

## VU TFAI ATOMO TEORIJS SKYRIAUS 2007 METŲ MOKSLINIO IR ORGANIZACINIO DARBO ATASKAITA

### 0. Įvadas

Šiomet įžengėme į naują ES struktūrinių fondų ir VII BP dokumento programų laikotarpį (2007-2013), pradėjo realų darbą Europos Mokslo Taryba, vadovaujanti Idėjų bloko (visų sričių fundamentiniai tyrimai) įgyvendinimui. Per septynerių metų laikotarpį pastaroji kasmet išdalins vidutiniškai po milijardą eurų.

Kita šio laikotarpio ypatybė – jau tikrai įsijungėme į ITER tarptautinę šeimą, gavome pirmąjį finansavimą (metų pabaigoje). Ir, žinoma, sėkmingai tęsėme žemiau išvardintų tarptautinių projektų vykdymą. Ypač pažymėsime besiplečiantį grid technologijų ir nacionalinio superkompiuterio įsisavinimą ir naudojimą.

Kartu reikia pažymėti, kad normalų kūrybinį mokslininkų darbą gerokai trikdo kai kurių politikų ir visuomenės veikėjų priekaištai dėl atseit nevykstančios mokslo ir studijų reformos bei drastiški siūlymai ją atseit spartinti. Užtenka paminėti, kad naujoje Mokslo ir studijų įstatymo versijoje įrašyta, kad universitetų mokslo institutai kaip juridiniai asmenys nustoja egzistuoti 2009 m. pabaigoje, mokslo institutų tarybų 2/3 narių sudarys „socialiniai partneriai“, o direktoriumi gali būti turintis vadybinės patirties asmuo be mokslo laipsnio.

Tačiau debesys atslenka ir nuslenka, žaibas ir griaustinis irgi ne visuomet sukelia gaisrą, tad yra didelė tikimybė, kad laimingai pergyvensime ir šį laikotarpį. Žinoma, reikia dirbti gerai, kokybiškai, įrodyti savo reikalingumą pasauliui ir Lietuvai.

### 1. Dalyvavimas finansuojamuose tarptautiniuose projektuose

Dauguma skyriaus darbuotojų jau pajuto dalyvavimo papildomuose finansuojamuose projektuose (tiek tarptautiniuose, tiek ir Lietuvos) skonį. Tai ir besiplečiančios skaičiavimų galimybės, ir galingesni personaliniai kompiuteriai, ir, žinoma, papildomos asmeninės pajamos. Skyriaus darbuotojai dalyvauja devynerių įvairaus rango finansuojamų tarptautinių projektų vykdyme. Po projekto pavadinimo ir trumpų jo duomenų pateiksime pagrindinius gautuosius mokslo rezultatus, suformuluotus projektų vadovų bei kai kurių vykdytojų (paimti iš asmeninių ataskaitų).

1.1. EK asociacijos kontraktas tarp EURATOM ir LEI (Nr. FU06-2006-0043) ir sutartis tarp LEI ir VU TFAI, ats. vykd. A.Kupliauskienė, dalyvauja 12 skyriaus darbuotojų, 2007 m. 17000 eurų.

Atlikti volframo jonų emisijos spektrų kvazitolydinės juostos srityje skaičiavimai konfigūracijų sumaišymo metodu reliatyvistiniame artutinyje naudojantis didele konfigūracijų baze. Parodyta, kad intensyvių linijų grupę pagrindinai apsprendžia tik konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu maišymasis. Interpretuota satelitinė linijų grupė ir numatytas kitos, eksperimentiškai dar nestebėtos linijų grupės, egzistavimas.

Naudojantis gautomis emisijos spektrų bendrųjų charakteristikų išraiškomis reliatyvistiniame artutinyje bei sudaryta jų skaičiavimo programa, atlikti volframo jonų spektrų, atitinkančių  $4f \rightarrow 4d$  šuolius, gaubiamųjų skaičiavimai ir, lyginant su detalių skaičiavimų rezultatais, įvertinta galimybė tuo metodu apytikriai aprašyti sudėtingus spektrus.

Pagal sudarytą planą buvo paruošta ir iširta reliatyvistinių banginių funkcijų bazė  $W^{45+}$  jonams, suskaičiuoti energijos lygmenys. Pradėti sužadinimo iš pagrindinės būsenos skaičiavimai, naudojant reliatyvistinę R-matricos programos variantą DARC.

1.2. "Taivaniai ir Baltijos atomų spektroskopijos ir jų elgesio stipriuose lazerio laukuose teoriniai tyrimai" (Taiwan-Baltic theoretical studies of spectroscopy of atoms and their behavior in strong laser fields"), vad. Z.Rudzikas, A.Kupliauskienė, vykd. P.Bogdanovičius, V.Tutlys, G.Merkelis, O.Rancova, R.Juršėnas, V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija, 2007 08 01-2008 07 31; 12500 USD iš Taivaniai ir 21000 LTL iš Lietuvos Švietimo ir mokslo ministerijos.

2007 m. kartu su Taivaniai mokslininkais pradėti nagrinėti dviejų stadijų procesai, kai fluorescencijos fotonai ar Auger elektronai išspinduliuojami po poliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuotais elektronais. Surastos patį bendriausią visų dalelių poliarizacijos atvejį aprašančios išraiškos. Jos panaudotos išvesti paprastesnėms formulėms, tinkamoms surasti parametrus, matuojamus įvairiuose eksperimentuose. Taip pat atlikti berilio izoelektroninės sekos jonų spektrinių charakteristikų skaičiavimai trikdžių teorijos ir plataus masto konfigūracijų superpozicijos metodais. Abiem metodais surastų rezultatų palyginimas leido padaryti išvadas apie abiejų metodų taikymo ribas bei pateikti rekomendacijas, kada vieną ar kitą metodą reikėtų naudoti. Mūsų mokslininkų kartu su Taivaniai mokslininkais prof. Keh-Ning Huang ir prof. Hsiang-Shun Chou atliktų mokslinių tyrimų rezultatai pranešti 37-oje Lietuvos nacionalinėje fizikos konferencijoje bei paruoštuose ir įteiktuose spaudai straipsniuose. Konferencijoje pristatyti 3 pranešimai ir paruošti 3 straipsniai, kurie įteikti Lietuvos fizikos žurnalui. Darbuotojai parašė dar 4 straipsnius pagal projekto tematiką be Taivaniai bendraautorių.

2007 m. rugpjūčio 30 – rugsėjo 2 d. institute viešėjo projekto koordinatorius prof. Keh-Ning Huang. Viešnagės metu buvo aptarti gautieji rezultatai, ruošiami spaudai straipsniai ir tolimesni darbai. Susitarta, kad 2008 m. sausio mėn. antroje pusėje bendram darbui į Taivaniai nuvyks TFAI Atomo teorijos skyriaus vyr.m.d. dr. Gintaras Merkelis ir doktorantas Rytis Juršėnas. Ši rudenį G.Merkelis paruošė paskaitų kursą iš trikdžių teorijos dydžių kampinių dalių suradimo metodų, kurių numato perskaityti studentams 2008 metų vizito metu. TFAI Atomo teorijos skyriaus vyr.m.d. dr. Vladas Tutlys parašė kompiuterinę programą Auger elektronų tikimybėms ir submatriciniams elementams apskaičiuoti. Ji bus naudojama tolimesniuose bendruose darbuose. Vyriaus. m.d. habil. dr. P.Bogdanovičius ir doktorantė O.Rancova lankėsi pas partnerius Rygoje 2007 m. rugsėjo mėn.

