

VU TFAI Atomo teorijos skyriaus

2009 m. Ataskaita

2009 m. Skyriuje dirbo 21 darbuotojas: 4 vyriausieji, 11 vyresniųjų, 3 mokslo, 2 jaunesnieji mokslo darbuotojai 1 inžinierius. Jie vykdė 17 projektų: 5 biudžetines temas, 5 tarptautinius ir 7 Lietuvos institucijų remiamus. Jie uždirbo per 300 tūkst. Lt projektuose: EURATOM/LEI – 37636 Lt, JRC Transuraninių elementų – 57280 Lt, Lietuva-Ukraina – 59100 Lt, LitGrid – 65000 Lt, GridTechno – 63000 Lt, COST P19 – 12000 Lt, COST D35 – 13000 Lt. Jie paskelbė spaudoje 27 mokslinius straipsnius: 19 ISI sąrašo žurnaluose, 8 kituose žurnaluose ir leidiniuose. Atspausdintos 35 pranešimų konferencijose tezės bei perskaityti 50 pranešimų konferencijose ir kitose renginiuose. Paskelbti 9 mokslo populiarinimo straipsniai ir perskaityta 20 mokslo populiarinimo paskaitų visuomenei. O.Rancova sėkmingai apgynė daktaro disertaciją ir papildė mokslininkų gretas. Š.Masys įstojo į doktorantūrą.

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: 1 straipsnis ISI sąrašo žurnaluose.

Teoriškai nustatyti kvaziišsigimusių konfigūracijų $4p^5 4d^{N+1}$ ir $4p^6 4d^{N-1} 4f$ maišymosi ypatumai ir šių koreliacinių efektų įtaka emisijos ir Auger spektrams izoelektronėse ir izobranduolinėse sekose. Dėl $4f$ elektrono banginės funkcijos spartaus lokalizacijos kitimo tų konfigūracijų vidutinės energijos izoelektronėje sekoje susikerta du kartus, o šuolių $4f-4d$ linijų stipris kinta nemonotoniškai. Nustatytos labai siauros intensyviausių linijų grupės formavimosi emisijos ir fotosužadinimo spektruose sąlygos. Parodyta, kad emisijos spektro kitimas izoelektronėje sekoje atitinka tris skirtingus tipus. Paaiškintas emisijos ir fotosužadinimo spektrų panašumas.

Atlikti didelės apimties Auger kaskadų ir papildomos jonizacijos dėl jono relaksacijos po elektronų smūgio skaičiavimai pirmiesiems volframo jonams. Gauti rezultatai atskleidžia abiejų procesų bei atskirų sluoksnių indėlius į jonų dvikartinę ir trikartinę jonizaciją elektronų smūgiu. Toliau tirti Kr Auger kaskadų spektrai. Išplėtus reliatyvistinių banginių funkcijų bazę ir apgaubus suskaičiuotas linijas Voigt profiliu, gauti teoriniai spektrai labai gerai derinasi su prancūzų eksperimentatorių išmatuotais.

1.2. “Daugiaelektronių 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 m.d. O. Rancova. Priskiriamų publikacijų skaičius: 4 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Atomo teorijos skyriuje sukurtas dalinio matricų diagonalizavimo metodas buvo lyginamas su naujomis standartinių bibliotekų programomis, tame tarpe ir Davidsonso metodu. Skaičiavimai parodė, kad mūsų naudojamas metodas atomo teorijos uždavinių atveju, kai ieškomų tikrinių verčių skaičius daug tūkstančių kartų mažesnis už matricos eilę, yra ne kiek ne prastesnis už kitus metodus.

Kvazireliatyvistinių Hartrio ir Foko lygčių programos eksploatacija parodė, kad yra daug atvejų, kai iteracinis procesas, naudojamas lygtims spręsti, yra nestabilus arba išvis nekonverguoja. Siekiant patobulinti programą buvo sukurtas naujas universalus potencialas pradinėms

radialiosioms orbitalėms skaičiuoti. Jo naudojimas leidžia gauti gerą iteracinio proceso konvergenciją, esant bet kokioms atomo branduolio krūvio vertėms bei jonizacijos laipsniams.

Kvazireliatyvistiniame artinyje atlikti volframo daugiakrūvių jonų (nuo W^{29+} iki W^{37+}) su besipildančiu 4d-sluoksniu spektrinių charakteristikų skaičiavimai. Palyginimas su grynai reliatyvistinių Dirako ir Foko skaičiavimų rezultatais parodė, kad ATS skyriuje sukurtas kvazireliatyvistinis artinis pakankamai tiksliai aprašo reliatyvistinius efektus netgi tokiuose labai aukšto jonizacijos laipsnio atomuose ir tolimesnis rezultatų tikslinimas yra susijęs su plačių koreliacinių efektų taikymu.

Taip pat kvazireliatyvistiniame artinyje atliktas W II jono ir Zn II jono tyrimas. Atliekant Zn II tyrimą, buvo siekiama nustatyti, kokią įtaką galutiniams rezultatams (energijos lygmenims ir jų gyvavimo trukmėms, bei šuolių charakteristikoms) turi pradinės tiriamos konfigūracijos, kuriai sprendžiamos kvazireliatyvistinės lygtys, pasirinkimas. Buvo toliau tiriamas naujai sukurtas kvazireliatyvistinio artinio efektyvumas ir jo taikymo ribos. Šiam tikslui buvo atlikti Be-sekos jonų ($Z=6, 16, 26, 36$) spektrinių charakteristikų skaičiavimai, o taip pat O-sekos jonų (Z nuo 9 iki 34) spektrinių ir šuolių charakteristikų tyrimai. Siekiant įvertinti kvazireliatyvistinių funkcijų įtaką, visi skaičiavimai atlikti taip pat ir su nereliatyvistinėmis funkcijomis Breito ir Paulio artinyje analogiškai atsižvelgiant į koreliacinius efektus. Skaičiavimų rezultatai palyginti su eksperimentiniais duomenimis.

