

VU TFAI Atomo teorijos skyriaus

2012 m. Ataskaita

2012 m. gruodžio 20 d. skyriuje dirbo 19 darbuotojų: 3 vyriausieji, 9 vyresnieji, 3 mokslo, 3 jaunesnieji mokslo darbuotojai ir 1 inžinierius. Jie užėmė 11,75 iš biudžeto finansuojamo etato ir 6,25 iš projektų lėšų finansuojamo etato. Taip pat skyriuje buvo vienas afiliuotasis vyriausiasis mokslo darbuotojas ir 3 doktorantai. Jie vykdė 11 projektų (3 biudžetines temas, 2 FP7, 3 Lietuvos institucijų remiamus ir 3 tarptautinius, kurie piningų institutui neatnešė) ir uždirbo per 318 tūkst. Lt (EURATOM/LEI – 11719 EUR (40432 Lt) iš Europos Komisijos ir 7952 Lt iš Lietuvos biudžeto per MITA; 2 ES Struktūrinių fondų dotacijos projektai – 269950 Lt) . Paskelbta spaudoje 24 moksliniai straipsniai: 16 ISI sąrašo žurnaluose, 6 kituose žurnaluose ir leidiniuose, vienas preprintas ir 2 knygų skyriai. Atspausdintos 33 pranešimų konferencijose tezės bei perskaityti ar pristatyti 29 pranešimai konferencijose ir kituose renginiuose. Paskelbti 2 mokslo populiarinimo straipsniai, perskaityta 12 mokslo populiarinimo paskaitų visuomenei.

1.VU TFAI Tarybos patvirtintos biudžetinės temos.

1.1. “Plazmos spektrų teorinis tyrimas naudojant smūginį radiacinį modelį“ (2008-2013 m.). Vadovas: vyr. m. d. dr. V.Jonauskas, vykdytojai: vyr.m.d. dr. R.Kisielius, m.d. dr. A.Kynienė, j.m.d. Š. Masys. Priskiriamų publikacijų skaičius: 1 straipsnis ISI sąrašo žurnaluose.

2012 m. atliktas W^{25+} jono energijos lygmenų, radiacinių šuolių tikimybių bei sužadintųjų elektronais spartų sutrikdytų bangų artinyje skaičiavimas Dirako-Foko-Sleiterio metodu. Gauti teoriniai spektrai, atitinkantys vainikinį artinį, smūginį radiacinį modelį bei radiacinį kaskadą. Nustatyta, kad smūginis radiacinis modelis turi būti papildytas radiacinių kaskadų skaičiavimais, norint išryškinti W^{25+} jono spektro linijas, stebimas eksperimentiniuose EBIT matavimuose. Būtina atsižvelgti į radiacinio kaskado metu spinduliuojamą spektrą, nes plazmos jonai EBIT įrenginyje juda cikloidinėmis orbitomis, tai įlėkdami į elektronų pluoštelio sritį, tai išlėkdami. Vainikinis modelis galioja pluoštelio srityje, jonams sąveikaujant su elektronais. Radiacinis kaskadas prasideda pasibaigus sąveikai su elektronais, tai yra elektronų pluoštelio išorėje.

Vykdytas W^{13+} jono spektro linijų, atitinkančių šuolius $4f^{13}5s5p - 4f^{13}5s^2$, tyrimas naudojant išplėstą sąveikaujančių konfigūracijų bazę Dirako-Foko artinyje. Identifikuotos spektro linijos stebėtos eksperimentiniuose spektruose.

1.2. “Sunkių ir supersunkių cheminių elementų spektrinių charakteristikų tyrimas” (2009 – 2014 m.). Vadovas vyriaus.m.d. prof. G.Gaigalas, vykdytojai: vyr.m.d. dr. V.Jonauskas, vyr.m.d. dr. G.Merkelis, m.d. dr. A.Kynienė, dokt. L.Radžiūtė. Priskiriamų publikacijų skaičius: 7 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2012 m. išnagrinėtas W^{37+} spektras bei E1, E2 ir M1 šuoliai daugiakonfigūraciniame Dirako-Foko artinyje. Apskaičiuoti ličio izoelektroninės sekos masės ir lauko izotopinio poslinkio parametrai 2s-2p rezonansiniams dubletams daugiakonfigūraciniame Dirako-Foko artinyje. Atliktas

volframo W^{8+} jono energijos lygmenų tyrimas Dirako-Foko bei Dirako-Foko-Sleiterio metodais naudojant išplėstą sąveikaujančių konfigūracijų bazę.

