

# VU TFAI Atomo teorijos skyriaus

## 2011 m. Ataskaita

2011 m. gruodžio 22 d. skyriuje dirbo 18 darbuotojų: 4 vyriausieji, 10 vyresniųjų, 3 mokslo, 1 jaunesnysis mokslo darbuotojas ir 1 inžinierius. Jie vykdė 10 projektų (4 biudžetines temas, 2 FP7, 2 Lietuvos institucijų remiamus ir 2 tarptautinius, kurie pinigų institutui neatnešė) ir uždirbo per 153 tūkst. Lt (EURATOM/LEI – 63300 Lt, mokslininkų grupės projektas – 89900 Lt) . Paskelbta spaudoje 20 mokslinių straipsniai: 17 ISI sąrašo žurnaluose, 3 kituose žurnaluose ir leidiniuose. Atspausdintos 30 pranešimų konferencijose tezių bei perskaityti ar pristatyti 36 pranešimai konferencijose ir kituose renginiuose. Paskelbti 5 mokslo populiarinimo straipsniai, perskaityta 16 mokslo populiarinimo paskaitų visuomenei.

### 1.VU TFAI Tarybos patvirtintos biudžetinės temos.

**1.1. „Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams. Teorija ir interpretavimas“** (2005 09-2011 12). Vadovas: vyriaus. m. d. R.Karazija, vykdytojai: vyr. m. d. V.Jonauskas, vyr.m.d. S.Kučas, m.d. A.Momkauskaitė. Priskiriamų publikacijų skaičius: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Atsižvelgiant į koreliacinius ir reliatyvistinius efektus teoriškai ištirtas sudėtingas Ožė šuolių kaskadas, vykstantis kriptono atome po vakansijos susidarymo 3p elektronų sluoksnyje. Suskaičiuotos jonų išėigos labai gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis. Patikslinta eksperimentiškai matuotų pirmosios pakopos metu susidarančių Ožė spektrų interpretacija. Gauti įvairių pakopų kol kas eksperimentiškai nematuoti Auger spektrai, kuriuos numatoma panaudoti vykdant kaskado metu susidarančių spektrų tyrimus daugiaelektronės spektroskopijos metodu.

Kaskadų atomuose ir jonuose duomenys yra aktualūs ir modeliuojant procesus kosminių Rentgeno šaltinių aplinkoje: daugiakrūvių jonų susidarymą bei jų Rentgeno spindulių emisiją. Buvo teoriškai nagrinėti kaskadai išmušus elektroną iš giliausio sluoksnio lengvuose, astrofizikai svarbiuose elementuose Ne, Mg, Si, S ir Ar. Nustatyti lygmenų užpildai pasibaigus Ožė šuoliams, tie duomenys įgalina nagrinėti po to vykstančius radiacinius šuolius. Taip pat gauti įvairaus kartotinumų jonų pasiskirstymai galinėse konfigūracijose ir lygmenyse pasibaigus kaskadui. Pirmą kartą ištirta kaskado priklausomybė nuo pradinės sužadintos būsenos daugiaelektroninių kvantinių skaičių jonams su išoriniu atviru elektronų sluoksniu. Palyginta, kaip kaskado rezultatai kinta izoelektroninėse ir izobranduolinėse jonų sekose.

**1.2. “Daugiaelektroninių atomų spektrinių charakteristikų tyrimo metodų plėtra ir jų taikymas daugiakrūviams plazmos jonams”** (2006 m. -2011 m.). Vadovas: vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vykdytojai: dr. O. Rancova (VU TFAI), dr. A.Kupliauskienė, dr. G.Merkelis, dr. V.Tutlys ir dr R. Juršėnas. Priskiriamų publikacijų skaičius: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Vykdant šią temą 2011 metais darbai buvo vykdomi keliomis kryptimis. Vystant kvantinės elektrodinamikos pataisų įskaitymą kvazireliatyvistiniame artinyje buvo pritaikytos dvi skirtingos metodikos. Pirmą iš jų tai vandeniliškų jonų Lande faktorių interpoliacija daugiaelektroninių atomų ir jonų atveju panaudojant elektronų tankių arti branduolio vertes. Ši metodika reikalauja reliatyvistinių elektronų ir su jais susijusių elektrodinamikos pataisų vidurkinimo pagal elektronų pilnus momentus. Tai leidžia toliau atlikti Lande faktorių ekstrapoliaciją kvazireliatyvistinėms funkcijoms, tačiau įneša į metodą papildomas paklaidas. Kitas metodas leidžia gauti minėtas pataisas integruojant specialiai sukurtą potencialą, tačiau tas potencialas pats yra apytikslis.

Sukurtas kompiuterinės programos, realizuojančios tuos abu metodus ir atliekami jų tinkamumo tyrimai. Kiek yra žinoma iš literatūros, tokio tipo skaičiavimų kvazireliatyvistiniame artinyje daugiau nieks pasaulyje nevykdo.

Sukurtos dvi programos leidžiančios skaičiuoti atomų ir jonų sužadavimo elektronų smūgiais skerspjūvius ir kitas charakteristikas Borno artinyje nereliatyvistiniu Hartio-Foko metodu ir Atomo teorijos skyriuje sukurtu kvazireliatyvistiniu metodu. Skaičiuojant abiemis atvejais galima plačiai atsižvelgti į koreliacinius efektus. Pirmieji skaičiavimai parodė, kad gaunami rezultatai gerai sutampa su turimomis eksperimentiniais rezultatais ir tiksliausiais kitų autorių skaičiavimais. Šio artinio įsisavinimas įgalina naudoti sukurtą kvazireliatyvistinį artinį žymiai platesniam fizikinių uždavinių ratui.