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: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Išvesta poliarizuotos spinduliuotės rezonansinės sklaidos poliarizuotais elektronais skerspjuvio pati bendriausia išraiška. Ji panaudota surasti skerspjuvio išraiškoms, kai eksperimente registruojamas mažesnis poliarizacijų skaičius. Apskaičiuoti išsklaidytos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai $1s^{-1}nsnp$ rezonansams, kai sklaidoma 3,6 keV, 15 keV ir 36 keV fotonai K ($n=4$), Rb ($n=5$) ir Cs ($n=6$) atomais. Tirtas fluorescencijos po šarminių metalų atomų subvalentinių elektronų sluoksnio jonizacijos elektronais kampinis pasiskirstymas.

Apskaičiuoti Dirako ir Foko artinyje cezio atomo elektronais sužadintų žemiausių autojonizacinių būsenų energijos spektrai ir sužadintimo elektronais skerspjuviai. Eksperimentinio spektro linijoms identifikuoti apskaičiuotos radiacinių šuolių į pagrindinę cezio atomo būseną tikimybės bei autojonizacijos tikimybės. Įvertintas kaskadų iš aukštesnių autojonizacinių būsenų indėlis, kuris rastas nežymus.

Tenzoriškai surištų momentų pavidalu aprašytas atvirų atomo elektronų sluoksnių Rayleigh-Schrödinger teorijos antros eilės efektinis Hamiltonianas jj -ryšyje. Gautos stacionarios atomo trikdžių teorijos antros ir trečios eilės pataisos simbolinio programavimo paketu NCoperators (Mathematica kalba), kurio pagalba kiekviena pataisa atvaizduojama Goldstone'o diagramomis. Pasiūlytas matematinis metodas kaip galima parametrizuoti SU(2) neredukuotino įvaizdžio matricinį elementą vektoriaus, aprašomo dviejose skirtingose koordinatinių sistemose (pasuktose Euler'io kampais viena kitos atžvilgiu), koordinatėmis. To pasekoje aprašytas metodas, kaip galima skaičiuoti tenzorinių operatorių matricinius elementus, kuomet tiesiogiai Wigner-Eckart'o teoremos negalima taikyti.

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

DF artinyje suskaičiuoti magnetiniai dipoliniai šuoliai, vykstantys tarp $4d^N$ konfigūracijų lygmenų, volframo jonuose. Išnagrinėti smūgių stiprumai, gauti nereliatyvistine R_{max} , reliatyvistine DARC ir naudojant reliatyvistinių integralų analogus nereliatyvistinėje programoje. Suskaičiuoti W^{45+} jonui efektyviniai smūgių stiprumai, atitinkantys smūgių stiprumus,

gautus minėtomis programomis. Teoriškai iširta rezonansų įtaka nagrinėtuose šuoliuose. W^{45+} jonui suskaičiuoti efektyviniai smūgių stiprumai, atitinkantys smūgių stiprumus, gautus nereliatyvistine R_{max} , reliatyvistine DARC ir nereliatyvistine programa, kurioje panaudoti reliatyvistinių integralų analogai. Teoriškai iširta rezonansų įtaka nagrinėtuose šuoliuose.

1.5. “Sunkių ir supersunkių cheminių elementų spektrinių charakteristikų tyrimas” (2009 – 2014 m.). Vadovas vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vykdytojai vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, inž. E.Gaidamauskas. Priskiriamų publikacijų skaičius: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2. Finansuojami tarptautiniai projektai.

2.1. Taivanie 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, 2008 08 01-2009 07 31. Visi pinigai gauti 2008 m. Šiais metais buvo tiksliai išleisti, apmokant visus stambius ir smulkius ATS darbuotojų pirkinius.

2009 m. Toliau tęsti poliarizuotos spinduliuotės rezonansinės sklaidos tyrimai, parašyta ataskaita anglų kalba už 2008.08.01 – 2009.07.31 laikotarpį, taip pat ataskaitos lietuvių kalba TPA už 2006.08.01-2009.07.31 ir 2008.08.01 – 2009.07.31 laikotarpius.

2.2. 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, 2009 m., 5450 Eurų ir 18818 Lt.

2009 m. toliau buvo generuojami atominiai parametrai, svarbūs plazmos diagnostikai. Naujas kvazireliatyvistinis artinys taikytas volframo daugiakrūviams jonams nuo W^{+29} iki W^{+37} su atviru 4d elektronų sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje tirti. Įvertintas kaskadų ir relaksacijos efektų vaidmuo po vakansijos sukūrimo elektronų smūgiu W^+ , W^{3+} ir W^{5+} jonuose. Apskaičiuoti sužadinių stipriai W^{45+} jonams, naudojant reliatyvistinę R-matricos metodą bei magnetinių dipolinių šuolių charakteristikos Dirako ir Foko artinyje volframo daugiakrūviams jonams nuo W^{+29} iki W^{+37} . Taip pat kvazireliatyvistinis artinys taikytas W II energijos spektrui ir šuolių charakteristikoms skaičiuoti. Taikant kvazireliatyvistinį artinį atlikti pradiniai W II jono tyrimai, kurie parodė, teoriniai rezultatai savo apimtimi žymiai viršija esamus eksperimentinius duomenis. Atlikti skaičiavimai rodo, kad tikėtiniausių elektrinių dipolinių šuolių bangų ilgiai yra intervale, kuriame atliktų naujausių eksperimentų metu spinduliuotė neregistruojama.

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

TFAI klasteryje „Fobas“ įdiegtos visos programos, reikalingos atomų bei jonų spektrinėms charakteristikoms skaičiuoti Breito ir Paulio bei kvazireliatyvistiniame artinyje. Šio

klasterio naudojimas leido žymiai išplėsti skaičiavimuose naudojamų funkcijų bazes. Dabar vienas skaičiavimas gali trukti dešimt ir daugiau dienų. Gridifikuota kompiuterinė programa atomų jonizacijos skerspjūviams Borno artinyje, atplėštųjų elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos, jono rikiavimo ir elektronais jonizuotų atomų fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrus skaičiuoti. Baigti Co_n ir Co_6O_m ($n=6,8,10,12,14, 16,18$, o $m= 1-9,12$) dalelių geometrinės ir elektroninės struktūros tyrimai. Nustatytos magnetinės ir optinės šių dalelių savybės. Su grido aplinkoje įdiegta VMAS programa atlikti didelės apimties reliatyvistinių banginių funkcijų bazių konfigūracijų tarpusavio sąveikos įvertinimai. Rezultatai panaudoti M1-tipo magentinių šuolių W^{29+} - W^{37+} jonuose tikslesnių charakteristikų skaičiavimui. Paruoštas naujos aplikacijos lankstinukas apie Grid resursų taikyma termobranduolinės sintezės tyrimams.