1.3. FP6 projektas 017170 Baltijos šalių tinklas "Moterys tiksluosiuose moksluose ir aukštosiose technologijose" (Baltic States Network „Women in Sciences and High Technology", BASNET), vadovė A.Kupliauskienė, vykdytoja O.Rancova, 2006-2007 m., 25200 EUR (2007 m. 20041 EUR).

2007 m. buvo plėtojama BASNET duomenų bazė ir interneto svetainės skiltis apie Lietuvos klasterio veiklą. Buvo sukviesta 11 Lietuvos klasterio posėdžių, kuriuose aptarti visi su projekto vykdymu susiję darbai. Posėdžiuose svarstyti partnerių VU, KTU, TFAI ir LRŠMM 2007 m. darbo planai, sociologinių tyrimų galutinė ataskaita, mokslininkų karjeros galimybių pagerinimo strategijos kūrimo eiga ir strategijos projektai, BASNET Naujienų laikraščio turiniai ir leidimas, pasiruošimas seminarui, kuriame aptarti Lietuvos, Latvijos ir Estijos šalių strategijų projektai, Rygoje ir baigiamajai BASNET projekto konferencijai Vilniuje, antrųjų projekto vykdymo metų ir baigiamosios ataskaitos, BASNET projekte pradėtų darbų ateitis. 2007 m. spalio 22-23 d. Vilniuje vyko BASNET baigiamoji konferencija, kurią organizavo A.Kupliauskienė, O.Rancova, joms padėjo R.Kivilšienė ir R.Karpuškienė. Konferencijos atidaryme kalbėjo direktorė G.Tautvaišienė, kaip dalyvė buvo J.Tamulienė.

Projekto tikslai pilnai įvykdyti – sukurta Baltijos šalių moterų mokslininkų duomenų bazė ir monitoringo sistema, sukurta strategija moterų padėčiai moksle pagerinti.

1.4. Baltic Grid. Šio projekto vykdyme dalyvavo P.Bogdanovičius, Z.Rudzikas, J.Tamulienė, V.Jonauskas, S.Kučas ir O.Rancova. Rezultatai pateikti bendroje TFAI ataskaitoje.

1.5. Švedijos Karališkosios MA grantas Lundo universiteto ir VU TFAI bendradarbiavimui paremti „Sudėtingų jonų spektroskopija ir jos taikymai astrofizikoje ir termobrunduolinės plazmos fizikoje“ (55000 šved. kronų, 2007 01 02-2008 12 30).

Gautos reikalingos skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos ir elektrinio dipolinio momento operatorių tezinės formos. Jų pagrindu parašyta programa, kuri leidžia rasti skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos operatoriaus matricinio elemento ir elektrinio dipolinio momento operatoriaus matricinio elemento vertes.

Atlikti su VPU Bendrosios fizikos katedros spiečiumi hipersmulkiosios struktūros konstantų (dviem žemiausiems lygmenims) ir skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos konstantos skaičiavimai Cezio atomui.

Gauti rezultatai buvo paskelbti konferencijoje: The 9th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas, Lund, Sweden (G. Gaigalas, E. Gaidamauskas, P. Jonsson, Multiconfiguration Dirac-Harree-Fock calculations for the hyperfine-structure parameters and the scalar-pseudoscalar interaction constant of 133 Cs, The 9<sup>th</sup> International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths (ASOS), Lund (Sweden), 7-10 August, 2007, p. 37-38.)

1.6. FP6 projektas „Programmable Artificial Cell Evolution (PACE)“ <http://www.istpace.org/index.html>. Atsakingas asmuo: Arvydas Tamulis, vykdytojai: Vykintas Tamulis, Šarūnas Kriščiukaitis. Vykdytojų trukmė: 2004.04.01-2008.06.30. Finansavimas už visą laikotarpį: 169389 eurai, Finansavimas už 2007 ir 2008 m. yra 47735 eurai ir dar papildomai yra galimybė gauti 24740 eurų už ankstesniais metais sulaikytą finansavimą.

Svarbiausi 2007 metų rezultatai:

Kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų koreliacijų metodais, skaičiuojant mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu GRIDu, buvo gautas dirbtinių minimalių gyvų ląstelių savi-susidarymas iš nebrangių bioorganinių molekulių ir suskaičiuoti tų ląstelių fotosintezės spektrai. Kvantmechaniniais metodais iširta, koku būdu dirbtinės minimalios gyvos ląstelės maitinasi, auga ir dauginasi.

1.7. COST D27. Veiklos pavadinimas (anglų k.): „Prebiotic chemistry and early evolution“, Arvydas Tamulis buvo valdymo komiteto narys, Lietuvos ekspertas ir vykdytojas. Vykdytojų trukmė: 2002-2007.05.

Svarbiausi 2007 metų rezultatai:

Naudojantis šiame projekte naujai atrastomis magnetiškai aktyviomis molekulėmis, buvo sumodeliuotos minimalios dirbtinės gyvos ląstelės, absorbuojančios išorinio magnetinio lauko energiją fotosintezės proceso metu. Buvo parašyta sukinio tankio pernašos vizualizacijos programa, kuri sprendė atvirų sluoksnių kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomų elektronų koreliacijų lygtis mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu GRIDu.

1.8. COST D35. Veiklos pavadinimas (lietuvių k.): “Nuo molekulių iki molekulinų prietaisų: elektroninių, fotoninių, magnetinių ir spintroninių vyksmų kontroliavimas“ (anglų k.): “From Molecules to Molecular Devices: Control of Electronic, Photonic, Magnetic and Spintronic Behaviour”, Arvydas Tamulis yra valdymo komiteto narys, Lietuvos ekspertas ir vykdytojas. Vykdytojų trukmė: 2005-07-11 - 2010-10-01.

Svarbiausi 2007 metų rezultatai:

Kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų koreliacijų metodais skaičiuojant mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu GRIDu, buvo sumodeliuoti keli nano biorobotai, naudojantis šiame projekte naujai atrastais molekuliniais loginiais vartais.

1.9. JAV Los Alamos Nacionalinės Laboratorijos (LANL) "Procell Assembly" projektas. Arvydas Tamulis buvo vykdytojas. Vykdyto trukmė: 2004-2007.09.

Svarbiausi 2007 metų rezultatai:

Naudojantis šiame projekte naujai atrastomis nekanoninėmis nukleininėmis rūgščių molekulėmis, buvo sumodeliuotos peptidine nukleinine rūgštimi (PNR) kontroliuojamos minimalios dirbtinės gyvos ląstelės. Buvo parašyta elektrono tankio pernašos vizualizacijos programa, kuri sprendė supermolekulių sužadintų būsenų kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomų elektronų koreliacijų lygtis mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu GRIDu.