1.3. „Sudėtingų atomų ir jų darinių spektrinių charakteristikų tyrimas“ (2012-2016 m.), vadovė vyriaus.m.d. dr. A.Kupliauskienė, vykdytojai: prof., habil. dr. P.Bogdanovičius, afiliuotasis vyriaus.m.d. prof., habil. dr., vyriaus.m.d. R.Karazija, vyr.m.d. dr. S.Kučas, vyr.m.d. dr. R.Karpuškienė, vyr.m.d. dr. R.Kivilšienė, vyr.m.d. dr. G. Merkelis, vyr.m.d. dr. A.Tamulis, vyr.m.d. dr. J.Tamulienė, vyr.m.d. dr. V. Tutlys, m.d. dr. R. Juršėnas, m.d. dr. A.Momkauskaitė, doktorantas A.Šliogeris. Priskiriamų publikacijų skaičius: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2012 m. atlikti detalūs kaskadų po vakansijos susidarymo K sluoksnyje skaičiavimai lengviems, astrofizikai svarbiems elementams Ne, Mg, Si, S ir Ar. Nustatytos sužadintų lygmenų užpildos pasibaigus Auger šuoliams ir įvairaus kartotinumų jonų pasiskirstymas galinėse konfigūracijose bei lygmenyse pasibaigus kaskadui. Šie rezultatai įgalina atsižvelgti į šį procesą, modeliuojant daugiakrūvių jonų susidarymą ir jų Rentgeno spindulių emisiją kosminių Rentgeno šaltinių aplinkoje. Pirmą kartą ištirta kaskado priklausomybė nuo pradinės sužadintos būsenos daugiaelektronų kvantinių skaičių jonams su išoriniu atviru elektronų sluoksniu.

Atliktas sieros antrojo jono spektrinių charakteristikų teorinis tyrimas, skirtas bendram darbui su JAV mokslininkais. Taip pat atliktas Fe^{21+} 2s-2p sužadinimo elektronų smūgiais, magnetinių kvadrupolinių M2 ir elektrinių oktopolinių E3 šuolių iš $4p^5 4d^{N+1} + 4p^6 4d^{N-1} 4f$ konfigūracijų į pagrindinę $4p^6 4d^N$ konfigūraciją įtakos radiacinėms gyvavimo trukmėms nagrinėjimas ilgose izoelektroninėse sekose esant skirtingoms 4d-sluoksnių užpildoms tyrimas. Parodyta, kad tokių „egzotinių“ šuolių įskaitymas gali daug kartų sumažinti metastabilių lygmenų, iš kurių nėra E1 šuolių į pagrindinę konfigūraciją, bet egzistuoja E2 ir M1 šuoliai konfigūracijos viduje, gyvavimo trukmės. Apskaičiuoti lengvųjų atomų sužadinimo elektronais skerspjūviai labai geras dera su duomenimis iš NIST bazės.

Panaudojant apskaičiuotas su FAC programa Rb atomo $4p^5 n l n' l'$ LSJ būsenų sužadinimo energijas, skerspjūvius ir autojonizacijos tikimybes bei transformuotus iš jjJ į LSJ ryšį skleidimo koeficientus atlikta teorinė lygmenų klasifikacija LSJ ryšyje ir išlėkusių Auger elektronų eksperimentinio spektro identifikacija.

Surastos antros eilės banginės funkcijos operatoriaus išraiškos trikdžių teorijos artinyje. Operatoriaus narių generavimas atliktas sukurtu simbolinio programavimo paketu NCoperators. Šios išraiškos reikalingos norint aprašyti šuolio operatorių aukštesnės eilės artiniu. Taip pat buvo tirta kvantinė trijų kūnų sistema neviendaleliame artinyje, t.y., sprendžiant antros eilės diferencialinę lygtį tiesiogiai, nesinaudojant įprastomis teorinėje atomo spektroskopijoje atominėmis orbitalėmis. Parodyta, kad sistemą, kurioje sąveika aprašoma Euklidinės grupės veikimo atžvilgiu invariantišku potencialu, nusakantis diferencialinis operatorius devynmatėje Euklidinėje erdvėje gali būti suredukuotas į Schrodingerio lygtį, užduotą ant realių skaičių pusašės (radijinė lygtis) su r^{-k-1} tipo potencialu, kur $k=0,1,\dots$. Gautos trijų kūnų sistemą aprašančio Hamiltoniano tikrinės vertės. Pastarosios vienareikšmiškai nusakomos SO(3) grupės neredukuotiniais įvaizdžiais bei jau minėtu skaičiumi k. Tiriant tokios sistemos spektrines charakteristikas, buvo siekiama sukurti efektyvų matematinį aparatą šuolio tikimybių tyrimui.