2.4. Tarptautinis projektas „Supersunkių atomų ir jonų su atominiu numeriu $Z = 122$ spektrinių charakteristikų teorinis tyrimas” (Theoretical studies of spectroscopic properties of super-heavy atoms and ions with atomic number $Z=122$, Service Contract No 211828-11-2008 KAR LT). Vadovas vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vykdytojai: vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, inž. E.Gaidamauskas, 2009 m., 16000 EUR.

Vilniuje sukurtos metodikos išbandytos patiems sunkiausiems cheminiams elementams teoriskai nagrinėti. Rezultatai liudija apie aukštą išplėtotų metodų ir parašytų kompiuterinių programų efektyvumą ir tinkamumą tirti tokius atomus. Daugiakonfiguracinio Hartrio ir Foko metodu teoriškai išnagrinėtas $Z=122$ elemento spektras.

2.5. Pasaulinės mokslininkų sąjungos (World Federation of Scientists) remiamas projektas "Energy corrections computations with algebraic program Mathematica". Vadovas G. Merkelis, vykdytojas R.Juršėnas. Pradėtas 2009 kovo mėn., trukmė vieni metai.

3. Lietuvos fondų ir nevyriausybinų organizacijų finansuojami projektai.

3.1. Lit-Grid projektas. Projekto koordinatore 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, m.d. O.Rancova. *Vykdyto trumė:* 2009 m. liepos mėn. – 2009 m. gruodžio mėn. 2009 m. finansavimas: 65 tūkst. Lt.

Atnaujinti atomas.itpa.lt, spektras.itpa.lt, dangus.itpa.lt ir fobas.itpa.lt host sertifikatai. Kaip ir 2008 m., serveriuose buvo atnaujinama gLite programinė įranga, kai tik atnaujinimai būdavo išleidžiami, ir patvirtinama, kad jie sėkmingai buvo įdiegti kituose klasteriuose. Klasterių SAM testų rezultatai peržiūrimi kiekvieną dieną. Kas savaitę daromos pilnos CE ir SE elementų atsarginės kopijos. Serverių patalpoje įvesta vėdinimo sistema, kuri užtikrina stabilų visų klasterių darbą vasaros laikotarpiu.

Kaip ir praeitais metais, taip ir šiais buvo atliekami intensyvūs skaičiavimai naudojant programas įdiegtas grid aplinkoje. Įdiegtų programų sąrašas yra pateiktas 2008 m. ataskaitoje. Šiais metais grid'o paslaugomis naudojosi net 18 instituto darbuotojų. Tiriamieji darbai atliekami 7 skirtingose tematikose. Šiais metais papildomai buvo gridifikuota ir pradėta naudoti kvantinės chemijos programa Demon. Vykdam darbus susijusius su grido aplinkos panaudojimu atominais skaičiavimams, buvo sukurta metodika, leidžianti efektyviai įvertinti konfigūracijų maišymosi stiprumus ir atrinkti konfigūracijas, turinčias didžiausią įtaką rezultatų tikslinimui. Šiais metais programos buvo modifikuotos, panaudojant lygiagretaus programavimo metodus.

Paruoštos Mechanikos ir optikos laboratorinių darbų atmintinės VPU studentams yra įdiegtos SIG aplinkoje. Šis portalas sėkmingai naudojamas mokymo procese. Be to, su VU pagalba, SIG aplinkos portalo teikiamos paslaugos buvo panaudotos Tarptautinės NDTCS konferencijos

darbe. Buvo sukurtas šios konferencijos tinklalapis, vykdoma dalyvių registracija, bendravimas su jais. Šio portalo paslaugomis iki šiol naudojasi minėtos konferencijos organizacinis komitetas ruošiant konferencijos darbų leidinį. Tarpininkauta, kad Lietuvos fizikų draugijos tinklalapis būtų perkeltas į grid'ą.

Šias metais aplankyta keletas vidurinių mokyklų, kuriose moksleiviams buvo papasakota apie LitGrid ir jo vystymo perspektyvas. Kartu su KTU paruošėm informatikos mokytojų mokymo programą, kurios tikslas IT mokytojams suteikti žinių: apie GRID'ą, jo panaudojimo galimybes, kaip susikurti ir naudotis virtualiomis mašinomis (VM); apie Unix OS, reikalingų darbui GRID tinkle; apie virtualias organizacijas bei jų privalumus mokymosi procese. Šiuo metu ši programa yra ruošiamą akreditacijai. LitGrid projekto dalyviai dalyvavo support@litgrid.lt veikloje, lankė LitGrid seminarus, kuriuos organizavo VU MIF darbuotojai, konsultavo partnerius.

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, m.d. O. Rancova, vyriaus.m.d. G. Tautvaišienė. *Vykdyto trukmė:* Nuo 2009-05 iki 2009-12-30. 2009 metų finansavimas: 63 tūkst.

Nustatyti Co atomų osciliatorių stiprumai, kurie yra naudojami astrofizikinių spektrų tyrimuose. Sugeneruota išplėstinė reliatyvistinių banginių funkcijų bazė, įtraukiant vienelektronius ir dvielektronius sužadinius. Pasirinktom konfigūracijų porom suskaičiuoti sąveikos stiprumai ir atrinktos stipriausiai sąveikaujančios konfigūracijos. Rezultatai bus naudojami konstruojant banginių funkcijų bazes įvairių Co junginių tyrimui. Sukurta programa MOLRADCAS, skirta įvertinti radiacinių kaskadų procesus molekulėse. Nustatytos dvi padėtys dendrimere, kur galėtų išsidėstyti Co nanodalelė. Pastebėta, kad Co₆ nanodalelės geometrinė struktūra pakinta tuo atveju, kai ji yra periferinėje dendrimero dalyje. Centrinėje dendrimero dalyje, kur deguonies atomų mažai, esančios dalelės forma išlieka beveik nepakitusi. Rasta, kad visų dalelių matomos srities spektruose yra plati ir intensyvi juosta, kuri atsiranda dėl antros laidumo juostos sužadavimo. Šios linijos viršūnės padėtis ir plotis priklauso nuo deguonies atomų skaičiaus Co₆ dalelėje.

