

VU TFAI Atomo teorijos skyriaus

2008 m. Ataskaita

1. VU TFAI Tarybos patvirtintos biudžetinės temos.

1.1. „Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams. Teorija ir interpretavimas“ (2005 09-2010 09). Vadovas: vyriaus. m. d. R.Karazija, vykdytojai: vyr. m. d. V.Jonauskas, vyr.m.d. S.Kučas, m.d. A.Kynienė, m.d. A.Momkauskaitė. Priskiriamų publikacijų skaičius: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Teoriškai įrodytas esminis daugiaelektronų Ožė šuolių – diskretinio dvigubo ir hipersatelitinio šuolių – vaidmuo, vykstant kaskadams kriptono atomuose po vakansijų subvalentiniuose sluoksniuose susidarymo. Tai patvirtina jonų išėigos rezultatų geras atitikimas eksperimentiniams duomenims, gautiems fotoelektronų ir fotojonų sutapimo metodu. Numatyti reti daugiaelektroniai šuoliai, kuriuos būtų galima stebėti eksperimentiškai.

Paaiškinta elektrinių kvadrupolinių 3p–2p šuolių geležies grupės elementuose eksperimentinių ir teorinių rezultatų nesutapimo priežastis. Dėl konfigūracijų sumaišymo kvadrupolinių linijų srityje atsiranda už jas intensyvesnės dipolinių šuolių linijos. Gauta dipolinių ir kvadrupolinių šuolių suminių intensyvumų santykio analizinė formulė.

Teoriškai išnagrinėti atomų su pusiau užpildytu sluoksniu energijos lygmenų, fotoelektronų ir fotosužadinimo spektrų ypatumai, susiję su dviejų funkcijų klasių egzistavimu tokiems atomams. Gautos paprastos algebrinės formulės, kurios įgalina paaiškinti atomų su pusiau užpildytu sluoksniu fotoelektronų ir fotosužadinimo spektrų pagrindinius dėsningumus.

Atlikti astrofizikinių duomenų interpretacijai reikalingi energijos lygmenų, elektrinių dipolinių bei kvadrupolinių ir magnetinių dipolinių bei kvadrupolinių radiacinių šuolių charakteristikų ir smūgių efektinių stiprių skaičiavimai vandeniliškiems Ar XVIII ir Fe XXVI jonams.

1.2. “Daugiaelektronų atomų spektrinių charakteristikų tyrimo metodų plėtra ir jų taikymas daugiakrūviams plazmos jonams” (2007 saus.-2011 bal.). Vadovas: vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vykdytoai: vyr. m. d. R. Karpuškienė ir j.m.d. O. Rancova. Priskiriamų publikacijų skaičius: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Vykdam planinę temą buvo pradėti daugiakrūvių jonų spektrinių charakteristikų skaičiavimai kvazireliatyvistiniame artinyje, apibendrinta plėtojama spektrų skaičiavimo metodika ir atlikti Ne V, Fe XXI ir Xe XLIII spektrinių charakteristikų tyrimai. Sukurtasis kvazireliatyvistinis artinys buvo pritaikytas galio tipo Mo XII ir W XLIV jonų spektrams tirti. Visi atlikti skaičiavimai patvirtino sukurto kvazireliatyvistinio artinio aukštą efektyvumą ir didelį tikslumą. Įprastiniame Breito ir Paulio artinyje atlikti platūs aštunto kalcio jono 3s²3p, 3s3p², 3s²3d, 3p³, 3s3p3d, 3s²4s, 3s²4p, 3s²4d, 3s²4f, 3s3p4s ir 3s3p4p konfigūracijų spektrinių charakteristikų tyrimai. Parodyta, kad įskaitant koreliacinius efektus tokio tipo konfigūracijoms būtina atsižvelgti į 2p-sluoksniu poliarizaciją.

1.3. “Elektronais sužadintų ir jonizuotų poliarizuotų atomų fluorescencijos ir elektronų tyrimas”, vad. vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vykd. vyr.m.d. V.Tutlys, vyr.m.d. G.Merkelis, j.m.d. R.Juršėnas ir doc. K.Glemža (VU FF), 2007-2010 m. Priskiriamų publikacijų skaičius: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Dviejų stadijų nereliatyvistiniame artinyje surastos pačios bendriausios poliarizuotų atomų, sužadintų arba jonizuotų polarizuotais elektronais, fluorescencijos arba Auger elektronų spinduliavimo skerspjuvių išraiškos. Jos aprašo visų procese dalyvaujančių dalelių patį bendriausią poliarizacijos atvejį. Bendrosios išraiškos panaudotos surasti formulėms, tinkamoms mažiau poliarizuotų dalelių naudojančių eksperimentų rezultatams interpretuoti. Pastarosioms formulėms suteiktas pavidalas, kuriame konkretūs atvejai aprašomi tomis pačiomis bendrosiomis išraiškomis, prilyginus nuliui daugialypio skleidinio multipoliais rangus, atitinkančius neregistruojamus dalelių parametrus. Toks formulių pavidalas yra patogus, nes leidžia panaudoti tą pačią programą skirtingiems vyksmams nagrinėti. Paprastesnės formulės surastos šiems atvejams: nepoliarizuotų atomų, sužadintų arba jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, fluorescencijos arba Auger elektronų kampinio pasiskirstymo diferencialiniams skerspjuviams ir asimetrijos parametrams, kampinių koreliacijų tarp poliarizuotų atomų, sužadintų arba jonizuotų nepoliarizuotais elektronais parametrams, fluorescencijos fotono ar Auger elektrono ir išsklaidyto ar atplėšto elektrono diferencialinio ir pilnutinio skerspjuvių magnetiniam dichroizmui.

Kartu su Užgorodo (Ukraina) eksperimentikais tirtas Na atomo $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2}$ sužadinimo skerspjuvio ties 38 eV ir 50 eV žadinančio elektrono energijomis padidėjimas. Remiantis skaičiavimo rezultatais padaryta išvada, kad šį padidėjimą gali nulemti radiacinių šuolių kaskadai iš $2p^5(3snp+3pns+3pnd)$ ir $2p^5(4snp+3dnp+4pnd+4dnp)$ elektronais sužadintų rezonansų.

Užbaigtas reliatyvistinio dvielektronio operatoriaus – tiek fizikinio, tiek ir efektinio – tyrimas naudojant matematinius metodus, taikomus teorinėje atomo spektroskopijoje: tenzorinę algebrą, judesio kiekio momento kvantinę teoriją, antrinę kvantavimą. Išvestos dvielektronio operatoriaus, veikiančio kvazisukinio erdvėje, išraiškos.

1.4. “Plazmos spektrų teorinis tyrimas naudojant smūginį radiacinį modelį” (2008.11-2013.11). Vadovas: vyr. m. d. V.Jonauskas, vykdytojai: m.d. A.Kynienė, inž. Š. Masys. Priskiriamų publikacijų skaičius: 1 straipsnis ISI sąrašo žurnale.