Buvo toliau vykdomas volframo daugiakrūvių jonų spektrinių charakteristikų teorinis tyrimas. Atlikta koreliacinių efektų analizė  $W^{+37}$  jono  $4p^64d$ ,  $4p^54d^2$  ir  $4p^64f$  konfigūracijų spektruose. Gautas geras sutapimas energijos lygmenų verčių, suskaičiuotų kvazireliatyvistiniame artinyje, su turimais eksperimentiniais duomenimis ir mūsų skaičiavimai savo tikslumu pranoko kitų autorių teorinius rezultatus. Analogiškai skaičiavimai atlikti  $W^{+36}$  jono  $4p^64d^2$ ,  $4p^54d^3$  ir  $4p^64d4f$  konfigūracijoms. Tiriant šio jono spektrines charakteristikas pirmą kartą parodyta, kad nesant elektrinių dipolinių šuolių galimybei iš sužadintos konfigūracijos į pagrindinę, lygmens radiacinio gyvavimo trukmė gali būti apsprendžiama ne tik elektriniais kvadrupoliniais ir magnetiniais dipoliniais šuoliais viduje sužadintos konfigūracijos, bet ir elektriniais oktopoliniais šuoliais į pagrindinę konfigūraciją.

Rayleigh—Schrodinger'io trikdžių teorijos metodais buvo tiriamos radiacinių šuolių efektinis operatorius kai atsižvelgiama į pradinės ir galinės būsenų banginių funkcijų antros eilės pataisas. Tuo tikslu išplėtotą *NCoperators*, veikianti *Mathematica* aplinkoje, programa. Jos pagrindu yra generuojamos nagrinėjamo efektinio šuolio operatoriaus išraiškos. Algebriniu būdu buvo tiriamos trijų kūnų sistemos surištos būsenos sprendžiant Šredingerio lygtį nesinaudojant viendaleliu vaizdiniu.

Pirmą kartą atlikta Cs atomo  $5p^56s^2$ ,  $5p^55d6s$ ,  $5p^56s6p$ ,  $5p^56s7s$ ,  $5p^55d^2$  ir  $5p^55d6p$  konfigūracijų autojonizacinių būsenų energijos lygmenų klasifikacija, panaudojant apskaičiuotus konfigūracijų superpozicijos artinyje energijos spektrus, sužadavimo elektronais skerspjūvius ir autojonizacijos tikimybes. Sumodeliuotas Ožė elektronų intensyvumų spektras, kai Cs atomą sužadina 400 eV elektronai, panaudotas intensyviausioms eksperimentinio spektro linijoms identifikuoti. Bendradarbiaujant su eksperimentikais tirti Cs atomo  $5p^6$  elektronų pasluoksnio sužadavimo elektronais skerspjūviai, kurie leido patikslinti  $5p^56s^2$   $^2P_{3/2,1/2}$  lygmenų energijas. Nustatyta, kad patikslintas atstumas tarp šių lygmenų yra 1,900 eV vietoje ankstesnio 1,717 eV. Šiuos naujus rezultatus skelbiantis straipsnis žurnalo *J. Phys. B* redakcijos buvo išrinktas vienu iš trijų geriausių 44 tomo 14 numerio straipsnių.

Šiais metais buvo baigta rašyti universali programa, skirta įvairių vyksmų atomuose anizotropijos parametrų skaičiuoti, vartojanti kitomis programomis surastus tų vyksmų submatricinius elementus, kurie yra specialiai sukurtame faile. Taip pat sudarytos programos, skirtos į tą failą patalpinti autojonizacijos ir sužadavimo elektronais submatricinius elementus. Parengti išsamūs tų programų aprašymai.

**1.3. “Plazmos spektrų teorinis tyrimas naudojant smūginį radiacinį modelį“** (2008-2013 m.).  
Vadovas: vyr. m. d. V.Jonauskas, vykdytojai: vyr.m.d. R.Kisielius, m.d. A.Kynienė, j.m.d. Š. Masys.  
Priskiriamų publikacijų skaičius: 0 straipsnių ISI sąrašo žurnaluose.

2011 m. parodyta, kad tiriant EBIT plazmos spektrus būtina atsižvelgti į radiacinio kaskado procesą. Radiacinis kaskadas prasideda plazmos jonams, judantiems cikloidinėmis orbitomis, išlėkus iš elektronų pluoštelio srities. Elektronų pluoštelyje lygmenų užimtumai nustatomi taikant

smūginį radiacinį modelį arba vainikinį artinį. Vėliau gauti užimtumai naudojami modeliuojant radiacinio kaskado procesą.

Atliktas  $W^{13+}$  jono spektro linijų tyrimas taikant vainikinį artinį bei skaičiuojant radiacinį kaskadą. Identifikuotos EBIT įrenginyje stebėto spektro linijos atitinka  $4f^{13} 5s 5p - 4f^{13} 5s^2$  bei  $4f^{12} 5s 5p^2 - 4f^{12} 5s^2 5p$  šuolius. Naudojant išplėstą sąveikaujančių konfigūracijų bazę nustatyta, kad tik atsižvelgus į radiacinį kaskadą galima identifikuoti eksperimente registruojamas linijas.

Suskaičiuoti  $W^{20+}$  jono energijos lygmenys, radiacinių šuolių tikimybės ir sužadintųjų elektronais spartos iškraipytų bangų artinyje. Sąveikaujančių konfigūracijų bazę sudaro 35779 lygmenys. Smūginis radiacinis modelis taikytas randant energijos lygmenų užimtumus penkioms žemiausioms konfigūracijoms.

Atliktas fotosužadavimo iš vidinių 2s ir 2p sluoksnių į išorinius  $n=3, 4, 5$  sluoksnius Fe XIV, Fe XV ir Fe XVI jonuose skaičiavimas, naudojant CIV3 programą. Duomenys integruoti į plazmos simuliacijos programą Cloudy ir panaudoti astrofizikiniuose tyrimuose.