Pirminiai tyrimai parodė, kad emisiniai spektrai, gauti vykstant radiacinio kaskado procesams, papildytų Co nanodalelių esančių tarp dendrimero šakų tyrimus ir patvirtintų rezultatus gautus tiriant absorbcinius šių darinių spektrus. Detaliai ištirta kobalto gausa 23-ose Galaktikos lauko ir 8-ose padrikųjų spiečių NGC 6163 ir IC 6451 žvaigždėse, modeliuojant labai didelės skiriamosios gebos sintetinių žvaigždžių spektrų serijas ties 74-iom optinio ruožo spektrinėm linijom. Parengta atnaujinta kobalto atominių duomenų bazė, kurią naudojant Co gausa Saulės optiniame spektre nustatoma tiksliau. Naudojant Cowan'o programą atlikta Co spektrinių linijų, spinduliuojamų 1000-8000 Angstromų srityje, analizė. Patikslintus Co linijų osciliatorių stiprumus mūsų instituto astronomai panaudojo Co gausos žvaigždėse nustatymui. Sugeneruota išplėstinė neutralaus Co funkcijų bazė, kuri bus panaudojama tolimesniems tyrimams.

3.3. Lietuvos valstybinio Mokslo ir studijų fondo projektas „Elektronais sužadintų sudėtingų atomų ir molekulių eksperimentinis ir teorinis tyrimas“ (Prašymo registracijos Nr. V090003, Sutarties Nr. V-20/2009). Vadovė vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vykdytojai vyr.m.d. J.Tamulienė, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Jonauskas, m.d. O.Rancova, j.m.d. R.Juršėnas. Sutarties terminai 2009 m. kovo – gruodžio mėn. Gautas finansavimas – 53 000 Lt.

Cezio atomo autojonizacinių energijos lygmenų vertės ir radiacinių šuolių tikimybės apskaičiuotos dviem metodais: kvazireliatyvistiniu ir reliatyvistiniu Dirako ir Foko. Skaičiavimo rezultatai panaudoti pirmą kartą išmatuoto cezio 5p⁶ elektronų sluoksnio autojonizacijos skerspjūvio nuo 12,3 iki 16,6 eV energijų intervale ypatingumams paaiškinti.

Autojonizacijos skerspjūvis turi ryškų rezonansą, kurio maksimumas yra ties 14,7 eV ir lygus $4.8 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Įvertintas jo indėlis pilnutiniame cezio jonizacijos elektronais skerspjūvyje.

Ištirtas dalinio matricų diagonalizavimo metodo, realizuoto VU TFAI kompiuterinėje programoje, efektyvumas. Palyginus diagonalizavimo trukmes ir diagonalizuojamų matricų eiles su analogiškais PAPAC ir PRIMME bibliotekų proramomis nustatyta, kad projekto dalyvių naudojama programa yra efektyvesnė. Išvestos atomo antros eilės efektinio hamiltoniano bendrosios išraiškos atsiviriems elektronų sluoksniams jį ryšyje.

Ištirtos trys galimos POPOP molekulės struktūros ir įvertinti jų sklaidos skerspjūviai vykstant sekančiai reakcijai: $e + \text{POPOP} = \text{POPO}^-$ (neigiamas jonas). Nustatyti Vis-UV ir vibraciniai spektrai. Apskaičiuota vienos iš struktūrų įvairių fragmentų energijos ir nustatyta, kokios fragmentacijos reakcijos galėtų vykti kai ši molekulė sąveikauja su elektronu. Nustatyta uracilo geometrinė struktūra. Įvertintas sklaidos skerspjūvis bei Vis-UV ir vibraciniai spektrai.

3.4. COST P19 projektas. Projekto koordinatorė: vyr.m.d. J. Tamulienė, vykdymo trukmė: 2009 m., finansavimas: 12 tūkst. Lt.

Nustatyta, kad kobalto oksido dalelių magnetinės savybės priklauso nuo to, kiek dalelėje yra Co-Co jungčių sudarytų iš ardančių orbitalių ir Co atomų oksidacijos laipsnio. Be to 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 kurio nekompensuoja jono sukinyš. Co_6 nanodalelė bus labiau ardoma tuo atveju, jei ji pateks tarp dendrimero šakų. Remiantis tyrimų rezultatais, galima prielaida, kad tiriant PPI dendrimerus į kuriuos yra įterptos Co nanodalelės, dalelės spektro linijos bus stebimos tik IR srityje ir mikrobangų diapazone, o UV ir Vis srityje bus stebimas tik dendrimero spektras. Atlikti tyrimai parodė, kad Co nanodalelės vandenyje turėtų būti išardomos, o susidarę Co jonai deprotonuos vandens molekulės ko pasekoje susidaro koordinaciniai kobalto junginiai. Tikėtina, kad 310 ir 340 K temperatūroje deprotonacijos procesas vyks sparčiau. Be to, kas sudarys Co koordinacinius junginius (kas bus šio komplekso ligandai) priklauso nuo to, koks yra vandens ir Co atomų santykis.

3.5. COST D35 projektas “Nuo molekulių iki molekulinų prietaisų: elektroninių, fotoninių, magnetinių ir spintroninių vyksmų kontroliavimas“ tęsėsi 2009 metais. Atsakingas vykdytojas vyr.m.d. A. Tamulis, vykdytojas VU FF magistrantas Mantas Grigalavičius. Finansavimas už visą laikotarpį buvo 13000.0 Litų.

Atlikti dirbtinių besidauginančių ląstelių, susidedančių iš squarino ir $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ sensibilizatorių bei riebalinių rūgščių, prekursorių (maisto) bei vandens molekulių (apie 2000 atomų), tikslūs tankio funkcionalo teorijos kvantmechaniai savi-susidarymo modeliavimai, naudojant nekanoninę nukleotidą 8-oxo-guaniną, kuris efektingai relaksuoja fotosintetinę sistemą po sužadavimo šviesa. Dar vienas svarbus šių metų darbas, suprantant, kaip atsirado ir evoliucinavo pirminė gyvybė, buvo atliktas instaliuojant kelių rūšių nukleotidų molekules ir jų sekas, kurios leidžia evoliuciškai išlikti pirminėms ląstelėms su tam tikra genetinė nukleotidų seka, o tai savo ruožtu nulėmė genomo atsiradimą pirmųjų baltymų sitezei.