Kvantiniais mechaniniais tankio funkcionalo metodais buvo sumodeliuotas sudėtingų molekulinų sistemų (iki 650 atomų) savaiminis susidarymas, modeliuojant gyvybės atsiradimą. Kvantinės sieties molekuliniai loginiai vartai sumodeliuoti atskirose dirbtinėse ląstelėse. Naudojantis neutralių radikalų molekulėmis, sumodeliuotos saugios dirbtinės gyvybės formos, kuriose fotosintezė vyksta tikrai esant vienos krypties išoriniame magnetiniame lauke. Naudojantis tankio funkcionalo metodais, buvo atrasta kvantinė sietis modelinėse bioorganinėse sistemose,

sudarytose iš dviejų minimalių ląstelių. Sumodeliuoti kvantinės sieties molekuliniai loginiai prietaisai, kurie kontroliuoja fotosintezę dirbtinėse ląstelėse.

Teorinio modeliavimo būdu rastas stabilios struktūros nanodeimantas, kuris iki šiol nebuvo paminėtas literatūroje. Parodyta, kad skiriasi L-, DL- ir D alanino fragmentacija bei pasiūlytos naujas fragmentų susidarymo reakcijos.

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. P.Bogdanovičius, vyriaus.m.d. R.Karazija, vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vyr.m.d. S.Kučas, vyr.m.d. R.Kisielius, vyr.m.d. R.Karpuškienė, m.d. A.Kynienė, j.m.d. Š.Masys.

2012 m. vykdant projektą atlikti didelės apimties W^{8+} jono 30 žemiausių energijos lygmenų skaičiavimai naudojant daugiakonfigūracinį Dirako-Foko metodą. Nustatyta, kad tokios sistemos nagrinėjimui yra labai svarbu į skaičiavimus įtraukti $n=4$ ir $n=5$ kompleksus. Darbe gauti rezultatai buvo nagrinėjami tiek LSJ , tiek jj ryšiuose. Šiuo atveju lygmenų indentifikavimui yra tinkamesnis jj ryšys. Atlikti skaičiavimai ir ADNDT atiduoti du straipsniai su W^{36+} ir W^{35+} spektrais. Apskaičiuoti dvielektroninės rekombinacijos spartos koeficientai Fe^{6+} jonams. Tirti Cs atomo ir neigiamo jono spektrai ir suirimo tikimybės.

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 (2012 m., 9000 EUR). Vadovas vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vyr.m.d. R.Kisielius.

Vykdant projektą atliktas Hf I, Hf II, Hf III, Hf IV, Ta II, Ta III, Ta IV, Ta V, W III, WIV, W V, W VI, Re IV, Re V, Re VI ir Re VII sužadinimo elektronų smūgiais iš pagrindinės konfigūracijos grupės $(5d^N + 5d^{N-1}6s + 5d^{N-2}6s^2, N$ nuo 1 iki 4) lygmenų į tos pačios konfigūracijų grupės lygmenis ir į lygmenis iš konfigūracijų grupės $(5d^{N-1} 6p + 5d^{N-2}6s 6p + 5d^{N-3}6s^26p, N$ nuo 1 iki 4) teorinis tyrimas. Atsižvelgiant į tai, kad klasterių darbas nėra visai stabilus, skaičiavimai buvo labai sunkūs. Įsisavinta N. Badnell programa skerspjuviams vidurkinti pagal elektronų energijų pasiskirstymą. Atliktas W III sužadinimo į $5d^35f$ konfigūraciją skerspjuvių skaičiavimas.

3. Lietuvos mokslo tarybos finansuojami projektai.

3.1. Atominių duomenų bazės astrofizikinei, technologinei ir laboratorinei plazmai modeliuoti sukūrimas ir pildymas (ES struktūrinių fondų dotacijos projektas VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-013, 2012.09.27-2015.09.26). Vadovas P.Bogdanovičius. Vykdytojai: A.Kupliauskienė, R.Kisielius, G.Merkelis, R.Karpuškienė, Š.Mikolaitis, G.Valiauga.