**1.4. “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 ir konferencijų darbuose.

2011 m. gautos masės poslinkio surišto su branduolio judėjimu operatoriaus tenzorinės išraiškos ir jų pagrindu sukurta nauja rms2 programa. Išnagrinėtos  $W^{24+}$  elektrinio-daugiapolinio elektrono šuolio tikimybės priklausomybė nuo daugiapoliškumo. Paprastai yra priimta jog elektrinio-daugiapolinio elektrono šuolio tikimybė yra sparčiai mažėjanti daugiapoliškumo funkcija. Todėl, kai skaičiuojama elektronų šuolių tikimybė tarp tam tikrų pasirinkto lygiškumo konfigūracijų, pakanka atsižvelgti į pirmą, nelygų nuliui, narį, t.y. atsižvelgti į mažiausio daugiapoliškumo narį, kuris yra galimas pagal elektrono šuolio atrankos taisykles. Darbo tikslas - patvirtinti šią prielaidą nagrinėjant elektrinius oktopolinius šuolius  $W^{24+}$  jone. Šiuo tikslu buvo atlikti  $W^{24+}$  jono konfigūracijų [Kr]  $4d^{10} 4f^4$  ir [Kr]  $4d^{10} 4f^3 5s$  energijos lygmenų didelės apimties skaičiavimai, naudojant daugiakonfigūracinius Harrio ir Foko bei Dirako ir Foko metodus. Reliatyvistinės pataisos buvo įtraukiamos remiantis Breito ir Paulio bei visiškai reliatyvistiniu Breito, įtraukiant kvantinius elektrodinaminius efektus (KED efektus), artiniu. Taip pat buvo išnagrinėtas koreliacijų, reliatyvistinių ir KED pataisų vaidmuo. Šuolių tikimybės, apskaičiuotos Kulono ir Babuškinio kalibruotėse, linijos intensyvumai ir osciliatorių stiprumai yra pateikiami E1 ir E3 šuoliams tarp aukščiau minėtų lygmenų.

## 2. Finansuojami tarptautiniai projektai.

**2.1. 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, vadovė vyr.m.d. Alicija Kupliauskienė, vykdytojai: vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyriaus.m.d. R.Karazija, vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vyr.m.d. S.Kučas, vyr.m.d. R.Kisielius, m.d. O.Rancova, j.m.d. Š.Masys. 2011 m. - 63300 Lt

2011 m. vykdant projektą apskaičiuotos radiacinių šuolių tarp įvairių  $W^{37+}$  ir  $W^{36+}$  jonų lygmenų tikimybės. Gauta, kad nesant elektrinių dipolinių šuolių galimybei iš sužadintos konfigūracijos į pagrindinę, lygmens radiacinio gyvavimo trukmė gali būti apsprendžiama ne tik elektriniais kvadrupoliniais ir magnetiniais dipoliniais šuoliais viduje sužadintos konfigūracijos, bet ir elektriniais oktopoliniais šuoliais į pagrindinę konfigūraciją. Nagrinėti bendri konfigūracijų maišymosi įvairiuose volframo jonuose dėsniumai. Tuo tikslu naudotos vidutinės charakteristikos, apibūdinančios tiek koreliacinius efektus (konfigūracijų maišymosi stipris), tiek jų įtaką energijos ir emisijos spektrams. Didžiausią vaidmenį volframo jonų spektruose vaidina konfigūracijų maišymasis

su simetrišku simetrijos pasikeitimu, nustatyta jo priklausomybė nuo išorinio atviro sluoksnio kvantinių skaičių bei elektronų skaičiaus jame. Išnagrinėti  $W^{2+}$  jono elektroniniai multipoliniai šuoliai tarp  $[Kr]4d^{10}4f^35s$  ir  $[Kr]4d^{10}4f^4$ . Parašyta ataskaita anglų kalba. Balandžio mėn. Stebėtojų tarybos posėdyje R.Kisielius padarė pranešimą “Modifikuotas reliatyvistinis artinys atominių duomenų skaičiavimams”.

**2.2. 7-osios Bendrosios programos projekto „Atomo duomenų ir analizės struktūra termobranduolinei sintezei Europoje“** (Atomic Data and Analysis Structure for Fusion in Europe (ADAS-EU)) **subkontraktas** su Strathclyde universitetu Didžiojoje Britanijoje (2010/12/01-2012/05/31, 10000 EUR). Vadovė vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vyr.m.d. V.Jonauskas, vyr.m.d. R.Kisielius.

Vykdamas projektą parašyta nauja kompiuterinė programa atomų ir jonų sužadavimo elektronais skerspjūviams skaičiuoti naudojant transformuotų radialiųjų orbitalių bazę. Tirtos  $W^{8+}$ , turinčio sudėtingas  $4f^{14}5p^4$ ,  $4f^{13}5p^5$  ir  $4f^{12}5p^6$  konfigūracijas, spektrinės charakteristikos reliatyvistiniame Dirako ir Foko konfigūracijų superpozicijos artinyje. Nagrinėti  $W^{3+}$  dvigubos jonizacijos skerspjūviai laikant, kad pagrindinį indėlį įneša sužadavimas į autojonizacinę būseną, kuri vėliau suyra Ožė šuolio būdu. Ištirti  $W^{13+}$  ir  $W^{20+}$  jonų spinduliavimo EBIT plazmoje spektrų ypatumai. Skaičiavimai atlikti reliatyvistiniame Dirako, Foko ir Sleiterio artinyje su FAC kompiuterine programa, o į koreliacinius efektus atsižvelgta konfigūracijų superpozicijos artinyje.