A.Tamulis pradėjo vykdyti NASA Astrobiology Institute NASA's Exobiology Program, Kalifornijos universiteto-Santa Cruz ir VU TFAI bendrą projektą: „Effect of Weak Nuclear Interactions (Parity Violation Energy Difference - PVED) on the Electronic Structure of a D- and L-Amino Acids and Further Investigations How Much this Affects the Hydration Shell of Water Around Each Molecule“. Superkompiuterio naudojimo laiką finansuoja Prof. David Deamer, Department of Biomolecular Engineering, University of California, Santa Cruz, California, USA. PVED efektas natūralios ir dirbtinės gyvybės amino rūgštyse tiriamas, sprendžiant Dirac-Hartree-Fock keturių komponentų reliatyvistinės kvantinės mechanikos lygtis. Mūsų mokslinei grupei suteiktas superkompiuteris: TeraGrid Itanium2 Linux Cluster, San Diego Supercomputer Center.

## **2. Dalyvavimas Lietuvos fondų ir NVO finansuojamuose projektuose**

Dalis skyriaus darbuotojų dalyvavo įgyvendinant tris struktūrinių fondų projektus:

2.1. BPD 2 prioriteto „Žmogiškųjų išteklių plėtra“ 2.5 priemonės „Žmogiškųjų išteklių kokybės gerinimas mokslinių tyrimų ir inovacijų srityje“ projektas „Lietuvos mokslininkų gebėjimų ugdymas Lietuvai integruojantis į ES infrastruktūrą“ (SFMIS Nr. BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0038, koordinuojamas Lietuvos mokslų akademijos). Didelė ATS darbuotojų dalis buvo rengiamų paskaitų ciklą klausytojai.

2.2. Analogiškos kilmės projektas „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė“.

Parengta medžiaga portalui „Mokslas plus“ apie Nobelio fizikos premijas: A.Nobelio veikla, premijos įsteigimas, jos teikimas, laureatai, jų ir premijų pasiskirstymas įvairiais požiūriais, šių metų premija. Parengta ir perskaityta VU TFAI planetariume paskaita: „Nobelio fizikos premijos – nuo Rentgeno iki šių metų laureatų“. Remiantis vadovėliu R.Karazija. „Fizikos metodologija ir filosofija“, parengta medžiaga šia tematika minėtam portalui. Parengti kelių fizikos dėsnius iliustruojančių žaismų aprašymai portalui.

Bogdanovičius. Dalyvavo kuriant projekto „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė.“ svetainės turinį, sudarydamas moksleivių fizikos žinyno puslapius.

Kuriant projekto „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė.“ svetainės turinį, sudaryti moksleivių fizikos žinyno puslapiai. Sistemingai atnaujinamas mokslo naujienų skyrius.

2.3. Trečias tokio pobūdžio projektas.

Lietuvos mokslo tarybos ir Lietuvos švietimo ir mokslo ministerijos projektas „Studentų mokslinė praktika“, kuris yra remiamas ES struktūrinių fondo lėšų. Pagrindiniai rezultatai: projekto metu gauti moksliniai rezultatai paskelbti vieneriose tezėse ASOS 9 konferencijoje (Švedijoje) ir pateiktas spausdinimui mokslinis straipsnis. Atsakingas asmuo G. Gaigalas. Vykdytojai: G. Gaigalas, E. Gaidamauskas. Vykdyto terminas – du mėnesiai.

Kiti du projektai skirti kompiuterių tinklams ir paskirstytiems skaičiavimams.

2.4. LitGrid projektas, finansuojamas ŠMM. Lygiagrečiųjų ir paskirstytų skaičiavimų ir e-paslaugų tinklo programa, vadovė J.Tamulienė. Projekto ATS vykdytojai: P. Bogdanovičius, R.Karpuškienė, J.Tamulienė. Vykdyto trukmė: 2007, Finansavimas: 46000,-Lt.

Atlikti darbai. Turimi klasteriai įjungti į LitGrid tinklą, įvertintas jų tinkamumas, rengiama dokumentacija administratoriui ir naudotojui, klasteriuose įdiegtos reikalingos ir tinkamos virtualios organizacijos, taikomųjų uždavinių programos. Papildytos paruoštos rekomendacijos vadovams ir administratoriams. Litgrid projekto veikla pristatyta TPA informacinėje dienoje. Atlikta tinkamų virtualių organizacijų, esančių kituose grid'uose analizė.

2.5. GridTechno, finansuojamas LVMSF. Taikomųjų uždavinių tyrimai ir realizavimas naudojant grid technologijas. ATS vykdytojai: J.Tamulienė, V.Jonauskas, S.Kučas.

Sudaryti algoritmai ir programinė įranga, veikianti grid aplinkoje ir skirta optimalioms kobalto junginių reliatyvistinėms banginėms funkcijoms generuoti atsižvelgiant į labiausiai besimaišančias konfigūracijas. Programinė įranga jau yra sukurta, baigiami diegimo darbai.

Sumodeliuotos skirtingos simetrijos įvairių struktūrų  $Co_{16}$ ,  $Co_{18}$ ,  $Co_{30}$  ir  $Co_{36}$  nanodalelės. Šiuo metu atliekamas šių nanodalelių tyrimas GAMESS programų paketu. Atlikti  $Co_2O_n$  darinių magnetinių savybių tyrimai.

2.6. Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūra finasavo projektą: "Programuojamų dirbtinų gyvų ląstelių ir jų pagrindu sukurtų nano biorobotų, susidedančių iš maždaug 500 atomų, kvantmechanis modeliavimas", atsakingas asmuo Arvydas Tamulis ir vykdytojas Vyktintas Tamulis, vykdymo trukmė: 2007 metai, finansavimas už 2007 m. buvo 15000 litų.

Svarbiausi 2007 metų rezultatai:

Kvantiniai mechaniniai tyrimo rezultatai parodė realią galimybę iš nebrangių bioorganinių molekulių gauti nano biorobotus ir kontroliuoti jų maitinimąsi, augimą bei dauginimąsi. Taigi, panaudojus nedideles investicijas, galima pradėti Lietuvoje gaminti mūsų projekte sumodeliuotus nano biorobotus. Turint galvoje didelį Lietuvos užterštumą ir žmonių sergamumą įvairiomis molekulinėmis ligomis, šiame projekte sumodeliuoti nano biorobotai gali naikinti įvairias ekologiškai žalingas molekules ir kenksmingas žmogaus organizmui molekules. Šiame darbe naujai sumodeliuotus nanometrinių dydžio logiškai valdomus **fotoelementus galima būtų naudoti ne tik dirbtinių programuojamų gyvių sintezei, bet ir plačiai panaudoti kaip fotoelektronų šaltinius skaitmeninėje fotografijoje, kuriant naujo tipo kompaktines skaitmenines kameras, nanoprietaisuose ir molekuliniuose kompiuteriuose. Nano biorobotų modeliavimas buvo atliktas naudojantis kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų koreliacijų metodais ir skaičiuojant su AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu GRIDu.**

Taigi, dalyvaujame vykdant šešis projektus, finansuojamus keturių skirtingų institucijų. Padidėjo skyriaus darbuotojų, neapsiribojančių vien biudžetinių temų vykdymu.