3.6. ES remiamas struktūrinių fondų projektas „**Studentų mokslinė praktika**“. Dalyvavo vyriaus.m.d. G.Gaigalas (1 studentas).

Atlikti Eka – Torio energetinio spektro skaičiavimai vienkonfiguraciniu Hartrio – Foko, daugiakonfiguraciniu Hartrio – Foko ir daugiakonfiguraciniu Dirako – Foko metodais. Gauti rezultatai palyginti su kitais metodais gautais rezultatais.

3.7. Tarptautinių technologijų plėtros agentūros remtas projektas mobilumui su Ukraina „Elektronais sužadintų sudėtingų atomų ir molekulių eksperimentinis ir teorinis tyrimas“, Vadovė vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vykdytojai vyr.m.d. J.Tamulienė, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Jonauskas, m.d. O.Rancova, j.m.d. R.Juršėnas. Sutarties terminai 2009 m. kovo – gruodžio mėn. Gautas finansavimas – 6100 Lt.

Pas partnerius Užgorode Elektronų fizikos institute lankėsi dr. A.Kupliauskienė ir dr. J.Tamulienė. Iš Ukrainos buvo atvykę į VU TFAI dr. A.Borovik ir dr. J.Kontrosh. Projekto vykdymo eigai ir gautiems rezultatams aptarti organizuoti du seminarai: vienas Elektronų fizikos institute Užgorode (Ukraina, 2009 spalio 8 d) ir vienas VU Teorinės fizikos ir astronomijos institute Vilniuje (Lietuva). Elektronų fizikos instituto seminare perskaityti šie pranešimai:

- J. Tamulienė, “Kvantmechaniniai tyrimai VU TFAI”.
- Kupliauskienė, “Atomo teorijos plėtojimas ir procesų tyrimai VU TFAI”.

Seminare dalyvavo beveik visi Elektronų fizikos instituto darbuotojai. A.Kupliauskienė ir J.Tamulienė buvo pirmieji užsienio mokslininkai, viešėję institute po 1992 m, todėl sulaukė daug dėmesio. Su institutu ir jo veikla supažindino pats instituto direktorius Ukrainos mokslų akademijos akademikas dr. Otto Shpenik.

VU Teorinės fizikos ir astronomijos instituto seminare (Vilnius, 2009 spalio 21 d.) padaryti šie pranešimai:

- A.Borovik “Šarminių metalų atomų sužadinimas elektronais iš išorinio užpildyto sluoksnio”.
- J.Kontrosh “Elektronų susidūrimai su atomais (molekulėmis): sužadinimas, jonizacija, autojonizacija”.

4. Kiti svarbūs moksliniai rezultatai.

Bendrame su JAV LANL „Protocell Assembly“ projekto mokslininkais darbe A.Tamulis rado papildomas galimybes, kaip reguliuoti dirbtinių gyvių nekontroliuojamą mitybą, augimą bei dauginimąsi, įvedus molekulinės spintronikos loginius įtaisus, ir išjungiant išorinį magnetinį lauką arba pakeičiant jo kryptį, kai dirbtinių gyvių tolimesnis dauginimasis tampa nenaudingas.

5. Organizuoti moksliniai renginiai

Rugsėjo 11 d. surengti eiliniai prof. A.Jucio skaitymai. J.Tamulienė organizavo tarptautinę 13-oji NDTCS konferenciją. O.Rancova ir R.Kisielius dalyvavo organizuojant ir pravedant BalticGrid projekto vasaros mokyklą Molėtų astronomijos observatorijoje šių metų birželio 29 – liepos 3 dienomis. O.Rancova dalyvavo organizuojant Nacionalinę astronomijos konferenciją Molėtų astronomijos observatorijoje šių metų gruodžio 12 dieną. A.Tamulis kartu su Prof. Arūnu Ramanavičiumi iš VU ChF NANOTECHNAS laboratorijos 2009 spalio 1 d. organizavo jungtinį COSTveiklų seminarą "Nano biotechnologijos kvantiniame molekuliname lygje".

2010m. rugsėjo 21-24 dienomis Vilniuje bus surengta 7-ta Tarptautinė konferencija ICAMDATA2010. Skyriaus darbuotojai jau pradėjo parengiamuosius darbus. Z.Rudzikas yra kitos tarptautinės konferencijos HCI2010 Programos komiteto narys, jau dalyvavo atrenkant kviestinius pranešėjus.

6. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas

2009 m. įvyko 32 ATS seminarai (pernai 24) Atomo teorijos seminaro užsiėmimai, iš jų pirmasis (sausio 7 d. ataskaitinis už 2008 m.) Šių metų ataskaitinis yra 33-iasis. Seminaruose svarstyti 8 straipsniai, taip pat svarstytos tezės įvairioms konferencijoms (4 seminarai). Išklaustyti 2 mokslininkų iš Ukrainos ir 1 iš Lenkijos paskaitos bei R. Karazijos ir V. Tutlio apžvalginiai pranešimai. Išklaudyta ataskaitų už įvairias komandiruotes (5 seminarai). Svarstytos O. Rancovos, V. Jonausko ir Š. Masio ataskaitos už atestacinius laikotarpius bei Š. Masio priėmimas į doktorantūrą ir doktorantūros studijų planas. Metų pradžioje apsvarstyti planuojami darbai visose biudžetinėse temose, metų pabaigoje – atlikti darbai.

Darbuotojai ATS seminarus lankė gerai. Kaip ir priklauso, nė vieno seminaro nepraleido skyriaus vadovė A.Kupliauskienė ir seminaro sekretorė R.Karpuškienė. Mažiausiai seminarų praleido: R.Karazija, R.Juršėnas (po 2), Š.Masys (4), P.Bogdanovičius, R.Kisielius ir A.Momkauskaitė (po 5). Mažiausiai seminarų aplankė: A.Tamulis (2), R.Kivilšienė (6), A.Bernotas (7), Z.Rudzikas (8).

R.Kisielius dalyvavo BalticGrid mokykloje Molėtų AO; dalyvavau ADAS-EU mokymo kursuose IPP Garching (Vokietija).