Teoriškai tirti magnetiniai dipoliniai šuoliai, vykstantys tarp $4d^N$ konfigūracijų lygmenų, volframo jonuose. Apskaičiuotas linijų intensyvumas taikant smūginį radiacinį modelį, parodyta dipolinių šuolių svarba $4d^N$ konfigūracijų lygmenų užpildai. Parodyta koreliacinių efektų svarba šiems šuoliams. Kai kurioms volframo jonų spektro, gauto EBIT eksperimento metu, linijoms pasiūlyta skirtinga identifikacija nuo eksperimentatorių siūlytos.

2. Finansuojami tarptautiniai projektai.

2.1. FP6 „Programuojamų dirbtinių ląstelių evoliucija“ („Programmable Artificial Cell Evolution - PACE“) (2004.04.01- 2008.06.30). Atsakingas vykdytojas vyr.m.d. A. Tamulis. Projekte dirbo inž. Šarūnas Kriščiukaitis. Paskutinių 15 mėnesių finansavimas buvo 66126.0 Eur. Finansavimas už visą laikotarpį buvo 160801.0 Eur.

2008 m. atliktas kvantinis mechaninis modeliavimas ir tyrimas naujų dirbtinių programuojamų gyvų ląstelių, sudarytų iš peptidinės nukleininės rūgšties (PNR), organometalinių sensibilizatorių, riebalinių rūgščių ir vandens arba metanolio, kurie tinka gaminti nanodydžio biorobotus nanoekologijai ir nanomedicinai, JAV, Europos ir Lietuvos poreikiams. JAV Los Alamos nacionalinės laboratorijos „Pirminių ląstelių susidarymas“ (Protocell Assembly (PAs) ir ES BP6 Programmable Artificial Cell Evolution (PACE) projektų mokslininkai gamino dirbtines gyvas kelių nanometrų dydžio ląsteles, kurios maitinasi riebalinių rūgščių pirmtakų molekulėmis. Tačiau tų dirbtinių ląstelių augimas yra mažai kontroliuojamas ir egzistuoja galimybė, kad jos gali mutuoti ir pradėti būti natūralios biosferos gyvius. A. Tamulio mokslinė grupė realizavo idėją, kaip

panaudoti molekulinės elektronikos ir spintronikos loginius įtaisus, kad būtų galima reguliuoti dirbtinių ląstelių dauginimąsi.

2.2. 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, atsakinga vykdytoja vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vykdytojai vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Tutlys, vyr.m.d. G.Merkelis, j.m.d. O.Rancova, j.m.d. R.Juršėnas, vyr.m.d. V.Jonauskas, vyr.m.d. S.Kučas, vyriaus.m.d. R.Karazija, vyr.m.d. R.Karpuškienė, 2008 08 01-2009 07 31, 12500 USD iš Taivaniai ir 21000 LTL iš Lietuvos Švietimo ir mokslo ministerijos.

2008 m. atlikti šarminių metalų Na ir K atomų išorinio užpildyto sluoksnio, sužadinto elektronais, fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos koeficientų ir poliarizacijos skaičiavimai, surastos Auger elektronų iš poliarizuotų atomų, sužadintų poliarizuotais elektronais, skerspjūvių bendrosios išraiškos, nagrinėti reliatyvistines sąveikas aprašantys operatoriai, tirta wolframo jonų vienkartinė ir daugkartinė jonizacijos.

2.3. FP7 EURATOM projektas ITER tyrimams pagal Europos Komisijos asociacijų kontraktą tarp EUROATOM ir LEI (Nr. FU07-CT-2007-00063) ir sutartį tarp LEI ir VU TFAI, atsakinga vykdytoja vyr.m.d. A.Kupliauskienė, dalyvauja 11 skyriaus darbuotojų, 2008 m., 21000 Eurų.

Reliatyvistiniu artutiniu atlikti neutralaus wolframo atomo ir W^{2+} , W^{4+} , W^{6+} jonų dvikartinės jonizacijos elektronų smūgiais skerspjūvių skaičiavimai. Parodyta, kad svarbų indėlį duoda ir Ožė šuoliai, vykstantys po vidinės vakansijos susidarymo, ir elektronų sluoksnių staigi perturbacija vienkartinės jonizacijos metu. Įvertinta trikartinės jonizacijos galimybė vykstant tolimesniems Ožė šuoliams. Atlikti elektrinių ir magnetinių dipolinių šuolių tikimybių W^{23+} jone reliatyvistiniame artutiniame bei sužadintų elektronais spartų iškraipytų bangų artutiniame skaičiavimai. Stipraus ryšio artutiniame R-matricos metodu vykdyti sužadintų elektronais spartų skaičiavimai W^{45+} jone.

2.4. FP7 Baltic-Grid II projektas. Dalyvavo šie ATS darbuotojai: vyr.m.d. J.Tamulienė, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. R.Karpuškienė, vyr.m.d. V.Jonauskas, vyr.m.d. S.Kučas, j.m.d. O.Rancova, vyr.m.d. R.Kisielius, vyr.m.d. A.Kupliauskienė.

Paruoštos ir įdiegtos grid'o aplinkoje programos leidžiančios įvertinti reliatyvistinių konfigūracijų sąveikos stiprumą. Tobulinta elektronais sužadintų atomų fluorescencijos parametrų skaičiavimo programa. Anksčiau sukurtos kompiuterinės programos pritaikomos veikti grid aplinkoje. Paruoštas aplikacijos lankstinukas.

2.5. Tarptautinis projektas „Kiurio ir americio junginių teorinis tyrimas“ ("Theoretical studies of Curium and Americium compounds") su Institute for Transuranium Elements (ITU) of the Joint Research Centre, Kontrakto No. 209692-2007-12 F1ED KAR LT. Vadovas vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vykdytojai: vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, inž. E.Gaidamauskas, 2008 m., 16000 EUR.

2008 m. teoriškai ištirtos Cm(+4) ir Am(+3) jonų pagrindinės spektroskopinės savybės.

3.Lietuvos fondų ir nevyriausybinų organizacijų finansuojami projektai.

3.1. Lit-Grid projektas. Projekto koordinatorė vyr.m.d. J.Tamulienė, dalyvavo šie ATS darbuotojai: vyr.m.d. V.Jonauskas, vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, vyr.m.d. R. Karpuškienė, vyr.m.d. R. Kisielius, vyr.m.d. S. Kučas, vyr.m.d. A. Kupliauskienė, j.m.d. O. Rancova. *Vykdyimo trukmė:* Nuo 2008-04-22 iki 2008-12-30. 2008 m. finansavimas: 77 tūkst. Lt, 2007 – 46 tūkst. Lt.