### **3. Dalyvavimas nefinansuojamuose Lietuvos ir tarptautiniuose projektuose**

Pradėtas vykdyti ir baigiamas įforminti nuo 2008 m. tarptautinis projektas TFAI-JRC ITU (Transuraninių elementų institutas) „Kiurio ir americio junginių teorinis tyrimas“ (koordinatorių Z.R.Rudzikas, atsakingas vykdytojas G.Gaigalas).

Apskritai, išsiplėtus galimybėms dalyvauti vykdant finansuojamus projektus, baigia išnykti darbai už ačiū. Tačiau pažvelgę į publikacijų ir pranešimų ar jų tezių sąrašus matome, kad didelė jų dalis parengta su kitais Lietuvos ar užsienio kolegomis ir nebūtinai pastarieji dalyvauja vykdant bendrus finansuojamus projektus.

### **4. VU TFAI patvirtintos temos**

4.1. Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams. Teorija ir interpretavimas. Vad. R.Karazija, vykdytojai: V.Jonauskas, S.Kučas, A.Kynienė ir

A.Momkauskaitė. 2005-2010 m. Priskiriamos keturios publikacijos (dvi dalinai ir EURATOM – LEI kontraktui).

Šių metų pagrindiniai rezultatai:

Gautos emisijos spektrų bendrųjų charakteristikų - vidutinės energijos, dispersijos ir asimetrijos koeficiento - išraiškos reliatyvistiniame Dirako ir Breito artutinyje, atsižvelgiant į konfigūracijų sumaišymą. Jos įgalina tiksliau aprašyti sudėtingus daugiakrūvių jonų plazmos spektrus, nes iki šiol buvo naudojamos tik apytikrės tų dydžių kvazireliatyvistinės išraiškos. Metodas realizuotas bendroje programoje ir panaudotas volframo jonų spektrams modeliuoti.

Tęsiant ankstesnį darbą teoriškai nagrinėtas intensyvių ir siaurų linijų grupių susidarymas dėl stipraus konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu sumaišymo daugiakrūvių jonų fotoabsorbcijos ir emisijos spektruose, atitinkančiuose šuolius  $4p^5 4d^{N+1} + 4p^6 4d^{N-1} 4f \rightarrow 4p^5 4d^{N+1}$ . Skaičiavimai reliatyvistiniu artutinyje atlikti  $Sn^{9+}$ –  $Sn^{12+}$  ir  $Sb^{10+}$ –  $Sb^{11+}$  jonams, kurie yra pagrindiniai kandidatai, kuriant ultravioletinių spindulių šaltinį litografijai. Parodyta, kad ypač stiprus spektro susiaurėjimas pasireiškia alavo ir stibio jonams su pusiau užpildytu 4d elektronų sluoksniu.

Išnagrinėta Sb, Sn ir W jonų intensyvumo koncentracija, esant stipriam konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu maišymuisi. Praplėtus sąveikaujančių konfigūracijų bazę, gautas labai geras sutapimas su eksperimentu  $W^{30+}$  bangos ilgiams, atitinkančius šuolius  $4p^5 4d^9 + 4p^6 4d^7 4f - 4p^6 4d^8$ .

Tirtas Ožė elektronų spektras kriptone, susidarius vakansijai vidiniuose 3s, 3p ir 3d sluoksniuose ir jų pasluoksniuose. Paaiškintas fotojonų išėigos spektras, atlikus skaičiavimus su didele sąveikaujančių konfigūracijų baze reliatyvistiniame artutinyje. Išnagrinėti daugiaelektroniai Ožė šuoliai, atsirandantys dėl konfigūracijų stipraus maišymosi.

Ištirtas  $L_{2,3}$  emisijos spektro kitimas prie 2p slenksčio geležies grupės elementuose, sužadinant atomus į atskirus lygmenis, praplėtus sąveikaujančių konfigūracijų bazę. Nustatyta, kad eksperimentatorių identifikuotos kvadrupolinės linijos iš tikrųjų atitinka dipolinius šuolius.

Tirti Rentgeno emisijos spektrai, atitinkantys silpnus  $3p \rightarrow 2p$  elektrinius kvadrupolinius šuolius. Jų intensyvumų santykis atžvilgiu elektrinių dipolinių  $3s \rightarrow 2p$  šuolių gavosi visa eile didesnis nei teorinis intensyvumų santykis, apskaičiuotas vienkonfigūraciniame Hartree ir Foko artutinyje, naudojantis laisvojo atomo modeliu. Nagrinėjant, ar ši anomaliją lemia kietojo kūno efektai, spektrai buvo registruoti, esant įvairiam apsupimui, bet intensyvumų santykis beveik nesikeitė. Atlikti tyrimai įgalina paneigti hipotezę, kad skirtumas tarp eksperimente stebimų ir teoriškai gautų geležies grupės elementų elektrinių dipolinių ir elektrinių kvadrupolinių šuolių intensyvumų santykių yra nulemtas koreliacinių ar reliatyvistinių efektų, aprašomų laisvojo atomo modeliu. Kvadrupolinių šuolių srityje atsiranda ir dipoliniai šuoliai, kurie stebint spektrus yra įskaičiuojami į kvadrupolinius šuolius.

Ištirtas  $L_{2,3}$  emisijos spektro kitimas prie 2p slenksčio geležies grupės elementuose, sužadinant atomus į atskirus lygmenis, praplėtus sąveikaujančių konfigūracijų bazę. Nustatyta, kad eksperimentatorių identifikuotos kvadrupolinės linijos iš tikrųjų atitinka dipolinius šuolius.

4.2. VU TFAI tarybos patvirtinta tema “Daugiaelektronų atomų spektrinių charakteristikų tyrimo metodų plėtra ir jų taikymas daugiakrūviams plazmos jonams” (2007 saus.-2011 bal.). Vadovas P.Bogdanovičius. Vykdytojai R.Karpuškienė ir dokt. O.Rancova.

Vykdyt tolimesnę kvazireliatyvistinio artinio plėtrą, į kvazireliatyvistinę lygtį radialiosioms orbitalėms gauti buvo įtraukti nariai, aprašantys kontaktinę sąveiką  $p$ -elektronų atveju. Šiems elektronams kontaktinėje sąveikoje atsirado narys, pagal savo fizikinę prigimtį kylantis iš elektronų sukinio-orbitos sąveikos. Tai visiškai nauji ir originalūs rezultatai. Be to buvo parodyta, kad skaičiuojant sukinio-orbitos sąveikos viendalelę sąveikos dalį reikia atsižvelgti į papildomą vardiklį su tiesioginiu potencialu, atsirandantį kvazireliatyvistiniame artutinyje. Didelis darbas buvo atliktas kuriant naujas programas, leidžiančias atlikti atomų ir jonų spektrinių

charakteristikų tyrimus konfigūracijų superpozicijos metodu kvazirelatyvistiniame artinyje. Tai leido atlikti ne tik energijos spektrų, bet ir pirmus šuolių charakteristikų skaičiavimus.