Dirako-Foko-Sleiterio artinyje apskaičiuotos Rb atomo $4p^5(j)nl(j')n'l'(j'')J$ lygmenų sužadinimo energijos, sužadinimo elektronais skerspjuviai ir autojonizacijos tikimybės. Suskaičiuota

autojonizacinių šuolių tikimybės jonams, turintiems vakansijas vidiniuose 2s ir 2p sluoksniuose. Ištirtos sistemos, kai išorinis elektronas yra $n=3$ sluoksnyje, jonai nuo aliuminio (Al) sekos iki cinko (Zn) izoelektroninės sekos. Gauti duomenys kartu su anksčiau suskaičiuotais tų pačių sistemų radiacinių šuolių parametrais ruošiami talpinimui kuriamoje ADAMANT duomenų bazėje.

3.2. Voframo jonų plazmos spektrų modeliavimas (ES struktūrinių fondų dotacijos projektas VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-015, 2012.09.27-2015.09.26). Vadovas: V.Jonauskas. Vykdytojai: G.Gaigalas, R.Kisielius, S.Kučas, G. Merkelis, A. Kynienė, Š. Masys, P. Rynkun, A. Alkauskas.

2012 m. vykdant šį projektą buvo atliktas W^{25+} jono energijos lygmenų ir radiacinių šuolių tikimybių tyrimas Dirako-Foko metodu naudojant išplėstą sąveikaujančių konfigūracijų bazę. Atliekami W^{44+} jonų sužadavimo per autojonizacines būsenas skaičiavimai.

3.3. Studentų mokslinė praktika.

Lietuvos Mokslo taryba skyrė lėšas šių studentų mokslinėms praktikoms ir darbams finansuoti: VU studentas J.Serbenta (2012.02.24 - 2012.06.24 ir 2012.07.01 - 2012.08.31, vadovas A.Tamulis), VU studentas A.Pavilionis (2012.02.24 - 2012.06.24, vadovas A.Tamulis), VU studentas A.Prancikevičius (2012.07.01 - 2012.08.31, vadovas V.Jonauskas), VU studentas D.Stonys (2012.10.01-2013.01.27, vadovas P.Bogdanovičius), (2012.10.01-2013.01.27, VU studentė L.Baliulytė (2012.10.01-2013.01.27, vadovė J.Tamulienė).

4. Kiti tarptautiniai projektai.

4.1. Dalyvavimas ERASMUS dėstytojų mainų programoje.

Pagal šią programą G.Gaigalas dalyvavo:

1. 2006/2011 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje su Malmės universitetu (Malmė, Švedija).
2. 2012/2013 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje su Jogailos vardo universitetu (Krokuva, Lenkija).
3. 2012/2013 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje su ULB universitetu (Briuselis, Belgija).

4.2. VISBI programos projektas „Atominių struktūrų skaičiavimai ir jų taikymas astronomijoje ir plazmos fizikoje (Computational atomic structure with applications to astronomy and plasma physics)“.

Projekte dalyvavo G.Gaigalas. Pagrindiniai rezultatai: Paruošta publikavimui nauja Grasp2K programų paketo versija.

4.3. NSF (JAV) projektas „Sunkiųjų elementų spektrinė diagnostika esant stipriam raudonajam poslinkiui“ (2012-2015) atsakingi vykdytojai R.Kisielius ir P.Bogdanovičius.

Buvo skaičiuojami radiaciniai šuoliai iš vidinių $n=2$ sluoksnių jonams nuo $Z=13$ iki $Z=30$. Gauti rezultatai pritaikyti programai Cloudy.

5. Moksliniai renginiai

R.Karazijos pastangomis rugsėjo 13 d. surengti eiliniai prof. A.Jucio skaitymai.

G.Gaigalas organizavo tarptautinį seminarą atomo teorijos klausimais (nuo 2012-05-21 iki 2012-05-25) VISBI projekto dalyviams.

6. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas

2012 m. įvyko 27 (pernai 24) Atomo teorijos skyriaus seminarai. Metų pradžioje buvo svarstyti biudžetinių temų ir asmeniniai darbuotojų planai 2012 metams. Per metus seminaruose buvo apsvastyti 7 spaudai paruošti straipsniai, keletą pranešimų konferencijose tezės, 14 komandiruočių ataskaitos. Viename seminare A.Tamulis padarė pranešimą „Kvantinė sietis“. Du seminarai buvo skirti konkursuose dalyvaujančių ir atestuojamų darbuotojų pranešimams. Dar 2 seminaruose išklaustytos doktorantų ataskaitos atestacijai ir L.Radžiūtės doktorantūros studijų planas. Konkurso laimėjusių ES struktūrinių fondų dotacijos projektų vadovai papasakojo apie planuojamus darbus. Metų gale 3 seminarai buvo skirti biudžetinių temų ataskaitoms.

