoje vyko VU ir VPU studentų praktikos bei moksleivių stovyklos. P. Bogdanovičius apie 130 valandų dirbo su Tarptautinės fizikos olimpiados Lietuvos moksleivių komanda. A. Barkevičius paruošė ir Ciklono leidykloje išspausdino mokymo priemonę studentams „Dvinarės ir daugianarės žvaigždės“, o A. Kupliauskienė parengė „Kvantinės sklaidos teorijos“ paskaitų konspektą, kuris paskelbtas interneto svetainėje (<http://www.itpa.lt/~akupl>). A. Bartkevičius gavo profesoriaus, o A. Kynienė docentės vardą Vilniaus pedagoginiame universitete.

## Leidyba

Šiais metais išspaudinta L. Klimkos (VPU) ir R. Kivilšienės (VU TFAI) monografija „Fizikos ir taikomųjų moklų pradžia Lietuvoje“ (VPU leidykla, 192 p.) ir A. Bartkevičiaus mokymo priemonė „Dvinarės ir daugianarės žvaigždės“ (Ciklonas, 200 p.). Taip pat išleisti periodiniai leidiniai „Baltic Astronomy“ 14 tomo 4 numeriai (ats. red. V. Straizys), „Fizikų žinios“ 28 ir 29 numeriai (ats. red. E. Makariūnienė ir red. pav. R. Kivilšienė) ir kasmetinis leidinys „Lietuvos dangus 2006“ (ats. red. G. Tautvaišienė). Instituto darbuotojai A. Bernotas, R. Karazija ir Z. Rudzikas redagavo „Daugiakrūvių jonų fizikos“ konferencijos darbus („The Physics of Highly Charged Ions“, ELSEVIER Press, Amsterdam, Boston, Jena, London, New York, Oxford, Paris, Philadelphia, San Diego and St. Louis, 2005, 554 p). V. Gontis ir Z. Rudzikas buvo XII pasaulio Lietuvių mokslo ir kūrybos simpoziumo „Plenarinių posėdžių pranešimų“, o kartu su V. Vasiliauskiene ir tezių rinkinio atsakingieji redaktoriai. „Lietuvos fizikos žurnalo“ atsakinguoju redaktoriumi buvo Z. Rudzikas, o R. Karazija ir B. Kaulakys – redkolegijos nariais. V. Straizys ir E. Meištas parengė ir išleido žvaigždėlapį-plakatą „Mūsų žvaigždynai“. Išleista nauja MAO vizitinių kortelių ir lankstinukų apie MAO laida (S. Lovčikas). Planetariumo darbuotojai sudarė ir išleido 2005/2006 metų sezono paskaitas moksleiviams aprašančius lankstinukus 30 tematikų.

## Mokslo žiniasklaida

2005 m. mokslo žiniasklaidos veikla didžiaja dalimi buvo skirta Pasauliniams fizikos metams paminėti. Institute parengti „Fizikų žinių“ – „Lithuanian Journal of Physics“ mokslo populiarinimo priedo – 28 ir 29 numeriai. Parengtas ir išleistas tęstinio mokslo populiarinimo leidinio „Lietuvos dangus 2006“ numeris (183 psl.), skirtas 2006 metams. Visuomenei ir moksleiviams mokslas populiarintas radijo ir televizijos laidų metu, laikraščių ir žurnalų publikacijose, paskaitose. Institutas ir Planetariumas buvo partneriai, LR ŠMM ir LMA organizuojant mokslo festivalį „Erdvėlaisis Žemė“, jame skaitytos 4 paskaitos (R. Karazija, V. Gontis, S. Bartašiūtė, D. Sperauskienė). Paruošta per Lietuvą keliaujanti paroda „Einšteinas ir

**Visata**". Kol kas ji buvo eksponuota Vilniaus universiteto centriniuose rūmuose, dviejuose Kauno technologijos universiteto fakultetuose ir Seimo rūmuose. Sudaromas jos eksponavimo grafikas kitose aukštosiose ir vidurinio lavinimo mokyklose.

**Molėtų observatorijoje** priimtos 292 ekskursijos (5034 dalyviai). Ekskursijas vedė S. Lovčikas, E. Stasiukaitis, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius, R. Janulis, V. Straižys ir G. Tautvaišienė. Vasaros metu observatorijos lankytojams buvo organizuojami naktiniai stebėjimai (S. Lovčikas, E. Stasiukaitis). 2005 m. rugsėjo 23 d. observatorijoje įvyko per 300 lankytojų sutraukęs Europos Komisijos inicijuotas atvirų durų renginys "**Europos tyrėjo naktis**". Jo metu buvo pristatyti svarbiausieji Lietuvos astronomų vykdomi moksliniai darbai (paskaitas skaitė G. Tautvaišienė, A. Bartkevičius, A. Kazlauskas, E. Pakštienė) bei visi observatorijoje veikiantys teleskopai (atsakingieji astronomai R. Janulis, J. Sperauskas, J. Zdanavičius ir kt.). Be to, MAO buvo organizuoti renginiai: "Žvaigždėtos naktys" (2005 05 14 ir 2005 09 24), "Lygiadienio muzikos vakarai" (2005 03 20 ir 2005 10 01) ir kt.