O.Rancova dalyvavo ITER tarptautinėje vasaros mokykloje „Plazma Surface Interactions in Fusion Devices“ šių metų birželio 22 – 26 dienomis Aix-en-Provence, Prancūzija. Gavo sertifikatą. Ji taip pat dalyvavo BalticGrid-II vasaros mokykloje šių metų birželio 29 – liepos 3 dienomis Molėtų astronomijos observatorijoje. Gavo sertifikatą.

O.Rancova dalyvavo Lietuvos mokslo tarybos paskelbtame konkurse „Podoktorantūros (post doc) stažučių įgyvendinimas Lietuvoje“ pagal ES Struktūrinių fondų Žmogiškųjų išteklių plėtros veiksmų programos Mokslininkų ir kitų tyrėjų mobilumo ir studentų mokslinių darbų skatinimo priemonę (VP1-3.1-ŠMM-01) ir laimėjo dviejų metų trukmės stažuotę VU Fizikos fakultete.

Kaune VDU Botanikos sode lapkričio 20 dieną O.Rancova ir J.Tamulienė dalyvavo mokslo komunikacijos seminare mokslininkams ir žurnalistams „Mokslo populiarinimas: kaip bendrauti su žiniasklaida?“.

7. Pedagoginė veikla

Ataskaitoje bus paminėta tikta ta pedagoginė veikla, kuri atlikta darbuotojo, dirbančio institute pagrindinėse pareigose, ir už ją nebuvo mokama kitose institucijose.

P.Bogdanovičius vadovavo doktorantei O.Rancovai, kuri 2009 m. sausio 8 d. sėkmingai apgynė disertaciją, bei ŠU magistrantės I. Bolskytės magistriniam darbui, VU FF III k. studentui A. Rinkevičiui, FF III k. studentui A. Štikonui, VU FF II k. studentui L. Krasauskui. Jis sausio mėn skaitė. 4 val. kursą moksleiviams “FO” mokykloje, balandžio mėn. – 4 val. kursą moksleiviams “FO” mokykloje, birželio mėn. – 4 val. kursą moksleiviams “FO” mokykloje, spalio mėn. – 6 val. kursą moksleiviams “FO” mokykloje. Visus mokslo metus dirbo su kandidatais į Lietuvos komandą TFO.

A.Tamulis vadovavo Manto Grigalavičiaus (VU FF), Vidmanto Feizos (VU GMF), Martyno Misevičiaus (CHF) bakalauro baigiamiesiems darbams. R.Karpuškienė vadovavo VPU magistrantės R. Grybaitės baigiamajam darbui. V.Jonauskas vadovavo VU magistranto Š. Masio magistro baigiamajam darbui. Rancova vadovavo VPU Fizikos ir technologijos fakulteto IV kurso studento Arno Juškėno kursiniam darbui. J.Tamulienė vadovavo A. Šliogerio (VPU) bakalauroiniam darbui bei S. Kulikauskaitės ir L. Kniezytės magistriniams darbams.

G.Merkelis yra doktoranto R.Juršėno, o V.Jonauskas – doktoranto Š.Masio vadovai.

8. Dalyvavimas leidybinėje veikloje

R.Kivilšienė ir O.Rancova ruošė ir organizavo Lietuvos fizikos žurnalo mokslo populiarinimo priedo „Fizikų žinios“ Nr. 36 ir 37 išleidimą. R.Karazija ir A.Bernotas leido „Lietuvos fizikos žurnalą“. Tamuliene NDTCS konferencijos pranešimų medžiagos redkolegijos narys. R.Kivilšienė rengė leidinį apie VU TFAI, kuris turėtų būti paskelbtas kitais metais.

9. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje.

Šiais metais pusė skyriaus darbuotojai labai aktyviai dalyvavo šioje veikloje.

P.Bogdanovičius recenzavo du straipsnius užsienio žurnalams, buvo Fizikų draugijos Valdybos, VU TFAI tarybos narys ir VU TFAI Finansų ir revizijos komisijos pirmininkas, Planetariumo tarybos narys. Kaip visada dirbo organizuojant Lietuvos moksleivių fizikos olimpiadą bei čempionatą, vadovavo Lietuvos komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje.

R.Karazija buvo „Lietuvos fizikos žurnalo“ vyr. redaktorius, MA Matematikos, fizikos ir chemijos skyriaus biuro narys, Visuotinės lietuvių enciklopedijos konsultantas (fizikos istorija), 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 Švedijoje), 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.

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

A.Kupliauskienė buvo ATS vadovė, Valstybinio mokslo ir studijų fondo ekspertė, Europos Komisijos projektų vertinimo ekspertė, Asociacijos „BASNET forumas“ valdybos pirminkė, vedė ATS 2009 m. publikacijų apskaitą, surinko ir įrišo ATS 2008 m. publikacijų atspaudus.

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

O.Rancova yra „Fizikų žinių“ žurnalo projekto koordinatorė ir redkolegijos narė.

Z.Rudzikas buvo Europos Mokslo Tarybos Specializuotos Tarybos PE2 narys, įvertinęs 32 jaunųjų mokslininkų paraiškas, VPU Tarybos pirmininkas, pusę metų buvo Lietuvos mokslo tarybos Valdybos narys. Jis yra Pasaulio Mokslininkų Federacijos narys, Lietuvos atstovas (delegatas) joje, jos Kibernetinio saugumo nuolatinės stebėsenos Tarybos narys; Ettore Majorana Fondo ir Mokslinės Kultūros Centro Mokslinio Komiteto narys, EFDA Lietuvos asociacijos Tarybos narys. Z.Rudzikas LR Premjero pavedimu dirbo jo sudarytoje darbo grupėje, kuri parengė rekomendacijas dėl aktyvesnio pilietinės visuomenės dalyvavimo priimant politinius sprendimus ir vadovavo kitai Premjero sudarytai darbo grupei, kuri parengė Įstatymo projektą įkurti Lietuvos nacionalinę ekonomikos ir visuomenės reikalų tarybą bei Jį lydintį Aiškinamąjį raštą.

J.Tamulienė buvo LMS valdybos narė, LFD išdininkė, VU TFAI profesinės sąjungos pirmininkė.