Seminarai buvo lankomi gana gerai. Visuose seminaruose dalyvavo A.Kupliauskienė, V.Tutlys ir R.Karpuškienė. Daugiausiai seminarų praleido S.Kučas – 14, J.Tamulienė – 13, V.Jonauskas – 12, R.Kivilšienė – 8, G.Gaigalas – 7.

Š.Masys puikiai išlaikė doktorantūros studijų egzaminą „Kietųjų kūnų fizika“, o L.Radžiūtė – „Analizinių skaičiavimų metodai naudojant kompiuterinės algebros sistemas“ egzaminą.

Kvalifikacijos kėlimo kursuose „Trumpalaikių mokymų programa, skirta lyčių lygybei moksle skatinti“ (2012 04 26) dalyvavo A.Kupliauskienė ir J.Tamulienė. Jos gavo sertifikatus. J. Tamulienė tobulinosi seminare „Verslo pradžios modeliavimas-small business“, kvalifikacijos kėlimo kursuose „Paraiškų rengimas“, seminare „Žinių ir žinojimo valdymas“. Š.Masys mokėsi tarptautinėje vasaros mokykloje „Ab initio Modelling in Solid State Chemistry“, kuri vyko rugsėjo 17 – 21 d. Londone, Jungtinėje Karalystėje. R.Kisielius dalyvavo tarptautinėje konferencijoje SEMWO2012 "Kosmoso ekonomika daugiapoliariniame pasaulyje". R.Kivilšienė baigė 96 val. Kvalifikacijos kėlimo kursus mokslo populiarinimo srityje ir gavo sertifikatą.

1.

7. Pedagoginė veikla

Skyriaus darbuotojai vadovavo doktorantams, buvo doktorantų egzaminų komisijų nariais ir studentų kursinių bei baigiamųjų darbų vadovais.

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

G.Gaigalas buvo dviejų (D.Kaškelytės ir V.Juknos) VU FF ir vienos (S.Verdebout) ULB Belgijoje daktaro disertacijų gynimo tarybų nariu, LEU valstybinių egzaminų komisijos bei magistrų ir bakalaurų darbų gynimo tarybos nariu, skaitė 2 kursus po 4 kreditus LEU.

V.Jonauskas vadovavo VU FF studentų E.Bučio, T.Šemetulskio ir A.Prancikevičiaus bakalauro baigiamiesiems darbams. Jis skaitė „Kvantinės mechanikos“ paskaitas ir vedė pratybas LEU.

A.Tamulis vadovavo A.Pavilionio (VU GMF), M.Purlio (VU GMF), J.Serbentos (VU FF), K.Plaušinaičio (VU FF) ir L.Berteškos (VU FF) kursiniams darbams.

A.Kupliauskienė vadovavo G. Kerevičiaus (VU FF), J. Tamulienė - L.Baliulytės bakalauro ir kursiniams darbams.

P.Bogdanovičius skaitė paskaitas kandidatams į Lietuvos tarptautinės fizikos olimpiados komandą ir jos nariams, mokyklos „Fizikos olimpas“ moksleivams bei visus mokslo metus dirbo su keliais gabiais moksleiviais.

G.Merkelis buvo doktorantūros egzaminų komisijoje.

8. Dalyvavimas leidybinėje veikloje

R.Karazija dalyvavo „Lietuvos fizikos žurnalo“ leidime kaip redkolegijos narys. G. Gaigalas kartu su V.Jonausku paruošė mokymo priemonę studentams „Atomo ir branduolio fizikos uždavinynas: mokymo priemonė“ (Vilnius: Vilniaus pedagoginio universiteto leidykla, 2012, 86 p.). A.Kynienė buvo 3 mokymo priemonių moksleiviams bendraautorė: J.Gutauskaitė, A.Kynienė ir kt.. „Spektras-10“, vadovėlis, II dalis (2012); „Spektras-10“, užduočių sąsiuviniai, I-II dalis (2012); O.Gaubienė, O.Kavaliauskas, A.Kynienė, „Fizikos diferencijuotos užduotys 9 klasei (Briedis, 2012, 80 p.).

9. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje.

Lyginant su 2011 m., šiais metais mažiau skyriaus darbuotojai 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 Visuotinės lietuvių enciklopedijos recenzentas (recenzuoti 29 str.), LEU Fizinių ir technologijos mokslų srities konkursų ir atestacijos komisijos narys, MA Matematikos, fizikos ir chemijos skyriaus biuro narys, LMA jaunųjų mokslininkų stipendijai gauti paraiškų vertinimo komisijos narys, Instituto tarybos narys.