### **3. Lietuvos mokslo tarybos finansuojami projektai.**

**3.1. Lietuvos mokslo tarybos finansuojamas mokslininkų grupės projektas „Elementariųjų procesų kaskadų sudėtinguose atomuose teorinis tyrimas“ (MIP-61).** Vadovas: vyriaus. m. d. R. Karazija, vykdytojai: vyr. m. d. V. Jonauskas, vyr. m. d. S. Kučas, m. d. A. Momkauskaitė. Vykdyto trukmė: 2010 07 01-2011 12 31. Finansavimas už visą laikotarpį 166,4 tūkst. Lt, 2011 m. – 89,9 tūkst. Lt.

2011 m. apibendrinti projekto vykdytojų grupės ir kitų mokslininkų darbų rezultatai teoriškai nagrinėjant pastaruoju metu susilaukusį nemažai dėmesio atomo fizikos reiškinių – siauros intensyvių linijų grupės susidarymą emisijos ir fotosužadavimo spektruose. Aptartos dvi šio reiškinio priežastys: dviejų lygmenų grupių, suformuotų elektrostatinės pakaitinės sąveikos, egzistavimas ir konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu maišymasis. Nustatytos intensyvumo koncentracijos spektre sąlygos, jo priklausomybė nuo elektronų skaičiaus atvirame sluoksnyje, jonizacijos laipsnio ir kitų atomo charakteristikų. Šios išvados gali būti panaudotos kuriant vakuuminio ultravioleto ir Rentgeno spindulių šaltinius.

**3.2. Lietuvos mokslo tarybos parama mokslo renginiui „Tarptautinė konferencija „Mokslas, inovacijos, lytiškumas“**, sutartis Nr. MOR-79/2011 (201 m., 8000 Lt.). Vadovė vyr.m.d. A.Kupliauskienė.

Vykdamas šį projektą buvo dalyvauta rengiant konferenciją. Parašyta ataskaita Lietuvos mokslo tarybai.

### **4. Kiti tarptautiniai projektai.**

**4.1. COST D35** projektas “Nuo molekulių iki molekulinų prietaisų: elektroninių, fotoninių, magnetinių ir spintroninių vyksmų kontroliavimas“ tęsiasi nuo 2009 metų. Atsakingas vykdytojas

vyr.m.d. A. Tamulis, vykdytojas VU FF magistrantas Mantas Grigalavičius. 2011 m. finansavimo negauta.

Kvantinės sieties ir neutralių radikalų klasikinių (Boolean) ir kvantinių ARBA loginių vartų, kontroliuojančių fotosintezę minimaliose dirbtinėse ląstelėse sukūrimas. Tolimesni kvantinės mechanikos tyrimai parodė, kad kvantinė sietis egzistuoja ir tarp dviejose ląstelėse esančių fotosintezės sužadintų būsenų.

**4.2. COST CM0703** projektas “Sistemų chemija” “**Systems Chemistry**”) [http://www.cost.esf.org/domains\\_actions/cmst/Actions/Systems\\_Chemistry](http://www.cost.esf.org/domains_actions/cmst/Actions/Systems_Chemistry). Atsakingas vykdytojas A.Tamulis, vykdytojas. 2011 m. finansavimo negauta.

Projekto vykdytojo kvantinių mechaninių tyrimų rezultatas yra tas, kad pirminė gyvybė atsirado save atgaminančių riebalinių rūgščių ląstelių pavidale. Ta pirminė gyvybė dėl kvantinių dėsnų evoliucionavo, įtraukdama savo sudėtį nukleotidus, kurie pirminėje stadijoje pagerino fotosintezės vyksmus, o tik vėliau iš nukleotidų pasigamino genetinę medžiagą. Kadangi kvantinės mechanikos dėsniai ir fundamentalios fizikinės konstantos nesikeitė nuo pat Visatos atsiradimo, tai teigiame, kad gyvybės atsiradimas buvo nulemtas dar prieš Visatos sukūrimą. Nustatyta, kad kvantinės mechaninės Vitamino D atsiradimo sąlygos pirminėse ląstelėse susijusios su fotosintezės pagerėjimu.

**4.3. COST MP0802** projektas „Saviorganizuojanti Quanosine struktūra elektroniniams molekuliniams prietaisams“ (2010-2012 m.). Atsakinga vykdytoja J.Tamulienė. 2011 m. finansavimo negauta. 2011 m. buvo tiriami duanodisino dariniai su NH<sub>4</sub> molekulėmis viduje.

## 5. Moksliniai renginiai

R.Karazijos pastangomis rugsėjo 14 d. surengti eiliniai prof. A.Jucio skaitymai. A.Tamulis prisidėjo, organizuojant COST veiklos CM0703: “Sistemų Chemija” konferencijos mokslinę programą.

Prof. habil. dr. G. Gaigalas nuo liepos 31 iki rugpiūčio 12 d. surenge darbinį seminarą pagal VISBI projektą, kuriame dalyvavo prof. T. Brage, Jon Grumer (Lundo universitetas, Švedija), prof. P. Jönsson, Pesach Laksman (Malmo universitetas, Švedija), prof. J. Bieroń (Korkuvos Jogailos vardo universitetas, Lenkija, Martine Andersson (Fudan universitetas, Kinija), Pavel Rynkun, Andrius Aljauskas, Andrius Petryla (VPU, Lietuva).

A.Kupliauskienė kartu su D.Šatkovskiene (pirmininkė, VSTS), G.Tautvaišiene (AO) ir Š.Mikolaičiu (AO) organizavo Tarptautinę konferenciją “**Mokslas, inovacijos ir lytiškumas**”, kuri vyko 2011 m. lapkričio 24-25 d. Vilniuje, Lietuvos Respublikos Seimo III-ųjų rūmų konferencijų salėje. Ją inicijavo “Basnet Forumas”, o organizavo Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas kartu su partneriais. Minint vienos iškiliausių moterų mokslininkų Marijos Kiuri (Marie Curie) antrosios Nobelio premijos 100 metų jubiliejų ir Jungtinėms Tautoms 2011 m. paskelbus Marijos Kiuri metais, konferencija buvo skirta M. Kiuri antrosios Nobelio premijos 100 metų jubiliejui paminėti. Konferenciją globojo Lietuvos nacionalinė UNESKO komisija.