G.Merkelis buvo studijų katedros vedėjas, atlyginimų koeficientų nustatymo komisijos narys, doktorantūros komisijos pirmininkas, instituto materialinio skatinimo komisijos narys.

10. Mokslo žiniasklaida

Skyriaus darbuotojai atspausdino 9 mokslo populiarinimo straipsnius, perskaitė 20 paskaitų, septynis kartus kalbėjo per radiją, keletą kartų per televiziją, kartu su KTU išvertė animacinių filmukų rinkinį, kuriame aiškinama, kas yra grid'as, kaip tapti grid'o naudotoju, kam grid'as yra reikalingas ir t.t. Šie filmukai naudojami susitikimų su moksleiviais metu ir yra pateikti VU jų patalpinimui į LitGrid tinklalapį.

Labiausiai pasižymėjo: O.Rancova –10 paskaitų, R.Karazija – 6 paskaitos ir vienas straipsnis, P.Bogdanovičius – 2 paskaitos ir 2 straipsniai, G. Gaigalas – 3 straipsniai. Z.Rudzikas daug kartų mokslo klausimais kalbėjo Europos ekonomikos ir socialinių reikalų komiteto įvairių posėdžių metu. Šešis kartus kalbėjo mokslo klausimais per radiją, keletą kartų – per TV.

11. Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai

Skyriaus darbuotojai buvo išvykę į užsienį 49 kartus (išvykų sąrašas pridedamas). Daugiausia keliavo Z.Rudzikas – 20 kartų, iš jų 19 - į Briuselį.

Paminėtina P.Bogdanovičiaus kelionės į Melburną (Australija) ir Meksiką. Kiti keliavo į Europos šalis po vieną-du kartus. Tik P.Bogdanovičius, G.Gaigalas ir A.Kupliauskienė buvo išvykę po 3 kartus, J.Tamulienė – 8 kartus, O.Rancova – 4 kartus. S.Kučas, G.Merkelis, R.Karpuškienė, V.Tutlys, Š.Masys ir E.Gaidamauskas nebuvo išvykę visai.

12. Darbuotojų kvalifikacijos, pareigų ir skaičiaus pasikeitimai.

2009 m. skyriuje nuolat dirbo 21 darbuotojas (sąrašas pridedamas): 4 vyriausieji mokslo darbuotojai (iš jų 1 po pusę etato antraeilėse pareigose), 11 vyresniųjų mokslo darbuotojų (iš jų 1 antraeilėse pareigose ketvirčiu etato), 3 mokslo darbuotojai, 2 jaunesnieji mokslo darbuotojai (po pusę etato) ir 1 inžinierius pusę etato. Kurį laiką laikinai buvo įdarbintas inž. M.Grigalavičius.

O.Rancova sėkmingai apgynė daktaro disertaciją ir nuo gegužės 4 d. užėmė mokslo darbuotojos etatą, tačiau nuo spalio 1 d. buvo pervesta pusei etato antraeilėse pareigose, nes laimėjo konkursą podoktorantūrinei stažuotei Vilniaus universitete. V.Jonauskas buvo peratestuotas vyr.m.d. pareigoms naujai kadencijai. Z.Rudzikas nuo gegužės 4 d. pradėjo dirbti pilnu etatu. A.Kynienė išėjo ilgalaikių kūdikio priežiūros atostogų.

13. Įsigyti nauji įrenginiai, kompiuteriai ir kiti prietaisai.

2009 m. skyriaus darbuotojams už Taiwan-Baltic projekto pinigus buvo nupirkta 5 nešiojami (Z.Rudzikui, P.Bogdanovičiui, R.Juršėnui, Š.Masiui ir R.Kivilšienei) ir 2 stacionarūs (A.Kupliauskienei ir O.Rancovai) kompiuteriai, 3 tinklo komutatoriai, 2 spausdintuvai, 3 išoriniai keitieji diskai, ir daug smulkių daiktų ar detalių pakeitimui. P.Bogdanovičius už anksčiau uždirbtus pinigus pirko spalvotą lazerinį spausdintuvą. A.Tamulis nusipirko naują aštuonių procesorių serverį iš Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros paramos COST D35 veiklai.

Šiais metais iš projektų lėšų buvo nupirkta programinės įrangos: 2 vienetai grafikų braižymo programos Origin 8.1, programų paketas CRYSTAL 06 kristalų tyrimui kvantinės chemijos metodais, 6 vienetai antivirusinės programos Kaspersky, 5 kompiuteriamas Ms Windows

ir MsOffice programų paketai, Intel Fortran kompiliatorius, Crystal Maker paketas. Prisidėjome prie WebMathematica programų paketo, kurį pirko V.Gontis, įsigijimo.

14. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai.

Z.Rudzikas laiko, kad reikėtų padiskutuoti dėl instituto strategijos ir taktikos pasikeitusiomis darbo ir finansavimo sąlygomis. Bogdanovičius norėtų turimą kompiuterinę kėdę pakeisti į patogią. Kisielius pageidauja leisti dirbti savaitgaliais instituto patalpose po 17 val. A.Tamulis siūlo visiškai atsisakyti vartoti rūkalus ir alkoholinius gėrimus instito patalpose bei laiptinėse.

15. Mokslinė produkcija.

2008 metus galima laikyti derlingais. Atspausdinta 18 straipsnių ISI sąrašo žurnaluose, t.y. po vieną skyriaus mokslo darbuotojui, ir 9 straipsniai kituose leidiniuose. 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.

Nuo 2008 m. 40% biudžetinio finansavimo perskitoma tarp universitetų ir institutų, atsižvelgiant į mokslinę produkciją ir projektuose uždirbtus pinigus. Vertinant instituto mokslinę produkciją tarp institucijų Lietuvos mastu, A kategorijos, t.y. ISI sąrašo žurnaluose straipsnių, kurių IF didesnis už 20% nuo AIF, indėlis AIV nuo 2008 m. apskaičiuojamas pagal formulę

$$AIV = \left(\frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left(1 + 3 \frac{IF}{AIF} \right),$$

kur NI – institucijų skaičius, NA – bendraautorių skaičius, IF – Impact Factor, AIF – Agregate Impact Factor. Po to apskaičiuojami taškai AIV padauginus iš 30. Jeigu ISI sąrašo žurnalo IF mažesnis už 20% nuo AIF, tokio straipsnio taškai nepridedami. Jis perkeliamas į kitų publikacijų kategoriją B. Jų indėlis negali būti didesnis už 20% A kategorijos. Priede yra lentelė, kurioje pateikiamas ATS darbuotojų mokslinės produkcijos indėlis, apskaičiuotas pagal ŠMM rekomendacijas. Taigi skyriaus darbuotojai turėtų atnešti institutui apie 1400 taškų.