G.Gaigalas yra Studijų kokybės vertinimo centro (SKVC) ekspertų, vertinančių fizikos krypties studijų programas aukštosiose mokyklose, grupės narys, Vilniaus pedagoginio universiteto Senato narys, LEU valstybinių egzaminų komisijos narys, VPU baigiamųjų magistrinių ir bakalauro darbų gynimo tarybos narys, instituto 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 seminaro sekretorius.

A.Kynienė buvo Lietuvos fizikos mokytojų asociacijos Vilniaus skyriaus valdybos pirmininkė.

R.Kisielius pagelbėjo skyriaus darbuotojams iškilus kompiuterių problemoms, buvo autorinių darbų priėmimo komisijos narys.

A.Kupliauskienė buvo ATS vedėja, Europos Komisijos IRSES projektų vertinimo ekspertė, Asociacijos „BASNET forumas“ valdybos pirmininkė, VU TFAI Skatinimo komisijos pirmininkė, paruošė ir įrišo ATS 2011 m. skyriaus darbuotojų publikacijas, instituto tarybos narė, VU TFAI interneto svetainės redakcinės komisijos pirmininkė.

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

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

A.Tamulis dirbo Europos Komisijos eksperto darbą, numatant tolimesnes gaires fondui: Future and Emerging Technologies<http://cordis.europa.eu/fp7/ict/programme/fet_en.html>.

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 2 mokslo populiarinimo straipsnius, perskaitė 13 paskaitų. Tai daug mažiau negu praėjusiais metais. Labiausiai pasižymėjo R.Karazija, kuris parašė 1 straipsnį ir perskaitė 10 paskaitų bei kartą kalbėjo per „Žinių radiją“.

11. Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai

2012 m. skyriaus darbuotojai 17 kartų buvo išvykę į užsienį. Komandiruočių sąrašas pridedamas. G.Gaigalas buvo išvykęs 6 kartus, P.Bogdanovičius ir J.Tamulienė – po 3. Skyriuje lankėsi 6 svečiai iš užsienio: prof. Gary J. Ferland iš JAV (Kentucky universitetas), prof. P.Jonsson iš Švedijos (malmės universitetas), prof. M.Godefroid iš Belgijos (ULB universitetas), prof. J.Bieron iš Lenkijos (Jogailos universitetas), C.Naze iš Belgijos (ULB universitetas) ir S.Verdebout iš Belgijos (ULB universitetas).

12. Darbuotojų kvalifikacijos, pareigų ir skaičiaus pasikeitimai.

2012 m. gruodžio mėn. 20 d. skyriuje dirbo 20 darbuotojų (sąrašas pridedamas): 3 vyriausieji mokslo darbuotojai (iš jų 2 po 0,25 etato), vienas afiliuotasis vyriausiasis mokslo darbuotojas, 8 vyresnieji mokslo darbuotojai (iš jų vienas 0,25 etato ir vienas puse etato), 3 mokslo darbuotojai (iš jų du po 0,5 etato), 3 jaunesnieji mokslo darbuotojai (0,5 ir 2 po 0,25 etato), 1 inžinierius puse etato. Skyriuje yra 3 doktorantai.

P.Bogdanovičiui kadencija buvo pratęsta trejiems metams, G.Gaigalas išrinktas vyriausiojo mokslo darbuotojo pareigoms, o R.Karpuškienė, G.Merkelis ir R.Kisielius perrinkti vyr.m.d. pareigoms. Skyrių paliko V.Tutlys, nes išėjo į pensiją. Į darbą buvo priimti jaunesnieji mokslo darbuotojai P.Rynkun ir A.Alkauskas, mokant jiems atlyginimą iš projektinių lėšų. P.Bogdanovičius, G.Gaigalas, V.Jonauskas, R.Karpuškienė, A.Kynienė, R.Kisielius, S.Kučas, A.Kupliauskienė, Š.Masys ir G.Merkelis dalimi etato pradėjo dirbti ES struktūrinių fondų dotacijos projektuose.

13. Įsigyti nauji įrenginiai, kompiuteriai ir kiti prietaisai.

2012 m. A.Tamulis iš LMT studentų moksliniams tyrimams skirtų lėšų įsigijo stacionarų ir nešiojamą kompiuterius, du nepertraukiamo maitinimo šaltinius, monitorių ir maitinimo bloką serveriui. 449 kambario darbuotojams nupirkti 2 komplektai dažų spalvotam spausdintuvui už 1200 Lt biudžetinių lėšų. P.Bogdanovičius nusipirko dažų kasetes jo kambaryje esančiam spalvotam spausdintuvui už savo asmeninius pinigus.