Klasteryje Atomas pakeisti sudegę vienos darbinės nodos abu maitinimo blokai, o vienam UPS šaltiniui teko pakeisti keletą įrenginių, įdėtas papildomas 500 GB diskas. Klasteris Dangus papildytas dar viena 16 procesorių darbine noda (dabar jų yra 2). Papildomai kiekvieno darbinio kompiuterio operatyvioji atmintis išplėsta iki 128 GB. Atliekant šiuos pakeitimus, teko perkompiliuoti naujausią operacinės sistemos branduolį, nes standartiniai branduoliai tokios operatyviosios atminties kiekio nepalaikė. Abi darbinės nodos tarpusavyje buvo sujungtos 2Gb/s ryšiu (bonding). Klasteris Spektras papildytas dar 3 darbinėmis 2 procesorių nodomis (viso dabar jame yra 24 nodos), kurių darbinė atmintis svyruoja nuo 1 iki 2 GB. Atnaujinti atomas.itpa.lt, spektras.itpa.lt, dangus.itpa.lt ir fobas.itpa.lt host sertifikatai. Įdiegta Garglia programinė įranga. Ištirtos galimybės įdiegti Dalton, deMon ir Gaussian programų paketus į klasterius Dangus ir Spektras. Parašyta ir suderinta kompiuterinė programa atomų jonizacijos skerspjūviams Borno artinyje, atplėštųjų elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos, jono rikiavimo ir elektronais jonizuotų atomų fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrams skaičiuoti. Patobulinta programinė įranga: ATSKIRLS, BREITLS, INTGRALS.

Atlikti Ca^{+6} $3s^23p$, $3s3p^2$, $3s^23d$, $3p^3$, $3s3p3d$, $3s^24s$, $3s^24p$, $3s^24d$, $3s^24f$, $3s3p4s$ ir $3s3p4p$ konfigūracijų energijos spektrų, bangų ilgių ir emisinių šuolių tikimybių, osciliatorių stiprių bei radiacinių gyvavimo trukmių skaičiavimai. Ištirtos daugiakrūvių jonų Mo^{+11} bei W^{+43} energijos ir spinduliuotės spektrų charakteristikos. Tiriamos spektrinės W^{+9} bei W^{+} jonų, aktualių termobranduolinių reaktorių fizikoje, charakteristikos. Atlikti Na ir K atomų fluorescencijos parametrų skaičiavimai.

Sintetinių spektrų modeliavimo paketas SYNTSPEC yra įdiegtas ir tobulinamas gridcom aplinkoje. Bendradarbiaujant su dr. B. Palak (Poznanės superkompiuterių centras, Lenkija), tobulinama SYNTSPEC Migration Desktop versija. Paruoštos elektroninės „Aplinkos fizikos“ paskaitų VPU Gamtos specialybės studentams versijos ir įdiegtos SIG aplinkoje.

Informuoti ir apmokyti potencialūs naudotojai. Apie galimybes ir sąlygas naudotis LitGrid paslaugomis informuoti prof. Grzegorz Kamieniarz (Lenkija) ir dr. Sergey Feranchuk (Baltarusija). atlikti LitGrid veiklos pateikimo metodinio organizavimo ir planavimo darbai. Buvo sukurti du lankstinukai. Susisiektas ir sudominta laidos „Negali būti“ kūrėjų grupė. Užmegzti ryšiai su Pedagogų profesinės raidos centru. Taip pat susitarta su Tarptautinių projektų agentūros (TPA) darbuotojais, kad jie savo renginių metu informuotų klausytojus apie LitGrid programos teikiamas paslaugas. Tam tikslui buvo paruošta pranešimo skaidrė. Be to, tarpininkauta, kad vieno TPA renginio metu būtų perskaitytas pranešimas apie saugos priemones, kurios yra taikomos LitGrid'e. Paruoštas standas VMSF dešimtmečiui, kuriame informuota, kad šios institucijos remiamas projektas yra vykdomas naudojantis LitGrid programos paslaugomis. Dalyvauta ruošiant reklaminių straipsnių apie LitGrid programą. Kasmetiniame renginyje „Europos Tyrėjų naktis“ moksleiviai, mokytojai ir tėvai buvo supažindinti su vykdoma LitGrid programa, jos tikslais ir paslaugomis. Pranešimų metu buvo pabrėžiama, kuo šios technologijos yra svarbios mokslininkams.

3.2. Grid-Techno projektas. Projekto koordinatorė: vyr.m.d. J. Tamulienė Dalyviai: vyr.m.d. V. Jonauskas, vyr.m.d. S. Kučas, astronomas-tyrėjas Š. Mikolaitis, j.m.d. E. Puzeras, j.m.d.

O. Rancova, vyriaus.m.d. G. Tautvaišienė. *Vykdyto trumė*: Nuo 2008-04-22 iki 2008-12-30. 2008 metų finansavimas: 86,2 tūkst, 2007 -72,99 tūkst.

Rasta, kad Co atomai tirtuose dalelėse yra trijų - septynių atomų apsuptyje. Nustatyta, kad Co_6 yra Co nanodalelių struktūrinis elementas. Remiantis atliktų tyrimų rezultatais galima teigti, kad didelės Co nanodalelės bus fcc struktūros, o mažesnės – fcc struktūros su bcc struktūros elementais. Be to, yra nustatyta Co_{18} nanodalelės struktūra. Šios dalelės stabiluma yra didžiausias palyginus su kitų tirtų dalelių stabilumu.

3.3. ES remiamas struktūrinių fondų projektas „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė“. Dalyvavo šie ATS darbuotojai: vyriaus.m.d. R.Karazija, vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Jonauskas, m.d. A.Momkauskaitė

Parengta medžiaga interneto portalui „Mokslas plus“: aštuoniolikos įdomių fizikos bandymų ir žaislų aprašymai, šešių mokslo populiarinimo knygų ir keturių vadovėlių aukštajai ir vidurinei mokyklai pristatymai, trys mokslo populiarinimo straipsniai, pildytas mokslo naujienų skyrius, remiantis anksčiau publikuotais mokslotyriniais straipsniais ir surinktais duomenimis, pateikta daug iliustracinės medžiagos, suredaguoti tekstai. Sudaryti moksleivių fizikos žinyno puslapiai bei kuriant fizikos uždavinius bei pristatyti Tarptautinės fizikos olimpiados uždaviniai.

3.4. COST P19 projektas. Projekto koordinatore: vyr.m.d. J. Tamulienė, *dalyviai*: vyr.m.d. V. Jonauskas. *Vykdyto trumė*: Nuo 2008-08-22 iki 2008-12-30 2008 metų finansavimas: 15 tūkst. Lt.