Visų publikacijų sąrašai pridedami.

UŽSIENIO KOMANDIRUOTĖS 2009 m.
ATS

Z.Rudzikas	sausis-lapkritis	Briuselis	19 komandiruočių
G.Gaigalas	01 07 – 01 16	Malmė (Švedija)	komandiruotė
G.Gaigalas	02 15 – 02 21	Malmė (Švedija)	komandiruotė
J.Tamulienė	03 25 – 03 27	Debrecenas (Vengrija)	komandiruotė
J.Tamulienė	03 29 – 04 02	Barselona (Ispanija)	komandiruotė
J.Tamulienė	05 06 – 06 08	Oulu (Suomija)	komandiruotė
J.Tamulienė	05 12 – 05 14	Ryga (Latvija)	komandiruotė
O.Rancova	05 12 – 05 14	Ryga (Latvija)	komandiruotė
A.Kupliauskienė	05 13 – 05 15	Praha (Čekija)	komandiruotė
O.Rancova	06 22 – 06 26	Aix-en-Provence (Prancūzija)	komandiruotė
R.Karazija	07 06 – 07 12	Gdanskas (Lenkija)	komandiruotė
A.Momkauskaitė	07 06 – 07 12	Gdanskas (Lenkija)	komandiruotė
A.Kupliauskienė	07 06 – 07 12	Gdanskas (Lenkija)	komandiruotė
O.Rancova	07 06 – 07 12	Gdanskas (Lenkija)	komandiruotė
R.Juršėnas	07 06 – 07 12	Gdanskas (Lenkija)	komandiruotė
P.Bogdanovičius	07 11 – 07 22	Meksika	komandiruotė
A.Kupliauskienė	08 28 – 09 03	Ryga (Latvija)	komandiruotė
R.Kivilšienė	09 02 – 09 05	Insbrukas (austrija)	komandiruotė
P.Bogdanovičius	09 19 – 09 28	Melburnas (Australija)	komandiruotė
J.Tamulienė	09 17 – 09 19	Varšuva (Lenkija)	komandiruotė
O.Rancova	09 21 – 09 25	Barselona (Ispanija)	komandiruotė
J.Tamulienė	09 29 – 10 04	Rhodes (Graikija)	komandiruotė
J.Tamulienė	10 05 – 10 07	Užgorodas (Ukraina)	komandiruotė
A.Kupliauskienė	10 04 – 10 07	Užgorodas (Ukraina)	komandiruotė
R.Kisielius	10 04 – 10 17	Tegernsee, Garchingas(Vokietija)	komandiruotė
Z.Rudzikas	10 04 – 10 07	Tegernsee (Vokietija)	komandiruotė
J.Tamulienė	10 25 – 10 27	Ischia (Italija)	komandiruotė
P.Bogdanovičius	10 29 – 10 24	Lundas (Švedija)	komandiruotė
G.Gaigalas	12 14 – 12 19	Malmė (Švedija)	komandiruotė
A.Tamulis	11 22 – 11 29	Stocholmas (Švedija)	komandiruotė
J.Tamulienė	12 08 – 12 11	Poznanė (Lenkija)	komandiruotė
O.Rancova	12 08 – 12 11	Poznanė (Lenkija)	komandiruotė

**Atomo teorijos skyriaus darbuotojų 2009m.
sąrašas**

Eil. Nr.	Pavardė, vardas	Pareigos	Užimamas etatas
1	Rudzikas Zenonas	vyriaus.m.d.	nuo 2009-05-04 pilnas
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. m.d.	nuo 2009-05-04, nuo 2009.10.01– 0,5, antraeilės
19	Juršėnas Rytis	j.m.d., doktor.	0,5
20	Gaidamauskas Erikas	inž.	0,5
21	Masys Šarūnas	inž. j.m.d., doktor.	0,5 nuo 2009-06-15 iki konk. nuo 2009-10-01
22	Mantas Grigaravičius	inž.	0,5, 2008.01.02-0.5.30 ir 2008.06.02-11.28

ATS darbuotojų publikacijų indėlis, apskaičiuotas pagal Švietimo ir mokslo ministerijos taisykles 2009 m.

Pavardė, vardas	ISI str.	indėlis	AIV	Kiti str.	Kitų str. indėl.	AIV+0.2 kitų str. ind.
Kupliauskienė Alicija	3	2.00	9.38			9.38
Gaigalas Gediminas	5	1.22	5.81			5.81
Gaidamauskas Erikas	3	0.60	4.71			4.71
Bogdanovičius Pavlas	2	0.75	4.39	2	0.66	4.52
Karpuškienė Rasa	2	0.75	4.25	1	0.33	4.32
Rudzikas Zenonas	2	0.40	3.47	1	1.00	3.67
Kisielius Romualdas	1	0.25	2.46			2.46
Tutlys Vladas	1	0.50	2.17			2.17
Tamulienė Jelena	1	0.25	1.65	4	1.25	1.90
Merkelis Gintaras	1	0.50	1.71	1	0.50	1.81
Juršėnas Rytis	1	0.50	1.71	1	0.50	1.81
Rancova Olga	1	0.33	1.09	1	0.33	1.16
Karazija Romualdas	1	0.25	1.01	1	0.33	1.08
Jonauskas Valdas	1	0.25	1.01	1	0.33	1.08
Kučas Sigitas	1	0.25	1.01	1	0.33	1.08
Momkauskaitė Alina	1	0.25	1.01			1.01
Bernotas Andrius				2	0.83	0.17
Tamulis Arvydas						
Kynienė Aušra						
Kivilšienė Rasa						
			46.84			48.13

$$AIV = \left(\frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left(1 + 3 \frac{IF}{AIF} \right)$$

NI – institucijų skaičius

NA – bendraautorių skaičius

IF – Impact Factor

AIF – Agregate Impact Factor