14. Kiti paminėtini darbai

Kvantinės chemijos paketu CRYSTAL09 atlikti perovskitinio SrRuO₃ kristalo įvairių fazių geometrijos optimizavimo bei elastinių savybių įvertinimo uždaviniai tam taikant tiek įprastinius, tiek modifikuotus tankio funkcionalo artinius. Gauti rezultatai praplečia žinias apie SrRuO₃ elastines savybes, be to, leidžia pažvelgti į tankio funkcionalo artinių modifikavimo niuansus.

G.Gaigalas paruošė „Dotacija mokslui“ projekto paraišką. Paraiškos numeris VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-002.

P.Bogdanovičius gavo LR prezidentės padėkos raštą už vadovavimą Lietuvos komandai Tarptautinėje fizikos olimpiadoje.

A.Kynienė parengė informaciją apie Z.Rudziką VU TFAI internetinei svetainei.

Kaip ir kiekvienais metais J.Tamulienė papuošė instituto patalpas Kalėdoms ir Naujiesiems Metams.

Šiais metais skyriaus darbuotojų užimamos patalpos padidėjo vienu kambariu. G.Gaigalui buvo duoti du atskiri kambariai, kuriuose dirba jis pats, doktorantė ir 2 projekte įdarbinti jaunesnieji mokslo darbuotojai.

16. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai.

Dalies skyriaus darbuotojų perkraustymas į trečią aukštą sukelia naudojimosi spausdintuvu problemų. Iki šiol spausdinimui buvo naudojimas 445a kambaryje esantis tinklinis spausdintuvas, kas labai taupė instituto pinigus. Dabar G.Gaigalas ir jo darbuotojai turi vaikščioti į ketvirtą aukštą. R.Kisielius spausdina nuosavu iš namų atsineštu spausdintuvu. Reikėtų instituto administracijai rasti būdų optimizuoti spausdinimą trečiame aukšte, nes kai kurių darbuotojų noras turėti spausdintuvą savo kambaryje tėra nusikalstamas instituto pinigų švaistymas. Ta pati problema su kopijuokliu bei skeneriu. ATS duotas kopijuoklis labai prastos kokybės, o skenerio neturime visai.

Seminarams skirtas 433 kamb. galėtų būti geriau sutvarkytas, kad visi dalyviai galėtų sėdėti veidu į sieną, ant kurios projektuojamas vaizdas. Tam trukdo didelis stalas. 432 sale galime naudotis labai retai.

Blogas VU buhalterijos darbas, su kuriuo tenka susidurti vadovaujant projektams. Nepraneša arba visai nepastebi, kai ateina projekto pinigai. Tenka prašyti partnerių, kad iš anksto informuotų apie pervedamus pinigus. Labai vėluoja pajamų ir išlaidų įvedimas į VU finansų svetainę, kurioje projekto vadovas pasitikrina projekto finansus.

Yra problemų su pirkiniais. Neaišku, kodėl laimi VU skelbiamus konkursus kompiuterinei technikai pirkti tiekėjai, kurių kainos apie 20-30 % didesnės už daugelio Vilniaus kompiuterinės technikos parduotuvių kainas. Pavyzdžiui, su „Novakopa“ 2012.12.12 sudarytoje sutartyje spausdintuvams pirkti nėra nei vieno nespaltoto tinklinio lazerinio spausdintuvo. Kitų kainos fantastiškai didelės, todėl jų pirkimas būtų nusikalstamas Lietuvos mokesčių mokėtojų pinigų švaistymas. Susidaro įspūdis, kad atsakingi už viešuosius pirkimus VU asmenys patys nesupranta, ko reikia, ir prieš pateikdami paraišką nesikonsultuoja su būsimais vartotojais.

16. Mokslinė produkcija.

Skyriaus darbuotojams 2012 metai nėra derlingi. Atspausdinta 16 straipsnių ISI sąrašo žurnaluose (pernai buvo 14) ir 6 straipsniai kituose leidiniuose., t.y. beveik po vieną straipsnį skyriaus mokslo darbuotojui. Jeigu skaičiuosime užimtais biudžeto etatais bus daugiau nei po vieną ISI straipsnį. Atspausdinta 33 pranešimų konferencijose tezės.

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* – Aggregate 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 24,12 taško. 2011 metais buvo apie 12,86. Deja, net 8 skyriaus darbuotojai šiais metais ISI straipsnių neturi.