Sumodeliuotos ir ištirtos struktūros sudarytos iš skirtingo dendrimero grandinėlių skaičiaus. Atlikta sumodeliuotų struktūrų geometrijos optimizavimo procedūra ir nustatyta tikimiausia sumodeliuotų struktūrų geometrija. Remiantis gautais rezultatais, nustatyta, kad dendrimerų molekulių ertmės sudaro grandinėlių sudarytos plokštumos. Numatyta, kad PPI dendrimeruose ertmės nesusidarys, kai grandinėlių skaičius ploto vienetu yra nedidelis. Nustatyta, kad deguonies atomai stabilizuoja Co nanodaleles. Šie tyrimų rezultatai sutampa su Ghosh ir kt. tyrimo rezultatais. Rasta, kad CoO_2 , Co_2O_3 ir Co_6O_7 dalelės turėtų būti aptinkamos tarp gerai žinomų ir plačiai aprašomų CoO ir Co_3O_4 dalelių. Nustatyta, kad tirtų dalelių stabilumas priklauso nuo deguonies atomų skaičiaus tol, kol jis nėra didesnis nei 7. Tolimesnis deguonies atomų skaičiaus didinimas neįtakoja dalelės stabilumo jei struktūrinis dalelių elementas (Co_6 dalelė) išlieka neišardytas. Nustatyta, kad kobalto oksido dalelių magnetinės savybės nepriklauso nuo jų formos, bet priklauso nuo deguonies atomų skaičiaus jose. Be to Co dalelių magnetinės savybės keičiasi todėl, kad yra išardomos Co-Co jungtys, kurias sudaro silpnai sąveikaujantys elektronai, ir yra svarbu, koks yra dalelės dipolinis momentas, t.y. kokia yra elektronų krūvio lokalizacija. Rasta, kad kobalto oksido dalelė bus paramagnetikas, kai joje bus nesukompensuotas silpnai sąveikaujančių elektronų, esančių ant ardančios orbitalės, sukinyš, ir jo nekompensuoja jono sukinyš.

3.6. COST D35 projektas “Nuo molekulių iki molekulinų prietaisų: elektroninių, fotoninių, magnetinių ir spintroninių vyksmų kontroliavimas“ tęsėsi 2008 metais. Atsakingas vykdytojas vyr.m.d. A. Tamulis, vykdytojas inž. Šarūnas Kriščiukaitis. Finansavimas už visą laikotarpį buvo 13000.0 Litų.

Atliktas kvantinis mechaninis molekulių, tinkamų molekulinės elektronikos ir spintronikos kompiuterių elementams, modeliavimas. Paruoštos rekomendacijos ir detalios instrukcijos, kaip JAV Los Alamos Nacionalinėje laboratorijoje (LANL), Europoje ir Lietuvoje gaminti savaime susidarancias sistemas iš molekulių, atliekančių logines operacijas.

3.7. ES remiamas struktūrinių fondų projektas „Studentų mokslinė praktika“. Dalyviai: vyriaus.m.d. G.Gaigalas (1 studentas), vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius (1 studentas), vyr.m.d. J.Tamulienė (1 studentas), vyr.m.d. A.Tamulis (1 studentas), vyr.m.d. V.Jonauskas (1 studentas).

4. Dalyvavimas nefinansuojamuose Lietuvos ir tarptautiniuose projektuose, jų pavadinimai, atsakingas asmuo ir vykdytojai, vykdymo trukmė, svarbiausi rezultatai.

5. Kiti svarbūs moksliniai rezultatai.

R.Juršėnas išplėtojo paketą “NCoperators”, naudodamas simbolinio programavimo kalbą “Mathematica 6.0”. Paketas leidžia komunikuoti su išorine terpe (C/C++), operuoti nekomutuojančiais operatoriais (taiko visas antikomutacines savybes). Taip pat naudoja antrinio kvantavimo metodiką ir judesio kiekio momento teoriją. Naudojantis “NCoperators” paketu galima spręsti įvairias daugelio dalelių sistemos teorinio tyrimo problemas, pvz. trikdžių teorijos (MBPT). Naudojantis šiuo simbolinio programavimo paketu, išvestos antros eilės efektinio hamiltoniano surištųjų momentų analizinės išraiškos bet kokio rango sąveikos operatoriui ir, atskiru atveju, skaliariniam dvielektronės sąveikos operatoriui. Momentų surišimo metodika tokia pat, kaip buvo naudota atliekant reliatyvistinio dvielektronio operatoriaus – tiek fizikinio, tiek ir efektinio – tyrimus. Toliau generuojamos formulės, reikalingos aukštesnės eilės pataisoms.

A.Tamulis atliko kvantinius mechaninius dirbtinių minimalių gyvų ląstelių savaiminio susidarymo ir fotosintezės, naudojant paprastus sensibilizatorius ir vandens aplinką, tyrimus. Taip pat jis atliko dirbtinos gyvos ląstelės ir jos pagrindu sukurtą nano biorobotą, susidedančio iš 800-2429 atomų, kvantmechanį modeliavimą, naudodamas organometalinius kompleksus. Jo teoriniai kartu su eksperimentikais darbai parodė galimybę sintetinti visiškai naujas dirbtines gyvas ląsteles, kurios naudotų efektyvesnę organometalinių sensibilizatorių $Ru(bpy)_2(4-Bu-4'-Me-2,2'-bpy)]^{2+}$ (sutrumpinimai: Me = metilas; Bu = butilas; bpy = bipyridinas), o visa dirbtinė ląstelė savaime susidaro, auga ir dauginasi metanolio tirpale. Buvo kvantmechaniškai sumodeliuoti molekulinės elektronikos ir spintronikos kompiuterių elementai, galintys kontroliuoti dirbtinių ląstelių fotosintezės vyksmus, augimą ir dauginimąsi. Atliktas programuojamų saugių, negalinčių neprognozuojamai daugintis, dirbtinių gyvų ląstelių ir jų pagrindu sukurtų nano biorobotų, atliekančių nanoekologinius ir nanomedicinos darbus, kvantmechanis modeliavimas, naudojant organometalinius kompleksus. Kvantinės mechanikos metodais buvo modeliuojama specialių reguliuojančių genų implantacija į šiuos dirbtinius gyvius: į nano-medicininius robotus ir dirbtines programuojamas minimalias ląsteles, kurių paskirtis naikinti išsiliejusius naftos produktus, surinkti radioaktyvių atliekų atomus, suėsti piktybinius navikus, tiksliai ir kryptingai transportuoti vaistines medžiagas į sergančių ląstelių organelas, užkertant tuo pačiu savaiminį neprognozuojamą augimą, dauginimąsi ir plitimą. Atlikti šie darbai: dirbtinių ląstelių organometalinių fotosintetinių centrų kvantmechaninis modeliavimas ir parengtos rekomendacijos eksperimentinių tiriamųjų darbų sintezei bei atlikti eksperimentiniai darbai JAV LANL; dirbtinių ląstelių logiškai kontroliuojamų fotosintetinių centrų kvantmechaninis modeliavimas ir parengtos rekomendacijos eksperimentinių tiriamųjų darbų sintezei bei atlikti eksperimentai JAV LANL; nanobiorobotų su logiškai kontroliuojamais fotosintetiniais centrais kvantmechaninis modeliavimas ir parengtos rekomendacijos eksperimentinių tiriamųjų darbų sintezei bei atlikti eksperimentai JAV LANL.