Konferencijos organizacinis komitetas susidėjo iš 6 narių: Doc. dr. D. Šatkovskienė (pirmininkė)

Habil. dr. G. Tautvaišienė, Dr. A. Kupliauskienė, Doc. dr. Ž. Rutkūnienė (KTU), Doc. dr. R. Lazauskaitė (VPU), Vilma Misiukonienė (INFOBALT). Konferencijoje dalyvavo 111 (12% vyrai) dalyvių iš 9 šalių bei 9 Lietuvos institucijų (Vilniaus universitetas – 40, Kauno technologijos universitetas – 19, Fizinių ir technologinių mokslų centras – 6, Lietuvos sveikatos mokslų

universitetas – 2, Vilniaus Gedimino technikos universitetas 5, Vytauto Didžiojo universitetas – 2, Lietuvos edukologijos universitetas – 8, Mykolo Riomerio universitetas 2, Šiaulių universitetas - 8).

Konferencijos atidaryme kalbėjo: LR Seimo pirmininko pavaduotoja V. Baltraitienė, Lietuvos Nacionalinės UNESCO Komisijos pirmininkas Dr. R. Pakalnis, Seimo narė A.M. Pavilionienė, ŠMM Mokslo ir inovacijų departamento direktorius Dr. Albertas Žalys, VU prorektorius prof. J. Banys, Prancūzijos instituto Lietuvoje direktorius P. Hanse, Lenkijos Respublikos Ambasados pirmoji patarėja Lenkijos instituto direktorė Dr. Małgorzata Kasner, LMA prezidentas Valdemaras Razumas, VU TFAI direktorė hab. dr. G. Tautvaisienė.

Konferencijos metu išklaustyta 15 pranešimų, kuriuos perskaitė 10 kviestinių pranešėjų iš užsienio šalių ir 5 Lietuvos mokslininkės, dirbančios įvairiose mokslo srityse: fizikės, chemikės, biochemikės ir socialinių mokslų atstovės. Taip pat buvo pristatyti 30 standinių mokslinių pranešimų, kuriuos plenariniame posėdyje apžvelgė hab. dr. G. Tautvaišienė, dr. A. Kupliauskienė, prof. Ž. Lukšienė ir dr. A. Novelskaitė. Konferencijos plenariniai posėdžiai buvo transliuojami internete. Buvo organizuotas video ryšys su Europos komisija. Jo metu L. Corugedo (Europos Komisija) perskaitė pranešimą „Puikioms moterims puiki karjera“ ir atsakė į konferencijos dalyvių klausimus.

Konferencijos metu pristatyta paroda „Aš - mokslinės knygos, vadovėlio autorė“, kurią apžvelgė doc. Živilė Rutkūnienė. Taip pat įvyko dokumentinio filmo apie Marie Curie (Prancūzija, 2011 m.) premjera. Filmą pristatė jos režisierius Michel Vuillemer. Po filmo peržiūros įvyko diskusija, kurioje aktyviai dalyvavo konferencijos dalyvės ir filmo režisierius. Buvo sukurta konferencijos svetainė <http://www.tfai.vu.lt/curie/>, kurioje patalpinta informacija apie konferenciją, registracija ir galimybė pateikti pranešimų tezes, konferencijos vieta, dalyvių sąrašas, išsami informacija apie pranešėjus, konferencijos programa ir rėmėjų sąrašas. Apie konferenciją 2011-11-24 rytą LTV laidoje „Labas rytas“ papasakojo „Basnet Forumas“ prezidentė doc. Dalia Šatkovskienė.

## 6. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas

2011 m. įvyko 24 (pernai tiek pat) Atomo teorijos skyriaus seminarai. Seminaruose svarstyta: 2011 metų planai – 2, spaudai paruošti straipsniai – 9, tezės – 8, Š. Masio doktorantūros studijų peratestacija, dalyvaujančių konkursuose pretendentų į etatines vietas pranešimai, biudžetinių temų ataskaitos - 2. Taip pat išklausti 4 apžvalginiai pranešimai: K. L. M. Lewis „D1D2 cyt b559 reakcijos centro komplekso dvidimensinė spektroskopija. Eksperimentas ir teorija“, V. Tamulio „Kvantinės sieties fotosintezė ir melodijos dirbtinėse ląstelėse“, R. Karazijos „Naujos Rentgeno spektrų tyrimo perspektyvos, naudojantis laisvųjų elektronų lazeriu ir kosminėmis observatorijomis“.

Seminarai buvo lankomi gerai. Nei vieno seminaro nepraleido A. Kupliauskienė, po vieną seminarą praleido V. Tutlys, P. Bogdanovičius, Š. Masys. Po du seminarus praleido R. Karazija, R. Kisielius. Daugiausiai seminarų praleido G. Gaigalas (14) ir S. Kučas (10), A. Momkauskaitė (9), J. Tamulienė (8), A. Tamulis (5) ir A. Kynienė (5).

1. R. Kisielius kėlė kvalifikaciją dalyvaudamas tarptautinėse konferencijose SEMWO2011 "Kosmoso ekonomika daugiapoliariniame pasaulyje" ir "Mokslas, inovacijos ir lytiškumas". G. Gaigalas lankė mokslinius seminarus Vilniaus pedagoginio universiteto, Fizikos ir technologijos fakultete, NIST'e (JAV), Lundo universitete (Švedija), Jogailos universitete (Krokuva, Lenkija). Š. Masys išlaikė 2 doktorantūros egzaminus. Abu įvertinti 10 (puikiai).

2.