Visų publikacijų sąrašai pridedami.

UŽSIENIO KOMANDIRUOTĖS 2012 m.

A. Kupliauskienė	vasario 20–23	Belgija
G.Gaigalas	Vasario 6-13	Belgija
G.Gaigalas	Kovo 30 – balandžio 5	Lenkija
G.Gaigalas	Birželio 11-15	Švedija
G.Gaigalas	Regėsėjo 30 – spalio 7	JAV
G.Gaigalas	Spalio 15-19	Belgija
G.Gaigalas	Gruodžio 9-15	Lenkija
Š.Masys	Birželio 10-4	Čekija
Š.Masys	Rugsėjo 17-21	Didžioji Britanija
V.Jonauskas	Rugsėjo 30 – spalio 4	JAV
R.Juršėnas	Lapkričio 12 – gruodžio 2	JAV
P.Bogdanovičius	Balandžio 25-28	Didžioji Britanija
P.Bogdanovičius	Liepos 14-24	Estija
P.Bogdanovičius	Rugsėjo 29 – spalio 6	JAV
J.Tamulienė	Gegužės 6-8	Latvija
J.Tamulienė	Liepos 1 – rugpjūčio 6	Olandija
J.Tamulienė	Spalio 5-9	Ispanija

Atomo teorijos skyriaus darbuotojų 2012 m. gruodžio 20 d.

sąrašas

Eil. Nr.	Pareigos, pavardė, vardas	
1	Vyriaus.m.d. Bogdanovičius Pavelas	1,5 etato nuo 09.27
2	Vyriaus.m.d. Gaigalas Gediminas	0,75 etato nuo 09.27
3	Vyriaus.m.d. Karazija Romualdas	Nuo 06.01 asocijuotas
4	Vyriaus.m.d. Kupliauskienė Alicija	1,25 etato nuo 09.27
5	Vyr.m.d. Jonauskas Valdas	1,5 etato nuo 09.27
6	Vyr.m.d. Kisielius Romualdas	1,5 etato nuo 09.27
7	Vyr.m.d. Kučas Sigitas	1,25 etato nuo 09.27
8	Vyr.m.d. Merkelis Gintaras	1,5 etato nuo 09.27
9	Vyr.m.d. Tutlys Vladas	nuo 06-01 nedirba
10	Vyr.m.d. Karpuškienė Rasa	1,5 etato nuo 09.27
11	Vyr.m.d. Kivilšienė Rasa	0,5 etato
12	Vyr.m.d. Tamulis Arvydas	1,0 etato
13	Vyr.m.d. Tamulienė Jelena	1,0 etato
14	m.d. Juršėnas Rytis	nuo 03.05 0,5 etato
15	m.d. Kynienė Aušra	1,25 etato nuo 09.27
16	m.d. Momkauskaitė Alina	1,0 etato
17	j.m.d. Šarūnas Masys	1,0 etato nuo 09.27
18	Inž. Gintaras Kerevičius	0,5 etato
19	Adolfas Šliogeris	Doktorantas, nuo 10.01 akademiniame atostogose
20	j.m.d. Pavelas Rynkun	0,25 j.m.d. nuo 09.27
21	j.m.d. Andrius Alkauskas	0,25 j.m.d. nuo 09.27
22	Laima Radžiūtė	doktorantė
23	Š.Mikolaitis	0,5 etato
24	G.Valiauga	0,5 etato

ATS darbuotojų publikacijų 2012 m. 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)	Taškai (AIV)
G.Gaigalas	8 (0, 1)	8,659
A.Tamulienė	3 (0, 4)	2.797
S.Kučas	2 (0, 0)	2.455
P.Bogdanovičius	1 (0, 0)	1.768
R.Kisielius	1 (0, 0)	1.768
A.Kupliauskienė	1 (0, 1)	1.320
R.Karazija	1 (1, 0)	1.276
A.Momkauskaitė	1 (0, 0)	1.276
V.Jonauskas	1 (0, 1)	1.179
A.Tamulis	2 (0, 0)	0.902
A.Šliogeris	0(0,2)	
R.Juršėnas	0(0,1)	
R.Karpuškienė		
R.Kivilšienė	0(0,1)	
A.Kynienė		
Š.Masys	0(0,1)	
G.Merkelis	0(0,1)	
G.Kerevičius		

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

NI – užsienio institucijų skaičius +1

NA – bendraautorių skaičius

IF – Impact Factor

AIF – Agregate Impact Factor