Atliekant konkrečių jonų spektrinių charakteristikų teorinį tyrimą minėtos temos rėmuose buvo atlikti tokie darbai:

1. Osciliatorių stiprių ir šuolių tikimybių skaičiavimas Cr XVII jonui. Gauti duomenys šuoliams tarp konfigūracijų, turinčių 3l-elektronus, anksčiau neištirtų nei teoriškai, nei eksperimentiškai.
2. Energijos spektrų skaičiavimas volframo  $W^{29+}$  -  $W^{34+}$  jonams. Šiame darbe pirmą kartą buvo gauta teorinė informacija apie sužadintas konfigūracijas, kurių lygiškumas sutampa su pagrindinės konfigūracijos lygiškumu, ir parodyta, kad tos konfigūracijų grupės energijos lygmenys labai susimaišo. Šis susimaišymas yra toks stiprus, kad yra nemažai lygmenų, kurie, identifikuojant pagal tikrinės funkcijos didžiausią svorį, pereina iš vienos konfigūracijos į kitą. Tokiu būdu, lygmenų skaičius, priskiriamas vienai konkrečiai konfigūracijai, žymiai keičiasi, palyginus su vienkonfigūraciniu artiniu.
3. Ilgos berilio izoelektroninės sekos ( $4 < Z < 29$ ) 2-2 leistinių elektrinių dipolinių šuolių fizikinių charakteristikų skaičiavimo rezultatai, gauti konfigūracijų superpozicijos metodu, buvo palyginti su duomenimis, gaunamais trikdžių teorijos metodais. Gautas geras abiejų teorinių rezultatų sutapimas. Parodyta, kad kai kurios osciliatorių stiprių vertės, pateiktos NIST (JAV) spektrinių duomenų bazėje, yra nepakankamai tikslios ir turi būti koreguotos.
4. Parodyta, kad *LS*-ryšio tinkamumo įvertinimo metodas, naudotas vienkonfigūraciniame artinyje, netinka konfigūracijų superpozicijos atveju. Pasiūlyti kiti įvertinimo būdai, neiškraipantys fizikinio vaizdo.

4.3. "Elektronais sužadintų ir jonizuotų poliarizuotų atomų fluorescencijos ir elektronų tyrimas", vad. A.Kupliauskienė, vykd. V.Tutlys ir K.Glemža (VU FF), 2007-2010 m. (2007 m. 3 straipsniai).

Naudojantis atomų teorijoje išplėtotais metodais, išvesta poliarizuotų atomų sužadinimo poliarizuotais elektronais skerspjūvio bendroji išraiška, aprašanti sužadintų atomų poliarizaciją bei išsklaidytų elektronų poliarizaciją ir kampinį pasiskirstymą. Paprastesnės formulės, aprašančios nepoliarizuotais atomais išsklaidytų nepoliarizuotų elektronų kampinį pasiskirstymą, sužadintų atomų rikiavimą, o taip pat atomų sužadinimo elektronais magnetinį dichroizmą, išvestos kaip atskiri bendrosios formulės atvejai. Sutrikdytų bangų artinyje apskaičiuoti Na ir K atomų sužadinimo į  $2p^53s^2\ ^2P_{3/2}$  ir  $3p^54s^2\ ^2P_{3/2}$  būsenas skerspjūviai ir rikiavimo parametrai. Teoriniai rikiavimo parametrai K atomo atveju gerai dera su išmatuotais.

Tirti Užgorodo mokslininkų užregistruotame Na atomo sužadinimo į  $2p^53s^2\ ^2P_{1/2,3/2}$  būsenas skerspjūvyje ties 32–33 ir 36,5–40 eV žadinančio elektrono energijomis pastebėti maksimumai, kurių negalima paaiškinti  $2p^53s3p$  LSJ rezonansų susidarymu. Norint išsiaiškinti jų priežastį, atlikti labai tikslūs  $2p^53s^2\ ^2P_{1/2,3/2}$  ir  $2p^53s3p$  LSJ būsenų energijos spektrų ir radiacinių šuolių tarp jų tikimybių skaičiavimai. Sužadinimo į  $2p^53s^2\ ^2P_{1/2,3/2}$  dėl kaskadų iš  $2p^53s3p$  LSJ įvertinti taip pat apskaičiuotos  $2p^53s^2\ ^2P_{1/2,3/2}$  ir  $2p^53s3p$  LSJ būsenų autojonizacijos tikimybės, fluorescencijos našumai ir sužadinimo skerspjūviai. Padaryta išvada, kad kaskadų priedas per mažas maksimumams eksperimentiniame spektre paaiškinti.

Tirti Užgorodo mokslininkų pirmą kartą pastebėti didelio intensyvumo rezonansai stroncio atomo sužadinimo į  $4p^54d^5s^2\ ^3P_{0,1,2}$  ir  $^3F_{2,3,4}$  autojonizacines būsenas skerspjūvyje. Jiems paaiškinti atlikti tikimybių ir sužadinimo skerspjūvių skaičiavimai bei įvertintas kaskadų iš aukštesnių atomo ir neigiamo jono autojonizacinių būsenų indėlis.

Baigtos derinti dvi programos Auger suirimo matriciniams elementams ir tikimybės skaičiuoti.

4.4. Šiuolaikinis atomo teorijos uždavinių modeliavimas remiantis įprastu ir simboliu programavimu (vad. G.Gaigalas). Pagrindinis darbas – kuriama programinė įranga.

Pastebėsime, kad plečiantis darbuotojų dalyvavimui finansuojamuose tarptautiniuose ir Lietuvos projektuose, kurių dalis reikalauja biudžetinio kofinansavimo, mažėja reikalingumas turėti iniciatyvines temas, juo labiau, kad jau dabar sugebame „parduoti“ grynai fundamentinių tyrimų rezultatus.

### **5. Kiti svarbūs moksliniai rezultatai**

Iš aukščiau pateiktos medžiagos matome, kad skyriaus darbuotojai dalyvauja vykdamas didelę pluoštą įvairaus rango projektų, todėl nelabai lieka laiko dar kitiems darbams. Ar ne todėl tik du skyriaus darbuotojai priskyrė dalį rezultatų šiam skirsniui.

A.Tamulis: parašytos supermolekulių ir supramolekulių sužadintų būsenų elektrono ir sukinio tankio pernašos skaičiavimo ir vizualizacijos programos, suderintos su naujomis kvantmechaninių skaičiavimų programų: GAMESS-US, ORCA, TURBOMOLE versijomis AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniame GRIDE.

R.Kisielius: pabaigti skaičiuoti ir analizuoti FEXVII jonų sužadinimo elektronais reliatyvistiniame artėjime skerspjūviai ir efektyvieji spartos koeficientai. Duomenų lentelės paruoštos publikavimui. Atiduotas publikuoti straipsnis (Astronomy&Astrophysics) apie draustinių linijų OII jonuose sužadinimą elektronais.