2005 metais **VU TFAI planetariume** Vilniuje surengti 830 informaciniai seansai, kuriuose dalyvavo 42800 klausytojų. Organizuotos 22 viešos paskaitos ir proginiai renginiai visuomenei. Sudaryta ir išleista lankstinukai "Paskaitų – seansų tematika 2005/2006 m.m." sezonui. Tematikoje 30 temų moksleiviams pagal abonementus, iš jų - 15 naujų ir 12 temų kitiems lankytojams, iš jų – 6 naujos. Parinkta, sukurta ir pagaminta vaizdinė medžiaga paskaitoms, t.y. 151 nauja viso dangaus panorama, virš 2000 skaidrių, 25 teminiai video ir DVD įrašai (daug prisidėjo A. Bodin). Buvo teikiama metodinė ir vaizdinė parama mokykloms (Viduklės S.Stanevičiaus vid. mokykla, Vilniaus spec. globos namai, Minties gimnazija). Paskelbti 2 mokslo populiarinimo straipsniai spaudoje, virš 10 pasisakymų radijo ir televizijos laidose. Lektorė I. Šablevičiūtė tęsia doktorantūros studijas Fizikos institute. Jų metu toliau vykdomas fotometrinių galaktikų M31 ir M33 žvaigždžių spiečių sistemų tyrimas. 2005 m. planetariumas buvo įregistruotas į IPS (International Planetarium Society) duomenų registrą, iš kurio gaunama vaizdinė ir metodinė medžiaga. Lektorė D. Matulytė yra Tarptautinės ekologinio švietimo akcijos World Wildlife Fund (Pasaulinis Laukinės Gamtos Fondas) ir National Wildlife Federation (Nacionalinė Laukinės Gamtos Federacija) nuolatinė dalyvė.

Atnaujinta VU TFAI interneto svetainė, <http://www.itpa.lt>.

## **Techninė ir ūkinė veikla**

Institutas įsigijo naują kompiuterių spiečių, skirtą darbuotojų mokymams ir darbui lygiagrečiųjų skaičiavimų metodais kompiuterinių tinklų (*grid*) aplinkoje. Renovuoti centrinio pastato koridoriai. Įsigytas automobilis. Parengtas investicinis projektas pastato stogo ir sienų kapitalinei renovacijai.

Molėtų observatorijoje užbaigtas gaminti ir pradėtas eksploatuoti 165 cm teleskopo židinio reduktorius, padidinęs teleskopo matymo lauką tris kartus (ats. G. Tautvaišienė ir K. Zdanavičius). Radio internetas pakeistas patikimesniu laidiniu. Parengtas detalusis observatorijos apsauginės zonos planas. Rengiantis priimti aukštųjų astrofizikos kursų dalyvius, buvo atlikti įvairūs teleskopų, jų bokštų, centrinio pastato ir stebėtojų namelių renovavimo darbai, visose patalpose įrengtas internetas, sutvarkytas baseinas, įsigyta baldų bei renovuota dalis turimų. Observatorijai perduotas automobilis *Volvo*.

Suremontuotas Planetariumo stogas.

## **Instituto finansavimas**

Instituto 2005 metų finansinės ataskaitos, 2005 metų sąmatos ir valstybinį finansavimą grindžiantys strateginiai veiklos planai pagal galiojančius teisės aktus teikiami LR Finansų ministerijai ir kitoms institucijoms atskirai nuo šios ataskaitos arba kaip priedai, todėl trumpai

paminėsime, kad 2005 metais VU TFAI gavo 3463,8 t. litų asignavimų, iš kurių 2362,0 t. Lt sudarė tiesioginiai biudžeto asignavimai, 111,4 t. Lt – tikslinės biudžeto lėšos, 80,8 t. Lt – LVMS fondo lėšos, 304,0 t. Lt – užsienio lėšos mokslo programoms vykdyti. Specialiosios mokslo plėtojimo programos lėšos sudarė 605,6 t. Lt.

### **Instituto strateginiai tikslai 2006 metams**

1. Integracija į bendrąją Europos mokslinių tyrimų erdvę, plėtojant instituto dalyvavimą tarptautiniuose projektuose.
2. Aukščiausios kvalifikacijos specialistų ir ekspertų rengimo ir visuomenės švietimo plėtra.
3. Aukščiausios kokybės mokslinės produkcijos rengimo efektyvumo didinimas – vidutiniškai po vieną publikaciją kiekvienas mokslininkas per metus.
4. Instituto vykdomų fundamentinių tyrimų taikymo Lietuvos reikmėms sričių paieškos intensyvinimas.

**Ataskaitai pritarta 2006 m. vasario 10 d.  
VU TFAI tarybos posėdyje, nutarimas Nr. 1**