6. Organizuoti moksliniai renginiai

O.Rancova ir R.Karpuškienė dalyvavo pravedant [Šiaurės ir Baltijos šalių astrofizikos mokslinių tyrimų kursas "Žvaigždžių astrofizika" \(Nordic-Baltic Research Course in Astrophysics\)](#), rugpjūčio 10-24 d.d. Molėtų observatorijoje.

O.Rancova. R.Karpuškienė ir R. Kivilšienė dalyvavo organizuojant ir pravedant Annual Conference of the European Platform of Women Scientists "Women shaping Science", birželio 5-7 d.d. 2008, Vilniuje.

A.Kupliauskienė organizavo 2008 m. vasario 25-29 d. 2004-2006 m. BDP 2 prioriteto "Žmogiškųjų išteklių plėtra" 2.5. priemonės "Žmogiškųjų išteklių kokybės gerinimas mokslinių tyrimų ir inovacijų srityje" projekto "Lietuvos mokslininkų gebėjimų ugdymas Lietuvai integruojantis į Europos Sąjungos infrastruktūrą" (SFMIS Nr. BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0038) paskaitų ciklą "Europos jungtinis tyrimų centras: mokslas – pramonė – produktas – vartotojas – mokslas".

Rugsėjo 12 d. surengti eiliniai prof. A.Jucio skaitymai.

7. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas

2008 m. Įvyko 24 (pernai 21) Atomo teorijos seminaro užsiėmimai, iš jų 2 susirinkimai (gamybinis ir skirtas skyriaus vadovo rinkimams). Seminaruose svarstyti 7 straipsniai, išklaustyti 2 paskaitos, 2 apžvalginiai pranešimai (R. Karazijos ir R. Juršėno), 11 ataskaitų už įvairias komandiruotes, svarstyti R. Juršėno, S. Kučo, A. Kynienės, A. Momkauskaitės ataskaitos už atestacinius laikotarpius bei dvi naujos biudžetinės temos (V. Jonausko ir G. Gaigalo) bei aptartas esamų temų vykdymas. Lankomumas: mažiausiai seminarų praleido A. Kupliauskienė, R. Karpuškienė, R. Juršėnas po 1, A. Kynienė - 2, V. Tutlys, V. Jonauskas, R. Kisielius - po 3; mažiausiai seminarų aplankė: A. Tamulis, E. Gaidamauskas - po 3, Z. Rudzikas, A. Bernotas, R. Kivilšienė - po 6.

Daug skyriaus darbuotojų išklausė 2004 – 2006 metų Bendrojo programavimo Dokumento 2 prioriteto "Žmogiškųjų išteklių plėtra" 2.5 priemonės "Žmogiškųjų išteklių kokybės gerinimas mokslinių tyrimų ir inovacijų srityje" projekto "Lietuvos mokslininkų gebėjimų ugdymas Lietuvai integruojantis į Europos Sąjungos infrastruktūrą" (SFMIS NR. BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0038) paskaitų ciklą "Europos jungtinis tyrimų centras: mokslas – pramonė – produktas – vartotojas – mokslas" ir gavo sertifikatus.

G.Gaigalas lankė mokslinius seminarus Vilniaus pedagoginio universiteto, Fizikos ir technologijos fakultete, dalyvavo projekte „Aukštosios mokyklos dėstytojų pedagoginių kompetencijų tobulinimas“ (projekto kodas – BPD 2004-ESF-2.4-03-05/0161; paramos sutarties Nr. ESF/2004/2.4-03-358/BPD-78/3) mokymuose (Pedagoginių kompetencijų tobulinimo seminarai: 9 moduliai, 45val.)

O.Rancova organizavo BalticGrid II projekto seminarą VU TFAI lapkričio 28 d., kuriame perskaitė pranešimą „e-Infrastruktūros plėtros Europos Sąjungoje gairės“, parengta pagal 6th e-Infrastructure Concertation Meeting.

8. Pedagoginė veikla

P.Bogdanovičius vadovavo doktorantei O.Rancovai, kuris sėkmingai lapkričio mėn. užbaigė doktorantūros studijas ir 2008 m. sausio 8 d. ginsis disertaciją, VU FF III k. studentui A. Rinkevičiui, VU FF II kursos studentui L. Krasauskui ir VU FF III kursos studentui A. Štikonui, ŠU magistrantės I. Bolskytės magistriniam darbui, dalyvavo ruošiant doktorantus Š. Mikolaitį ir R. Juršėną egzaminui ir pačiame egzamine, pirmininkavo per Š. Kriščiukaičio Kvantinės mechanikos egzaminą, ruošė Lietuvos komandą Tarptautinei fizikos olimpiadai (apie 40 val.), skaitė 18 val. paskaitų Fotono Olimpo mokykloje. Jis buvo E. Norvaišo habilitacijos procedūros komisijos narys.

G.Gaigalas vadovauja VPU studento Pavel Rynkun baigiamajam magistriniam darbui "Brillouin'o teoremos taikymas f- pasluoksniui", VPU studento Andriaus Alkausko baigiamajam bakalauro darbui „Cm(+4) ir Am(+3) jonų charakteristikų tyrimas", VPU studento Vytauto Žemgilio kursiniam darbui „Poslinkio dėsnis. Radioaktyvių branduolių nuoseklus skilimas“, VPU studentės Oksanos kursiniam darbui „Alfa skilimas. alfa spinduliavimas“, buvo A. Kiverio habilitacinės procedūros komisijos pirmininkas (VPU), L. Rastenienės daktaro disertacijos tarybos pirmininkas (VPU), D. Jurčiukonio daktaro disertacijos tarybos narys (VU TFAI), VPU valstybinių egzaminų komisijos narys, VPU baigiamųjų magistrinių ir bakalauro darbų gynimo tarybos narys.

A.Tamulis vadovavo studentų Martyno Miciaus (VU ChF), Manto Grigalavičiaus (VU FF) ir Vidmanto Feizos (VU GMF) mokslinės praktikos ir kursinias darbams, gimnazisto Giedriaus Medzevičiaus užklasiniam moksliniam darbui bei laikinai antraeilinėse inžinieriaus pareigose dirbusiam Šarūnui Kriščiukaičiui, kuris nesėkmingai bandė stoti į instituto doktorantūrą.

R.Karpuškienė vadovauja VPU magistrantės baigiamajam darbui.