## 7. Pedagoginė veikla

Skyriaus darbuotojai vadovavo doktorantams, buvo daktaro disertacijų gynimo tarybų nariais ir studentų kursinių bei baigiamųjų darbų vadovais.

V.Jonauskas vadovavo Š.Masio, o J.Tamulienė – A.Šliogerio daktaro disertacijų ruošimui. G.Gaigalas buvo doktorantų Pavel Rynkun ir Andriaus Alkausko mokslinis vadovas VPU.

R.Karazija buvo A.Pašiškevičiaus, A.Kupliauskienė – Ž.Ežerinskio daktaro disertacijos gynimo tarybos nariais, o V.Jonauskas M. Mačernio (VU) daktaro disertacijos oponentas.

A.Kupliauskienė vadovavo studentų G. Kerevičiaus (VU FF), V.Jonauskas - E. Bučio (LEU), A. Pranciukevičiaus (VU FF) ir T. Šemetulskio (VU FF), A.Tamulis – J.Cijausko (VU FF) ir J.Serbentos (VU FF) bei M.Purlio (VU GMF) kursiniams darbams. A.Kynienė vadovavo J.Gorelov (VPU), J.Tamulienė – A.Šliogerio (VPU), A.Tamulis M.Grigaravičiaus (VU FF) ir A.Pavilionio (VU GMF) diplominiams darbams. P.Bogdanovičius dirbo su vienu studentu (yra bendra publikacija),

P.Bogdanovičius skaitė uždavinių sprendimo ir kvantinės mechanikos kursus FO moksleiviams bei Lietuvos komandos TFO nariams.

## 8. Dalyvavimas leidybinėje veikloje

A.Karazija ir Z.Rudzikas parengė spaudai ICAMDATA 7 darbus, A.Kupliauskienė rūpinosi jų spausdinimu. R.Karazija dalyvavo „Lietuvos fizikos žurnalo“ ir A.Tamulis - žurnalo „Open Journal of Inorganic Chemistry“ leidime kaip redkolegijos nariai. G. Gaigalas kartu su V. Lapeika paruošė mokymo priemonę studentams „Atomo ir branduolio fizikos laboratoriniai darbai: mokymo priemonė“ (Vilnius: Vilniaus pedagoginio universiteto leidykla, 2011. 99). A.Kynienė buvo 2 mokymo priemonių moksleiviams bendraautorė: J.Gutauskaitė, A.Kynienė, Ž.Kovaliūnienė, P.Ložda. Spektras. Fizikos užduočių sąsiuvinis 10 klasei I dalis; Fizikos vadovėlis 10 klasei, II dalis (Briedis, 2011). A.Momkauskaitė iš anglų k. išverstė mokslo populiarinimo knygą vaikams: Lucy ir Stephen Hawking. Džordžas – Visatos lobių ieškotojas, kurią išspausdino leidykla „Jotema“. R.Kisielius referavo 2 straipsnius Astronomy&Astrophysics žurnalui. P.Bogdanovičius recenzavo vieną straipsnius, pateiktą užsienio žurnalams.

## 9. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje.

Lyginant su 2010 m., šiais metais skyriaus darbuotojai mažiau aktyviai dalyvavo šioje veikloje

P.Bogdanovičius buvo VU TFAI tarybos narys, Fizikų draugijos Valdybos narys, kaip visada, dirbo organizuodamas Lietuvos moksleivių fizikos olimpiadą bei Čempionatą, vadovavo Lietuvos komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje, Lietuvos fizikos olimpiados ir čempionato organizacinio komiteto narys, VU TFAI Priėmimo-atestacijos komisijos pirmininkas, VU TFAI Atlyginimų skyrimo komisijos narys.

R.Karazija buvo darbo grupės, rengusios mokslo populiarinimo Lietuvoje studiją, narys, MA Matematikos, fizikos ir chemijos skyriaus biuro narys, „Lithuanian Journal of Physics“ redakcinės kolegijos narys, Visuotinės lietuvių enciklopedijos konsultantas (fizikos istorija), instituto tarybos narys, VPU Fizinių ir technologijos mokslų srities konkursų ir atestacijos komisijos narys.

G.Gaigalas dalyvavo 2006/2010 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje (su Malmės universitetu Švedijoje). Jis yra Studijų kokybės vertinimo centro (SKVC) ekspertų, vertinančių fizikos krypties studijų programas aukštosiose mokyklose, grupės narys, Vilniaus pedagoginio universiteto Senato narys, VPU valstybinių egzaminų komisijos narys, VPU baigiamųjų magistrinių ir bakalauro darbų gynimo tarybos narys, skaitė paskaitas VPU (102 val.).

V.Jonauskas buvo VU TFAI Tarybos sekretorius, instituto tarybos narys, skaitė paskaitas VPU (54 val.).

R.Juršėnas buvo ATS seminario sekretorius.

R.Kisielius pagelbėjo skyriaus darbuotojams iškilus kompiuterių problemoms.

R.Kivilšienė buvo Lietuvos atstovė Europos fizikų draugijos Fizikos istorikų darbo grupėje.

A.Kynienė buvo LFMA Vilniaus skyriaus valdybos pirmininkė, Vilniaus miesto metodinės tarybos narė.

A.Kupliauskienė buvo ATS vadėja, Europos Komisijos projektų vertinimo ekspertė, Asociacijos "BASNET forumas" valdybos pirminkė, VU TFAI Skatinimo komisijos pirmininkė, paruošė ir įrišo ATS 2009 m. ir 2010 m. skyriaus darbuotojų publikacijas.

G.Merkelis buvo VU TFAI Skatinimo komisijos narys, instituto tarybos narys, VU TFAI su VPU ir VU TFAI su VU doktorantūrų jungtinių komisijų narys.

A.Momkauskaitė Atomo teorijos skyriaus svetainės instituto interneto svetainėje redaktorė.