Lietuvos valstybiniam mokslo ir studijų fondui parengtas projektas „Ultravioletinei litografijai svarbių alavo ir indžio jonų eksperimentinių spektrų interpretacija reliatyvistiniu Dirako-Foko metodu“. Atsakingas asmuo G. Gaigalas. Vykdomo terminas – vieneri metai. Vykdytojai: G. Gaigalas, V. Jonauskas, R. Kisielius, S. Kučas, E. Gaidamauskas. Numatytas projektas “Ksenono jono spektrų, stebėtų EBIT eksperimente, tyrimas reliatyvistiniame daugiakonfigūraciniame artėjime“. Projektas yra pateiktas Lietuvos valstybiniam mokslo ir studijų fondui. Atsakingas asmuo V. Jonauskas. Vykdomo terminas – vieneri metai.

### **6. Organizuoti moksliniai renginiai**

Šią grafą ataskaitoje užpildė tik A.Kupliauskienė, nurodžiusi, kad ji organizavo šioje ataskaitoje nurodyto 2.1 projekto dviejų temų paskaitų ciklus, būtent „Tarptautinis termobranduolinis eksperimentinis reaktorius ITER – energetikos perspektyva“ bei „Sinchrotroninė spinduliuotė – instrumentas ateičiai keisti“, o taip pat organizavo BASNET projekto (ataskaitoje jo numeris 1.3) Baigiamąją konferenciją Vilniuje 2007 m. spalio 22-23 d.d.

Z.Rudzikas kaip tarptautinių orgkomitetų narys dalyvavo rengiant 2008 metais eilines HCI ir ICAMDATA konferencijas atitinkamai Japonijoje ir Kinijoje. Reikėtų dalyvauti jų darbe, juo labiau, kad 2010 ICAMDATA konferencija turėtų būti Vilniuje, tačiau galutinis sprendimas bus priimtas Kinijoje 2008 m. konferencijos metu.

### **7. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas**

Įvyko 21 seminaras (1,5 karto daugiau nei pernai), iš jų skyriaus darbuotojų susirinkimas ir akad. A.Jucio skaitymai. Seminaruose apsvaistytos dviejų (A.Kupliauskienė ir P.Bogdanovičius) planinių temų ataskaitos ir naujos temos, taip pat išklaustytos V.Tutlio, G.Merkelio ir R.Kisieliaus ataskaitos už atestacinius laikotarpius bei kitų kolegų ataskaitos apie komandiruotes užsienyje. Skyriaus seminaruose apsvaistyti 8 straipsniai ir LNFK-37 tezės. Išklaustytos trijų užsienio svečių paskaitos ir R.Karazijos apžvalginis pranešimas „Nedipoliniai efektai atomų spektruose“. Seminaro veikla šiemet, palyginus su praeitų metų „duobe“, kai įvyko tik 14 seminarų (užpernai 29), pagerėjo, tačiau beveik nebuvo grynai mokslinio pobūdžio užsiekimimų, skirtų naujų metodų, įdomių fizikinių rezultatų ir t.t. nagrinėjimui. Nereferuojama naujausia mokslinė literatūra – atseit sekama internete.



Žinoma, šiemet nemaža darbuotojų dalis kėlė kvalifikaciją klausydami paskaitų ciklą, rengiamą vykdant minėtąjį projektą 2.1. Kartu išryškėjo tam tikros neigiamos tokių projektų pusės, kai klausomasi nelabai reikalingų kūrybiniam darbui paskaitų. Išklaušę tas paskaitas gavo oficialius sertifikatus.

Darbuotojai kažkuria prasme kėlė kvalifikaciją lankydamiesi užsienyje, dalyvaudami konferencijose, bendraudami su kolegomis Lietuvoje ar užsienyje.

R.Karpuškienė ir O.Rancova kėlė kvalifikaciją lankydamos LitGrid ir BalticGrid seminarus VU MIF.

## **8. Pedagoginė veikla**

R.Karazija buvo V.Gončio habilitacijos komiteto pirmininkas, vieno apginto, kito rengiamo bakalauro darbų vadovas, dirbdamas VPU Teorinės fizikos ir informacinių technologijų katedroje ketvirčiu profesoriaus etato skaitė „Atomo fizikos“ (1 k. magistrantams) bei „Fizikos ir astrofizikos istorija“ (3 k. studentams) kursus.

P.Bogdanovičius yra O.Rancovos mokslinis vadovas, vadovavo VU studento baigiamajam darbui (10 balų), nesėkmingai – ŠU magistranto darbui. Skaitė paskaitas moksleiviams papildomo ugdymo mokykloje „Fizikos olimpas“, treniravo (100 val.) kandidatus į Lietuvos rinktinę Tarptautinėje fizikos olimpiadoje, ruošia kitai olimpiadai.

A.Kupliauskienė perskaitė 16 val. „Kvantinės sklaidos teorijos“ paskaitų ciklą VPU I k. magistrantams.

G.Gaigalas – VPU Bendrosios fizikos katedros vedėjas, skaitė du paskaitų kursus, vadovavo ir vadovauja bakalauro ir magistro darbams, skaitė 8 val. paskaitų ciklą Malmės universitete (Švedija).

V.Jonauskas vadovavo VPU bakalauro baigiamajam darbui.

A.Tamulis skaitė 4 val. paskaitų ciklą VU Gamtos fakultete bei tarptautinėje mokykloje „Advanced Methods in Biophysics“.

R.Kisielius skaitė paskaitų ciklą ITER savaitės metu „Įvadas į R-matricos teoriją“.

G.Merkelis yra R.Juršėno doktorantūros mokslinis vadovas.

R.Karpuškienė vadovavo VPU bakalauro darbui (8 balai).

A.Kynienė skaitė paskaitų ciklą VPU II k. studentams, recenzavo bakalauro darbą, dirbo mokykloje.

J.Tamulienė skaitė bendrosios fizikos ir aplinkos fizikos kursus VPU, vedė mechanikos ir molekulinės fizikos laboratorinius darbus, vadovavo A.Šliogerio praktikai.

Nemažai paskaitų įvairiuose renginiuose perskaitė Z.R.Rudzikas.

Taigi, pedagoginė veikla tikrai neblogo, dauguma darbuotojų vienu ar kitu būdu dalyvauja joje.

## **9. Dalyvavimas leidybinėje veikloje**

R.Karazija išleido bendrąją vadovėlį aukštajai mokyklai „Fizikos metodologija ir filosofija“, V., VPU leidykla, 2007. Recenzavo B.Martinėno vadovėlį „Fizika“, yra „Lietuvos fizikos žurnalo“ ir „Fizikų žinių“ redkolegijos narys.

A.Momkauskaitė redagavo minėtąjį R.Karazijos vadovėlį.

J.Tamulienė išleido mokomąją knygą pradinių klasių mokytojams ir moksleiviams: „Kasdieniai stebuklai“ bei „Šiuolaikinio eksperimento laboratoriniai darbai“.