V.Jonauskas vadovavo Š. Masio fizikos magistro studijų programos kursiniam darbui bei mokslinei praktikai: „LaNiO₃ kristalų elektroninės sandaros tyrimas kvantinės chemijos metodais“.

G.Merkelis yra doktoranto R.Juršėno vadovas, skaitė ciklą paskaitų apie grafinių metodų ir trikdžių teorijos taikymus atomo teorijoje Taivano Nacionalinio universiteto Atomo ir Molekulių mokslo skyriuje.

9. Dalyvavimas leidybinėje veikloje

R.Kivilšienė ir O.Rancova ruošė ir organizavo Lietuvos fizikos žurnalo mokslo populiarinimo priedo „Fizikų žinios“ Nr. 34 ir 35 išleidimą. R.Karazija ir A.Bernotas leido „Lietuvos fizikos žurnalą“.

10. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje.

P.Bogdanovičius vadovavo Lietuvos komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje ir už šią veiklą gavo LR Prezidento padėkos raštą, yra Lietuvos fizikų draugijos valdybos narys, recenzavo 2 straipsnius ISI sąrašo žurnalui, dalyvavo organizuojant Lietuvos moksleivių fizikos Olimpiadą ir Čempionatą.

R.Karazija yra „Lietuvos fizikos žurnalo“ vyr. redaktorius, „Fizikų žinių“ redakcinės kolegijos narys, Lietuvos mokslo premijų komiteto narys, Visuotinės lietuvių enciklopedijos konsultantas (fizikos istorija), aukštųjų mokyklų bendrųjų vadovėlių leidybos komisijos narys, instituto mokslo ir savianalizės komisijos ir Statuto priežiūros komisijos pirmininkas, VPU Fizinių ir technologijos mokslų srities konkursų ir atestacijos komisijos narys.

G.Gaigalas dalyvauja 2006/2010 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje (su Malmės universitetu (Švedija)), projekte „Docente Europeo: move'in Science2“, Nr. 134648-2007-IT-COMENIUS-CM. Jis yra Vilniaus pedagoginio universiteto „Bendrosios fizikos katedros“ vedėjas, Studijų kokybės vertinimo centro (SKVC) ekspertų, vertinančių fizikos krypties studijų programas aukštosiose mokyklose, grupės narys, Vilniaus pedagoginio universiteto Senato pirmininko pavaduotojas, Vilniaus pedagoginio universiteto „Mokslo komisijos“ narys.

R. Karpuškienė buvo Atomo teorijos seminaro sekretorė.

O.Rancova yra „Fizikų žinių“ žurnalo projekto koordinatore ir redkolegijos narė. 2008 metais išleisti du žurnalo numeriai – 34 ir 35.

R.Kivilšienė yra „Fizikų žinių“ žurnalo redkolegijos narė, Lietuvos atstovė Europos fizikų draugijos Fizikos istorikų darbo grupėje.

G.Merkelis yra TFAI Studijų katedros vedėjas, Doktorantūros komisijos pirmininkas.

A.Kynienė yra „Fizikų žinių“ redkolegijos narė.

J.Tamulienė yra VU TFAI Profesinės sąjungos pirmininkė, LFD išdininkė ir Lietuvos mokslininkų sąjungos tarybos narė.

A.Kupliauskienė buvo skyriaus vadovo pavaduotoja organizaciniam darbui, nuo 2008 m. gegužės 3 d. – ATS vadovė, Valstybinio mokslo ir studijų fondo ekspertė, Europos Komisijos projektų vertinimo ekspertė, BDP projekto „Mokslininkai. Mokslas. Visuomenė“ stebėtojų tarybos pirmininkė, Asociacijos „BASNET forumas“ valdybos pirmininkė, vedė ATS 2008 m. publikacijų apskaitą, surinko ir įrašė ATS 2007 m. publikacijų atspaudus.

11. Mokslo žiniasklaida

Skyriaus darbuotojai atspausdino 7 mokslo populiarinimo straipsnius, perskaitė 29 paskaitas, sukūrė 2 filmus, vieną kartą dalyvavo TV laidoje, išvertė iš anglų kalbos vieną knygą ir 2 straipsnius.

P.Bogdanovičius skaitė mokslo populiarinimo paskaitas Vilniaus m. Fizikos mokytojų konferencijoje, Žvėryno gimnazijos moksleiviams, Fizikos olimpiados dalyviams, VPU FTF studentams, Žirmūnų ir kitų gimnazijų moksleiviams, Mokslo festivalyje „Erdvėlaivis Žemė“, 18 val. paskaitų moksleiviams „FO“ mokykloje.

R.Karazija perskaitė 4 mokslo populiarinimo paskaitas.

A.Momkauskaitė su A.Bernotu iš anglų k. išvertė mokslo populiarinimo knygą, skirtą vaikams: Lucy ir Stephen Hawking. Džordžas ir Visatos paslaptys (George's Secret Key to the Universe), kurią išleido „Jotema“ spaustuvė.

A.Tamulis sukūrė 2 populiarius filmus, kurie yra įdėti MokslasPlus svetainėje, pasisakė LTV laidoje „Negali būti“, skaitė paskaitą mokslo festivalyje „Erdvėlaivis Žemė“, sukūrė savo trejų metų darbų aprašymą PACE projekto tinklapyje.

A.Bernotas iš anglų kalbos išvertė du straipsnius ir straipsnį žurnale „Mokslas ir technika“.

12. Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai

Skyriaus darbuotojai buvo išvykę į užsienį 53 kartus (išvykų sąrašas pridedamas). Daugiausia keliavo Z.Rudzikas – 21 kartą, iš jų 12 - į Briuselį.

Paminėtina G.Merkelio ir R.Juršėno 10 dienų kelionė į Taivanį, Z.Rudziko į Pekiną (Kinija) ir Čikagą (JAV), P.Bogdanovičiaus į Tokiją (Japonija). Kiti keliavo į Europos šalis po vieną-du kartus. Tik A.Tamulis buvo išvykęs 4, P.Bogdanovičius, G.Gaigalas ir R.Juršėnas po 3 kartus. A.Bernotas, V.Tutlys, A.Kynienė, A.Momkauskaitė ir E.Gaidamauskas nebuvo išvykę.

Kadangi organizavome ES remiamo struktūrinių fondų projekto paskaitų ciklą „Europos jungtinis tyrimų centras: mokslas – pramonė – produktas – vartotojas – mokslas“, buvo atvykęs gausus būrys lektorių iš Europos šalių: G.Carrati ir J.Ongena iš Belgijos (Europos komisija), A.Morgenstern, P.Soucek, T.Gouder, N.Magnani, R.Caciuffo iš Jungtinių tyrimų centro Transuraninių elementų instituto, M.Bleicher iš Vokietijos, I.P.Grant iš Didžiosios Britanijos. Kovo 4 – balandžio 2 dienomis. Dr. C. Dong (College of Physics and Electronic Engineering Northwest Normal University Lanzhou (Kinija)) lankėsi VPU Bendrosios fizikos katedroje. Jis institute padarė pranešimą.