A.Tamulis Europos Komisijos ekspertas, vertinant FP7 FET Open (Future Emerging Technologies) projektus Briuselyje .

J.Tamulienė buvo LMS valdybos narė, LFD išdininkė, VU TFAI profesinės sąjungos pirmininkė, skaitė paskaitas VU MIF (172 val.).

## **10. Mokslo žiniasklaida**

Mokslo populiarinimo veikla ne mažiau svarbi už mokslinę. Lietuvoje ne tiek daug vaikų gabių tiksliesiems mokslams, todėl labai svarbu juos sudominti fizika ir paskatinti ją studijuoti. Skyriaus darbuotojai atspausdino 5 mokslo populiarinimo straipsnius, perskaitė 16 paskaitų. Labiausiai pasižymėjo R.Karazija, kuris parasė 3 straipsnius ir perskaitė 10 paskaitų.

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

2011 m. skyriaus darbuotojai 24 kartus buvo išvykę į užsienį. Komandiruočių sąrašas pridedamas. Skyriuje lankėsi 7 svečiai iš užsienio: prof. N.Badnel iš Didžiosios Britanijos, prof. G.Ferland iš JAV, prof. T.Brage iš Švedijos, prof. P.Jonnson iš Švedijos, J.Grumer iš Švedijos, prof. J.Bieron iš Lenkijos, M.Andersion iš Kinijos.

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

2011 m. gruodžio mėn. 22 d. skyriuje dirbo 19 darbuotojų ir doktorantų (sąrašas pridedamas): 4 vyriausieji mokslo darbuotojai (iš jų 1 puse etato antraeilėse pareigose), 9 vyresnieji mokslo darbuotojai (iš jų 1 puse etato ir 1 ilgalaikėse atostogose), 3 mokslo darbuotojai, 1 jaunesnysis mokslo darbuotojas puse etato, 1 inžinierius puse etato ir 1 doktorantas.

A.Kupliauskienė buvo išrinkta vyriausiojo mokslo darbuotojo, o R.Juršėnas – mokslo darbuotojo pareigoms, A.Tamulis perrinktas vyr.m.d. pareigoms. Skyrių paliko Z.Rudzikas (mirė 2011-06-08), O.Rancova ir E.Gaidamauskas. R.Kivilšienė perėjo dirbti puse etato vyresniojo mokslo darbuotojo, o G.Kerevičius priimtas dirbti puse etato inžinieriaus pareigose.

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

2011 m. stambių pirkinų nebuvo pirka. Įsigyta 9 UPS stacionariams, 4 baterijos nešiojamiems kompiuteriams, 2 kietieji diskai, 12 prailgintuvų su apsauga nuo įtampos šuolių, keletas kitų smulkių kompiuterių detalių.



## 14. Kiti paminėtini darbai

R.Karazija padėjo daug pastangų ir sugaišo laiko tvarkydamas Z.Rudziko archyvą. Jis paruošė Z.Rudziko turėtus dokumentus bei kitą medžiagą ir perdavė Mokslų Akademijos bibliotekai. Jis taip pat parašė nekrologą. G.Gaigalas kartu su Z.Rudziku paruošė paraišką šaukimo ERC-2011-AdG projektui (finansavimo negavo). A.Tamulis pateikė LMT mokslininkų grupių projektą, kuriame suformulavo kvantinių kompiuterių procesorių pagaminimo iš molekulinėsiu prietaisų mokslinę idėją. J.Tamulienė paruošė paraišką mobilumo su Ukraina projektui (finansavimo negavo). P.Bogdanovičius gavo LR Prezidentės du padėkos raštus.

## 16. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai.

Vykdam tarptautinius projektus kyla sunkumų bendraujant su VU buhalterija. Pavyzdžiui, VU buhalterija bandė traktuoti 7 Europos bendrosios programos projektą EURATOM/LEI kaip Lietuvos energetikos instituto užsakyminių darbą, nors VU ir LEI yra šio projekto vykdymo partneriai. Iki metų galo dar nėra aišku, ar LEI pervestais pinigais galime naudotis ar ne.

V. Jonauskas pageidauja vyrų tualete įrengti elektrinį rankų džiovintuvą, nes popieriaus rankoms nusivalyti dažnai nebūna.

J.Tamulienė pageidauja nesiųsti informacijos be nurodymų. Pvz. 2011-12-05 d. Tarybos sekretoriaus laiškas. Viešai skelbti Tarybos ir Administracijos nutarimus.

R.Kisielius ne pirmi metai pageidauja, kad 444 kambariui išorinės durys būtų išimtos.

Reikėtų apšvietimo 445a prieškambaryje, nes dabar esantis šviečia tiktai G.Merkelio kambaryje.

## 16. Mokslinė produkcija.

Skyriaus darbuotojams 2011 metai nėra derlingi. Atspausdinta 14 straipsnių ISI sąrašo žurnaluose (pernai buvo 17) ir 3 straipsniai kituose leidiniuose., t.y. beveik po vieną straipsnį skyriaus mokslo darbuotojui. Jeigu skaičiuosime užimtais etatais, kurių yra 14,5 be R.Karpuškienės, bus po vieną ISI straipsnį. Atspausdinta 30 pranešimų konferencijose tezių.