P.Bogdanovičius ir A.Tamulis recenzavo straipsnius tarptautiniams leidiniams.

A.Kynienė yra „Fizikų žinių“ redkolegijos narė, R.Kivilšienė – „Fizikų žinių“ ir leidinio „Lietuvos dangus“ redkolegijų narė, daug prisideda juos leidžiant.

Z.Rudzikas yra „Lietuvos fizikos žurnalo“, šiemet įtraukto į ISI sąrašą, vyr. redaktorius, Cambridge University Press išleido jo monografijos „Theoretical Atomic Spectroscopy“ antrąją laidą.

### **10. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje**

R.Karazija yra Lietuvos mokslo premijų komisijos narys, LMT Mokslo prioritetų ir vertinimo komisijos narys, Visuotinės lietuvių enciklopedijos konsultantas (fizikos istorija), Aukštųjų mokyklų bendrųjų vadovėlių leidybos komisijos narys, VPU Fizinių ir technologijos mokslų konkursų ir atestacijos komisijos narys, vertino keliolika paraiškų stažuotėms po doktorantūros, turi nemažai pareigų institute.

P.Bogdanovičius padarė pranešimą EUROATOM atstovams „Teorinis atomų ir jonų spektrinių savybių tyrimas“ rengiantis pasirašyti Lietuvos dalyvavimo ITER projekte sutartį. Žinoma jo unikali veikla rengiant olimpiadininkus.

A.Kupliauskienė buvo ATS vadovo pavaduotoja, vedė, kaip paprastai, ATS 2007 metų publikacijų apskaitą, surinko ir įrišo 2006 m. publikacijų atspaudus, LVMSF ekspertė, Europos Komisijos FP VII ekspertė, BPD projekto „Mokslininkai. Mokslas. Visuomenė“ stebėtojų tarybos pirmininkė, daug organizacinio darbo atlieka kaip TFAI mokslinė sekretorė.

G.Gaigalas yra LMT verslo, mokslo ir studijų bendradarbiavimo komisijos narys, SKVC ekspertų, vertinančių fizikos krypties studijų programas aukštosiose mokyklose, grupės narys, VPU senato pirmininko pavaduotojas, VPU mokslo komisijos narys, buvo vienos habilitacinės procedūros komiteto narys.

G.Merkelis yra TFAI Studijų katedros vedėjas, TFAI MT švietimo ir studijų komisijos pirmininkas, Materialinio skatinimo komisijos narys.

J.Tamulienė yra Lietuvos fizikų draugijos išdininkė, instituto darbuotojų profsąjungos pirmininkė.

A.Kynienė yra Vilniaus m. Fizikos mokytojų asociacijos ir Fizikos metodinės tarybos narė.

R.Kivilšienė buvo Lietuvos fizikų draugijos Valdybos narė, daug prisidėjo tvarkydama jos archyvą.

Z.Rudzikas buvo Lietuvos fizikų draugijos prezidentas, yra Europos Ekonomikos ir Socialinių Reikalų komiteto narys, Europos Mokslo Tarybos PE2 tarybos narys, Lietuvos mokslo tarybos narys.

Taigi, kaip paprastai, dalis darbuotojų turi didelį organizacinio ir visuomeninio darbo krūvį, dalis praktiškai nedalyvauja šioje veikloje.

### **11. Mokslo žiniasklaida**

P.Bogdanovičius perskaitė 2 paskaitas fizikos mokytojams, dirbo rengiant ir pravedant Lietuvos jaunųjų fizikų Olimpiadą ir Čempionatą.

Daugiau žinių tuo klausimu darbuotojų ataskaitose neradau. Visgi paminėčiau A.Tamulio ir R.Kivilšienės veiklą šioje srityje. J.Tamulienė skaitė paskaitą Europos tyrėjų nakties metu.

Z.Rudzikas ne kartą kalbėjo per radiją, TV, publikavo populiarius straipsnius, bet tas buvo daugiau dėl kitų jo pareigų.

Skyriaus darbuotojai turėtų žymiai aktyviau dalyvauti šioje veikloje.

### **12. Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai**

Šiomet Taivanyje lankėsi P.Bogdanovičius ir A.Kupliauskienė. P.Bogdanovičius dar buvo Latvijoje (2 k.), Estijoje, Lenkijoje (2 k.), Irane bei Švedijoje (ataskaitoje apie tai nei žodžio).

A.Kupliauskienė buvo Latvijoje bei Briuselyje kaip ekspertė.

G.Gaigalas mokslo tikslais lankėsi Švedijoje (3 k.), Portugalijoje, Kinijoje.

Skyriuje lankėsi ES Jungtinio Tyrimų Centro Transuraninių elementų instituto darbuotojas Dr. Roberto Caciuffo, padarė mokslinį pranešimą (spalio 11-12 d.d.). Lapkričio 19-23 d.d. skyriuje lankėsi Malmės universiteto profesorius Per Jansson ir padarė pranešimą „Relativistic multiconfiguration calculations for atoms“.

V.Jonauskas ITER reikalais lankėsi Garchinge Max-Planck-Institut für Plasmaphysik (spalio 21-26 d.d.).

S.Kučas buvo Taline ir Stokholme.

A.Tamulis projektų vykdymo reikalais buvo Italijoje (gegužės 22-24 d.d.) bei Kroatijoje (gegužės 11-13 d.d.).

O.Rancova dalyvavo BASNET konferencijoje (liepos 8-9 d.d.) bei Baltic Grid vasaros mokykloje (liepos 2-6 d.d.) – abi priemonės Latvijoje.

Grupė skyriaus darbuotojų lankėsi Švedijoje.

J.Tamulienė buvo Estijoje ir Švedijoje. J.Tamulienė du mėnesius stažavosi Fotonikos institute Barselonoje.

Nemažai kartų į užsienį vyko Z.R.Rudzikas, bet dažniausiai tai buvo Briuselis EESRK ir EMT darbo reikalais. Kaip Europos Akademijos narys jis lankėsi Ispanijoje. Pažymėtina gruodžio 19-21 d.d. komandiruotė į Vatikaną dalyvauti įteikiant „Mokslas – taikai“ premiją ir moksliniame seminare.

### **13. Darbuotojų kvalifikacijos, pareigų ir skaičiaus pasikeitimai**

Esminių pasikeitimų čia neįvyko. Keli darbuotojai buvo peratestuoti kitai kadencijai, buvo peržiūrėti visų darbuotojų koeficientai, ~20% pakelti atlyginimai.

Doktorantai sėkmingai vykdė doktorantūros planus.

Judėjimas buvo tik įdarbintų studentų tarpe, dalis atleista.

### **14. Įsigyti nauji įrenginiai, kompiuteriai ir kiti prietaisai**

Skyrius šiemet gerokai papildė galimus naudoti kompiuterių pajėgumus – ir ne tik dėl galimybės naudotis grid technologijomis ir nacionaliniu superkompiuteriu, bet ir padidėjus personalinių ir nešiojamų kompiuterių kiekiui, papildomai įsigijus išorinių diskų, atmintinių ir t.t. Įsigyta taip pat ir programinės įrangos (žiūr. pridėtą sąrašą).