13. Darbuotojų kvalifikacijos, pareigų ir skaičiaus pasikeitimai.

2008 m. skyriuje nuolat dirbo 20 darbuotojų (sąrašas pridedamas): 4 vyriausieji mokslo darbuotoja (iš jų 2 po pusę etato antraeilėse pareigose), 11 vyresniųjų mokslo darbuotojų (iš jų 1 antraeilėse pareigose ketvirčiu etato), 2 mokslo darbuotojai, 2 jaunesnieji mokslo darbuotojai (po pusę etato) ir 1 inžinierius pusę etato. Struktūrinių fondų vykdymui laikinai buvo priimta I.Pivoriūnienė (2008.02.07-05.30). Inžinierius Š.Kriščiukaitis laikinai dirbo „PACE“ projekte (2008.01.02-05.30) ir COST D35 projekte (2008.06.02-11.28). Metų gale VU FF magistrantas

Š.Masys buvo priimtas inžinierium puse etato terminuotam laikotarpiui (2008.11.04-2009.09.30). Nuo lapkričio 15 d. O.Rancova pradėjo dirbti j.m.d. pilnu etatu, nes sėkmingai baigė doktorantūros studijas. S.Kučas buvo peratestuotas vyr.m.d., o A.Momkauskaitė ir A.Kynienė – m.d. pareigoms, R.Juršėnas laimėjo konkursą j.m.d. pareigoms užimti.

14. Įsigyti nauji įrenginiai, kompiuteriai ir kiti prietaisai.

P.Bogdanovičius nusipirko lazerinį spausdintuvą HP CP1215 iš pinigų, gautų anksčiau už Jaskutsko universiteto aspirantės T. Pachomovos stažuotę. Iš Instituto lėšų buvo nupirkti naujas internetinio tinklo perjungiklis ir įtampos palaikymo prietaisai, A.Juršėnas, V.Tutlys, A.Karpuškienė gavo po monitorių. A.Tamulis iš projekto PACE lėšų nusipirko 8 branduolių serverių ir du 4 branduolių serverius. J.Tamulienė iš savo projekto lėšų nusipirko nešiojamą kompiuterį ir Sigma Plot programą. Iš Tawan-Baltic projekto lėšų skyriaus darbuotojams buvo nupirkta įvairių kompiuterių priedų ir dalių (apie 6000 Lt).

15. Kiti paminėtini pasiekimai.

A.Kupliauskienė paruošė dvi paraiškas finansavimui pagal Lietuvos ir Ukrainos dvišalio bendradarbiavimo mokslo srityje programą. Jos pateiktos LR ŠMM ir LMSF. Viena skirta finansuoti moksliniams tyrimams, o kita – kelionėms į Ukrainą pas partnerius, dirbančius Užgorode Elektronų fizikos institute. Projektas, pateiktos LR ŠMM, gavo finansavimą.

J.Tamulienė buvo susitikime su Nobelio premijos laureatais Lidau, Vokietijoje. 2008 m. skyriaus darbuotojai dirbo įvairiuose projektuose. Jie uždirbo apie 450 tūkst. Lt: 250000, vykdydami tarptautinius projektus (PACE – 76107 Lt, Taiwan-Baltic – 49700 Lt, ITER – 72510 Lt, JRC Transuraninių elementų – 55245 Lt), ir 200000 Lt – Lietuvos finansuojamus projektus (LitGrid – 46000 Lt, GridTechno – 86000 Lt, COST P19 – 15000 Lt, COST D35 – 13000 Lt, ITER projektui per TPA – 90636 Lt).

15. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai.

Reikėtų institute įrengti specialų kambarį studentams, nes vadovų kambariuose jiems nėra vietos. Jame turėtų būti darbo vietos su kompiuteriais nebūtinai naujais, bet turinčiais galimybę prisijungti prie galingesnių.

Reikėtų kažkokiu būdu išspręsti kompiuterių priežiūros ir taisymo tvarką. Sugedus kompiuteriui tenka laukti mėnesius kol jis bus pataisytas.

P.Bogdanovičius pageidauja nupirkti naują nešiojamą kompiuterį iš instituto lėšų, nes sugedo jo asmeninis nešiojamas kompiuteris, pirktas dar 2001 m. Toks kompiuteris jam būna labai reikalingas vykstant į Tarptautines fizikos olimpiadas bei tarptautines konferencijas.

16. Mokslinė produkcija.

2008 metus galima laikyti derlingais. Atspausdinta 18 straipsnių ISI sąrašo žurnaluose, t.y. po vieną skyriaus mokslo darbuotojui, ir 2 straipsniai ISI konferencijų serijos darbuose. Atsižvelgus į tai, kad kai kuriuose straipsniuose daug kitų institucijų autorių, ATS indėlis sudaro 8,35 straipsnio. Dar 12 straipsnių paskelbta kituose leidiniuose ir ne ISI sąrašo užsienio žurnaluose. Atspausdinta 17 pranešimų konferencijose tezių. A.Tamulis parašė knygos „Multiscale Simulation Methods for Nanomaterials“ antrąją dalį.

Vertinant instituto mokslinę produkciją tarp institucijų Lietuvos mastu, ISI sąrašo žurnaluose straipsnių indėlis AIV apskaičiuojamas pagal formulę

$$AIV = \left(\frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left(1 + \frac{IF}{AIF} \right),$$

kur *NI* – institucijų skaičius, *NA* – bendra autorių skaičius, *IF* – Impact Factor, *AIF* – Agregate Impact Factor. Po to apskaičiuojami taškai AIV padauginus iš 30, ir pridedami kiti straipsniai, padauginuti iš 6 ar 5, priklausomai nuo leidyklos ir leidinio. Priede pateikiama lentelė, kurioje pateikiamas ATS darbuotojų mokslinės produkcijos indėlis, apskaičiuotas pagal tarpinstitucines rekomendacijas.

Visų publikacijų sąrašai pridedami.