Nuo 2008 m. 40% biudžetinio finansavimo perskirstoma tarp universitetų ir institutų, atsižvelgiant į mokslinę produkciją ir projektuose uždirbtus pinigus. Vertinant mokslinę produkciją tarp institucijų Lietuvos mastu, A kategorijos, t.y. ISI sąrašo žurnaluose straipsnių, kurių IF didesnis už 20% nuo AIF, indėlis AIV nuo 2010 m. apskaičiuojamas pagal formulę

$$AIV = \left( \frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left( 1 + 2 \frac{IF}{AIF} \right),$$

kur *NI* – užsienio institucijų skaičius plius vienas, *NA* – bendraautorių skaičius, *IF* – Impact Factor, *AIF* – Agregate Impact Factor. Po to apskaičiuojami taškai AIV padauginant iš 3. Jeigu ISI sąrašo žurnalo IF mažesnis už 20% nuo AIF, tokio straipsnio taškai nepridedami. Yra dar ir papildomai reikalavimų ISI WOS duomenų bazės žurnalams. Priede yra lentelė, kurioje pateikiamas ATS darbuotojų mokslinės produkcijos indėlis, apskaičiuotas pagal ŠMM rekomendacijas. Taigi skyriaus darbuotojai turėtų atnešti institutui apie 36 taškus. Praėjusiais metais buvo apie 110. Deja net 7 skyriaus darbuotojais šiais metais straipsnių neturi.

Visų publikacijų sąrašai pridedami.

UŽSIENIO KOMANDIRUOTĖS 2011 m.

A. Kupliauskienė	Gegužės 10–13 d.	Belgija
A. Kupliauskienė	Gegužės 15–20 d.	Belgija
A. Kupliauskienė	Liepos 27-rugpjūčio 2	Didžioji Britanija
R.Karazija	Gruodžio 10-18 d.	Indija
A.Momkauskaitė	Gruodžio 10-18 d.	Indija
G.Gaigalas	Vasario 26 - kovo 14	Lenkija
G.Gaigalas	Gegužės 31 – birželio 28	JAV
G.Gaigalas	Rugsėjo 18 – spalio 1	Švedija
G.Gaigalas	Spalio 31- lapkričio 28	Švedija
V.Jonauskas	Liepos 27-rugpjūčio 2	Didžioji Britanija
P.Bogdanovičius	Liepos 9-19	Bankokas
R.Kisielius	Spalio 20-26	Didžioji Britanija
A.Tamulis	Spalio 27-30	Graikija
J.Tamulienė	Sausio 19-20	Lenkija
J.Tamulienė	Sausio 26-28	Didžioji Britanija
J.Tamulienė	Birželio 6 – liepos 2	Italija
J.Tamulienė	Lapkričio 9-10	Olandija
R.Juršėnas	Spalio 30 – lapkričio 3	JAV
Š.Masys	Birželio 28 - liepos 2	Šveicarija
Z.Rudzikas	Sausio 19-20	Belgija
Z.Rudzikas	Vasario 1-4	Belgija
Z.Rudzikas	Kovo 8-11	Belgija
Z.Rudzikas	Kovo 22-26	Belgija
Z.Rudzikas	Gegužės 16-20	Belgija

**Atomo teorijos skyriaus darbuotojų 2011 m. gruodžio 22 d.**

**sąrašas**

Eil. Nr.	Pavardė, vardas	Mokslinis laipsnis, pareigos
1	Bogdanovičius Pavlas	Prof. habil. dr., vyriaus. m. d.
2	Gaigalas Gediminas	Prof. habil. dr., vyriaus. m. d. (0,5)
3	Karazija Romualdas	Prof. habil. dr., vyriaus. m. d.
4	Kupliauskienė Alicija	dr., vyriaus. m. d.
5	Jonauskas Valdas	dr., vyr. m. d.
6	Kisielius Romualdas	dr., vyr. m. d.
7	Kučas Sigitas	dr., vyr. m. d.
8	Karpuškienė Rasa	dr., vyr. m. d. (ilgalaikėse atostogose)
9	Kivilšienė Rasa	dr., vyr. m. d. (0,5)
10	Merkelis Gintaras	dr., vyr. m. d.
11	Tamulis Arvydas	dr., vyr. m. d.
12	Tamulienė Jelena	dr., vyr. m. d.
13	Tutlys Vladas	dr., vyr. m. d.
14	Juršėnas Rytis	dr., m. d.
15	Kynienė Aušra	dr., m. d.
16	Momkauskaitė Alina	dr., m. d.
17	Šarūnas Masys	j. m. d. (0,5), doktorantas
18	Gintaras Kerevičius	inž. (0,5)
19	Adolfas Šliogeris	doktorantas

**ATS darbuotojų publikacijų indėlis, apskaičiuotas pagal Švietimo ir mokslo ministerijos 2010 m. liepos mėn. 10 d. taisyklės.** Skliausteliuose ISI straipsniai, kurių Impact Factor mažesnis už 20% Agregate Impact Factor, ir straipsniai ne ISI sąrašo leidiniuose.

Pavardė	Str. Skaičius: ISI (kiti ISI, kiti straipsniai)	Indėlis: ISI (kitų ISI, kitų straipsnių)	Taškai (AIV)
A.Kupliauskienė	2 (0, 0)	1.33 (0, 0)	3.166
G.Gaigalas	4 (1, 0)	0.48 (0.5, 0)	2.079
R.Karazija	2 (2, 0)	0.67 (0.67, 0)	1.945
A.Tamulis	1 (0, 1)	1 (0, 0.5)	1.406
V.Jonauskas	1 (1, 0)	0.33 (0.33, 0)	1.101
S.Kučas	1 (1, 0)	0.33 (0.33, 0)	1.101
A.Momkauskaitė	1 (0, 0)	0.33 (0, 0)	0.844
A.Tamulienė	1 (2, 0)	0.25 (0.375, 0)	0.650
P.Bogdanovičius	1 (0, 0)	0.33 (0, 0)	0.568
R.Juršėnas			
R.Kisielius			
R.Kivilšienė			
A.Kynienė			
Š.Masys			
G.Merkelis			
A.Šliogeris			
V.Tutlys			

$$AIV = \left( \frac{\sqrt{NI}}{NA} \right) \left( 1 + 2 \frac{IF}{AIF} \right)$$

*NI* – užsienio institucijų skaičius +1

*NA* – bendraautorių skaičius

*IF* – Impact Factor

*AIF* – Agregate Impact Factor