A.Tamulis įsigijo AMD dual core operon serverį, dviejų procesorių MacBook nešiojamą kompiuterį, TURBOMOLE kvantmechaninių programų paketą.

### **15. Kiti paminėtini pasiekimai**

Už gerą vadovavimą Lietuvos komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje P.Bogdanovičius gavo LR Prezidento padėkos raštą.

Paminėtinas grupės skyriaus darbuotojų bendradarbiavimas su kolegomis Lietuvoje ir Rytuose. A.Kupliauskienė bendradarbiavo su VU FF doc. K.Glemža, Užgorodo Elektronikos instituto Dr. A.Boroviku. Pasirašyta VU TFAI ir to instituto bendradarbiavimo sutartis. Ji parašė atsiliepimą apie E.V.Ovčerenko iš Užgorodo kandidato disertacijos „Indžio jonų sužadinimas lėtais elektronais“ autoreferatą.

G.Gaigalas neblogai integravosi į VPU, bendradarbiauja su jo kolegomis jame. Šiomet jis su grupe kolegų iš VPU yra iškeltas nacionalinei mokslo premijai. Jis taip pat gavo Lanzhou Northwest Normal Universiteto (Kinija) profesoriaus garbės vardą.

A.Tamulis įgyvendino galimybę, panaudojus slaptus raktus, nešiojamame kompiuteryje iš bet kurios Lietuvos ir pasaulio vietos kontroliuoti sprendžiamus uždavinius jo mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniame GRIDE.

Z.Rudzikas apdovanotas Baltijos valstybių mokslų akademijų medaliu.

## **16. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai**

Pateiksime skyriaus darbuotojų išsakytas pastabas ir pasiūlymus.

Organizuojant kvalifikacijos kėlimo kursus reikėtų atsižvelgti į darbuotojų pageidavimus ir nesiekti formalaus dalyvavimo juose.

Išspręsti nuolat kylančią problemą dėl PP – tam skirti gerai veikiančių nešiojamą kompiuterių ir įsigyti atsarginių projektorių.

Reikėtų institute įrengti specialų kambarį studentams, nes vadovų kambariuose jiems nėra vietos. Jame turėtų būti kompiuterizuotos darbo vietos su galimybe prisijungti prie galingesnių. Reikėtų efektyviau išnaudoti darbo kambarius. Instituto mastu turėtų būti nustatyti darbo saugos, higienos ir estetinio vaizdo reikalavimai darbo vietai ir kabinetui.

Siūloma įvesti patalpose bevielę ryšį. Atvykstantys užsienio mokslininkai pastoviai primena, kad pastate yra rūkoma. Tai prieštarauja ES nuostatoms ir kenkia darbuotojų sveikatai. Reikia uždrausti rūkyti balkonuose.

Reikia gerinti darbo kultūrą. Jei kabinete dirba keli darbuotojai, tai pokalbiai su atvykusiais svečiais turi būti kitoje patalpoje, koridoriuje arba hole.

R.Kivilšienė pageidauja naujesnės leidinių maketavimo programos INDesign.

Tačiau yra ir rimtesnių problemų. Silpnai ruošiam sau pamainą, mažai dėmesio skiriam naujų metodų įsisavinimui, naujų idėjų paieškai. Ateinančiais metais būtina labiau įsijungti į ITER darbus, užmegzti konkrečius dalykinius ryšius su kolegomis eksperimentininkais, kad tyrimai tikrai būtų reikalingi ITER problemoms spręsti.

Reikia labiau dalyvauti mokslinėse konferencijose.

Šias ir kitas problemas aptarsime skyriaus gamybiniame susirinkime po Naujųjų Metų.

## **17. 2007 m. publikacijų sąrašai**

Jis pateikiami priede prie šios ataskaitos, skliausteliuose pateikiami pernykščiai rezultatai. Knygų ir leidinių grafoje yra 5 (2) pozicijos. ISI sąrašo žurnaluose atspausdinom 17 (14) straipsnių (įskaitant LFŽ). Kituose žurnaluose ar leidiniuose yra 5 (7) straipsniai. Viso 22 (21).

Pranešimų, kurių santraukos buvo spausdinamos, yra net 28 (9), tačiau net 19 padaryti Vilniuje vykusioje 37-oje LNF konferencijoje. Pranešimų, kurių santraukos nebuvo spausdinamos, padaryta 14 (14).

Mokslo populiarinimo publikacijų yra palyginti nemažai, nors ta informacija ir nėra pilna.

## **18. Skyriaus pagrindinis pasiekimas**

Pasiūlyta nauja kvazireliatyvistinių Hartrio ir Foko lygčių sprendimo metodika, atsižvelgianti į baigtinį branduolio tūrį, bei originalus branduolio krūvio tankio pasiskirstymo modelis, leidžiantis bet kurių radialiųjų orbitalių atveju aprašyti jų teisingą elgesį koordinacių pradžioje. Parodyta, kad kontaktinė sąveika su branduoliu yra labai svarbi ne tik s-, bet ir

*p*-elektronams. Tai leido ženkliai patikslinti *p*-elektronų radialiąsias orbitales. Koreliacinėms pataisoms įskaityti sukurtos kvazireliatyvistinės transformuotos radialiosios orbitalės, pilnai pakeičiančios daugiakonfigūracinių lygčių sprendinius. Minėtos metodikos realizavimui parašytos penkios specialios kompiuterių programos, suderintos su egzistuojančių atomų ir jonų spektrinių charakteristikų skaičiavimo kompleksu. Pirmieji rezultatai rodo, kad sukurtasis metodas yra efektyvus ir leidžia gauti labai aukšto tikslumo rezultatus plačiai daugiaelektroniu atomu ir jonu, aktualių termobranduolinei plazmai, skalei.

Nuo laiko priklausomais kvantinės mechanikos elektronų korelacių metodais buvo sumodeliuoti įvairių dirbtinių minimalių gyvų ląstelių savaiminiai susidarymai iš atskirų bioorganinių molekulių ir tiksliai suskaičiuoti tų ląstelių fotosintezės spektrai, kurie atitiko JAV Los Alamos Nacionalinėje Laboratorijoje sintetinamų dirbtinių ląstelių eksperimentiniams spektrams. Užkertant neprognozuojamą dirbtinių ląstelių dauginimąsi, buvo kvantinis mechaniniais metodais sumodeliuoti įvairūs molekulinės elektronikos ir spintronikos loginiai vartai, kurie suardo tos ląstelės genomą arba sustabdo tų ląstelių maitinimąsi.

Taigi, 2007 metai skyriui atnešė nemažai naujovių (finansuojami projektai (jų tarpe ITER), grid technologijos, bendradarbiavimo su Transuraninių elementų institutu pradžia, kontaktai su abiem Kinijomis ir t.t.), tačiau buvo nemažai neišnaudotų galimybių. Linkiu dar sėkmingesnio darbo 2008 metais, juo labiau, kad valdžia žada didinti atlyginimus.

ATS vadovas  
2007 12 22

Z.R.Rudzikas