UŽSIENIO KOMANDIRUOTĖS 2008 m.
ATS

Z.Rudzikas	01 16 – 01 17	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	01 22 – 01 23	Briuselis	komandiruotė
R.Juršėnas	01 14	Ryga	komandiruotė
R.Juršėnas	01 21 – 01 29	Taivanis	komandiruotė
G.Merkelis	01 21 – 01 29	Taivanis	komandiruotė
J.Tamulienė	02 11 – 02 12	Clermont-Ferrand (Prancūzija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	02 13 – 02 14	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	02 18 – 02 19	Briuselis	komandiruotė
V.Jonauskas	03 04 – 03 07	Garchingas (Vokietija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	03 05 – 03 06	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	03 12 – 03 13	Briuselis	komandiruotė
A.Tamulis	03 10 – 03 15	Venecija	komandiruotė
Z.Rudzikas	04 09 – 04 10	Helsinkis (Suomija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	04 10 – 04 11	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	05 13 – 05 14	Viena (Austrija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	05 28 – 05 30	Briuselis	komandiruotė
A.Tamulis	06 08 – 06 14	Roma (Italija)	komandiruotė
Š.Kriščiukaitis	06 09 – 06 14	Roma (Italija)	komandiruotė
A.Kupliauskienė	06 17 – 06 21	Cluj-Napoca (Rumunija)	komandiruotė
R.Karazija	06 20 – 06 30	Paryžius	komandiruotė
J.Tamulienė	06 28	Brno (Čekija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	06 28 – 06 30	Lindau (Vokietija)	komandiruotė
O.Rancova	07 01 – 07 05	Grace (Austrija)	komandiruotė
R.Juršėnas	07 01 – 07 05	Grace (Austrija)	komandiruotė
G.Gaigalas	07 01 – 07 05	Grace (Austrija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	07 02 – 07 04	Briuselis	komandiruotė
A.Tamulis	07 06 – 07 11	Briuselis	komandiruotė
P.Bogdanovičius	07 09	Varšuva	komandiruotė
Z.Rudzikas	07 09 – 07 10	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	07 13 – 07 15	Halle (Vokietija)	komandiruotė
P.Bogdanovičius	07 19 – 08 03	Hanojus (Vietnamas)	komandiruotė
V.Jonauskas	07 20 – 08 01	Culham (Didžioji Britanija)	komandiruotė
P.Bogdanovičius	08 30 – 09 05	Tokijas (Japonija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	09 02 – 09 03	Briuselis	komandiruotė
A.Tamulis	09 09 – 09 13	Dortmunde (Vokietija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	09 17 – 09 18	Briuselis	komandiruotė
A.Kupliauskienė	09 21 – 09 27	Ryga	komandiruotė

P.Bogdanovičius	10 06 – 10 17	Ryga	komandiruotė
A.Kupliauskienė	10 06 – 10 10	Briuselis	komandiruotė
R.Karpuškienė	10 06 – 10 17	Ryga	komandiruotė
R.Kivilšienė	10 10	Ryga	komandiruotė
Z.Rudzikas	10 20 – 10 22	Ženeva	komandiruotė
Z.Rudzikas	10 23 – 10 24	Briuselis	komandiruotė
Z.Rudzikas	10 26 – 10 31	Pekinas	komandiruotė
S.Kučas	10 28 – 10 30	Minskas	komandiruotė
O.Rancova	10 28 – 10 30	Minskas	komandiruotė
J.Tamulienė	10 28 – 10 30	Minskas	komandiruotė
P.Bogdanovičius	10 29 – 10 31	Minskas	komandiruotė
G.Gaigalas	11 10 – 11 17	ULB (Belgija)	komandiruotė
O.Rancova	11 23 – 11 25	Lionas (Prancūzija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	11 25 – 12 01	Čikaga (JAV)	komandiruotė
R.Kisielius	11 30 – 12 11	Culham (Jungtinė Karalystė)	komandiruotė
Z.Rudzikas	12 04 – 12 05	Briuselis	komandiruotė

**Atomo teorijos skyriaus darbuotojų 2008 m.
sąrašas**

Eil. Nr.	Pavardė, vardas	Pareigos	Užimamas etatas
1	Rudzikas Zenonas	vyriaus.m.d.	0,5, antraeil.
2	Bogdanovičius Pavlas	vyriaus.m.d	
3	Gaigalas Gediminas	vyriaus.m.d	0,5, antraeil.
4	Karazija Romualdas	vyriaus.m.d	
5	Bernotas Andrius	vyr.m.d.	0.25, antraeil.
6	Kisielius Romualdas	vyr.m.d.	
7	Kučas Sigitas	vyr.m.d.	
8	Kupliauskienė Alicija	vyr.m.d.	
9	Merkelis Gintaras	vyr.m.d.	
10	Jonauskas Valdas	vyr.m.d.	
11	Karpuškienė Rasa	vyr.m.d.	
12	Kivilšienė Rasa	vyr.m.d.	
13	Tamulis Arvydas	vyr.m.d.	
14	Tamulienė Jelena	vyr.m.d.	
15	Tutlys Vladas	vyr.m.d.	
16	Kynienė Aušra	m.d.	
17	Momkauskaitė Alina	m.d.	
18	Rancova Olga	j.m.d., doktor.	0,5, nuo 2008.11.15 pilnas
19	Juršėnas Rytis	j.m.d., doktor.	0,5
20	Gaidamauskas Erikas	inž.	0,5
21	Masys Šarūnas	inž.	0,5 nuo 2008.11.04
22	Kriščiukaitis Šarūnas	inž.	0,5, 2008.01.02-0.5.30 ir 2008.06.02-11.28
23	Pivoriūnienė Ingrida	inž.	0,5, 2008.02.07-05.30

ATS darbuotojų publikacijų indėlis 2008 m.

Eil. Nr.	Pavardė, vardas	ISI str.	ISI str. indėlis	ISI str. indėl. AIV (formulė)	Kiti str.	Kitu str. indėl.	Visas*
1	Bogdanovičius Pavlas	3	1.5	2.61			2.61
2	Jonauskas Valdas	4	0.92	2.12			2.12
3	Kupliauskienė Alicija	3	1.17	2.06			2.06
4	Karazija Romualdas	3	1.08	1.65			1.65
5	Tamulis Arvydas	1	1	1	5	2.83	1.57
6	Karpuškienė Rasa	1	0.5	1.39			1.39
7	Tamulienė Jelena	1	0.25	0.85	6	1.57	1.16
8	Kučas Sigitas	2	0.58	0.93			0.93
9	Momkauskaitė Alina	1	0.5	0.72			0.72
10	Rancova Olga	1	0.5	0.72			0.72
11	Gaigalas Gediminas	4	0.27	0.54	2	0.83	0.70
12	Bernotas Andrius	1	0.5	0.5			0.5
13	Tutlys Vladas	1	0.33	0.47			0.47
14	Kynienė Aušra	1	0.25	0.25			0.25
15	Kivilšienė Rasa				1	0.5	0.1
16	Gaidamauskas Erikas				1	0.33	0.06
17	Rudzikas Zenonas						
18	Merkelis Gintaras						
19	Kisielius Romualdas						
20	Juršėnas Rytis						
		18	8.35	15.81 (568 taškai)	13	5.12 (31 taškas)	

$$AIV = \left(\frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left(1 + \frac{IF}{AIF} \right)$$

NI – institucijų skaičius, *NA* – bendra autorių skaičius, *IF* – Impact Factor, *AIF* – Agregate Impact Factor. AIF imamas mažiausias, jeigu žurnalas priklauso kelioms sritims.