

VU TFAI Atomo teorijos skyriaus

2013 m. ataskaita

2013 m. gruodžio 19 d. skyriuje dirbo 18 darbuotojų: 3 vyriausieji, 6 vyresnieji, 3 mokslo, 4 jaunesnieji mokslo darbuotojai (iš jų 1 įdarbintas projektuose) ir 2 technikai. Jie užėmė 13,5 iš biudžeto finansuojamo etato ir 6,25 iš projektų lėšų finansuojamo etato. Taip pat skyriuje buvo vienas afiliuotasis vyriausiasis mokslo darbuotojas ir 1 doktorantė. Jie vykdė 14 projektų (3 biudžetines temas, 1 FP7, 4 Lietuvos institucijų remiamus ir 6 tarptautinius, kurie pinigų institutui neatnešė) ir uždirbo per 1230730 tūkst. Lt (EURATOM/LEI – 14127 EUR (48778 Lt) iš Europos Komisijos ir 7754 Lt iš Lietuvos biudžeto per MITA; 2 ES Struktūrinių fondų dotacijos projektai – 1174201 Lt) . Paskelbta spaudoje 32 moksliniai straipsniai: 24 ISI sąrašo žurnaluose, 5 ISI sąrašo leidiniuose ir 3 kituose leidiniuose, 2 knygų skyriai ir vadovėlis moksleiviams. Atspausdintos 45 pranešimų konferencijose tezės bei perskaityti ar pristatyti 55 pranešimai konferencijose ir kituose renginiuose. Paskelbti 4 mokslo populiarinimo straipsniai ir vienos knygos vertimas. Perskaityta 14 mokslo populiarinimo paskaitų visuomenei. Š. Masys sėkmingai baigė doktorantūrą.

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: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2013 m. suskaičiuoti energijos lygmenys ir sužadinių elektronais stiprumai naudojant tris skirtingus reliatyvistinius R-matricos metodus: Dirako-Foko, kvazireliatyvistinį bei reliatyvistinių integralų analogus kvazireliatyvistinėje R-matricos programoje. Skaičiavimai atlikti W^{45+} jono $n = 4$ lygmenims. Dirako-Foko R-matricos metodu gautos vertės buvo priimtos kaip atskaitos taškas palyginimui su kitais nagrinėtais metodais. Parodyta, kad naudojant reliatyvistinių integralų analogus kvazireliatyvistinėje R-matricos programoje galima atsižvelgti į tiesioginius ir netiesioginius reliatyvistinius efektus, kurie automatiškai yra įtraukiami Dirako-Foko artinio atveju.

Kvantinės chemijos paketu CRYSTAL09 modeliuotas SrO, Ru ir O₂ vakansijų suformavimas SrRuO₃ kristalinėje struktūroje tankio funkcionalo teorijos artinio rėmuose. Gauti rezultatai gerai dera su eksperimentiniais tyrimais ir leidžia pateikti išvalgų apie elektronų koreliacijos stiprio padidėjimą šiame perovskitiniame kristale.

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.

2013 m. tyrimai parodė, kad nėra būtina ortonormuoti visą orbitalių bazę iš karto, o suskaldžius į keletą mažesnių skaičiavimų juos galima leisti lygiagrečiai. Kiekviename skaičiavime nustatoma dalinė koreliacinė funkcija (PCF), kuri įskaito specifinius koreliacinius efektus. Ši funkcija sukurama iš ypač lokalizuotų orbitalių rinkinio ir pridėjama prie nulinės eilės "multireference" (MR) funkcijos taip sukuriant pilną banginę funkciją. PCF-jos plėtimosi

koeficientai yra nustatomi sprendžiant mažo dydžio tikrinių verčių uždavinį. Sąveikos ir persiklojimo matricos suskaičiuojamos naudojant biortogonalios transformacijos metodiką. Šis naujas metodas, vadinamas dalinių koreliacinių funkcijų sąveika (PCFI), greitai konverguoja atitinkamose orbitalių bazėse ir pilnutinė energija yra žemesnė nei atliekant įprastus MCHF ir CI skaičiavimus. Be to, PCFI metodas yra labai paslankus kai siekiama išskaityti skirtingus elektronų koreliacinius efektus. Fokusuodamiesi ties neutraliu ličio atomu ir priskirdami PCF-jai viengubus sužadinius iš kamieno, parodėme, kad sukinio - ir orbitalės-polarizacijos efektus galima labai efektyviai išskaityti. Šie efektai labai pagerina konvergenciją, skaičiuojant hipersmulkiosios struktūros parametrus, lyginant su MCHF skaičiavimais paremtais viena ortogonalinių radialiųjų orbitalių baze. Atsižvelgiant į tikslią vertę, maišymosi koeficientų apribojimas veda prie mažų nuokrypių, skaičiuojant hipersmulkiają struktūrą, izotopinį poslinkį ir šuolių tikimybes. Ekstremaliai redukuojant kiekvieną PCF-ją pvz. į vieną CSF-ją su jos nuosavomis orbitalių bazėmis duoda neortogonalų CI artinį. Yra pateikta keletas šio metodo perspektyvų .

Visiems fluoro izoelektronės sekos jonams tarp Si VI ir W LXVI, naudojantis reliatyvistiniu konfigūracijų sąveikos metodu, buvo apskaičiuotos energijos ir E1, M1, E2 šuolių tikimybės ($1s^2$) $2s^2$ $2p^5$ ir $2s2p^6$ konfigūracijų būsenoms. Valentiniai, kamieno-valentiniai ir kamieno-kamieno koreliaciniai efektai buvo įtraukti atliekant viengubus-dvigubus sužadinius ir taip didinant virtualių orbitalių bazę. Atlikti elektrinio dipolinio momento (EDM) tyrimai Ra, Hg, Yb, Xe ir Rn. Iširta neigiamų jonų energijos spektro skaičiavimo metodika.

1.3. „Sudėtingų atomų ir jų darinių spektrinių charakteristikų tyrimas“ (2012-2016 m.), vadovė vyriaus.m.d. dr. A. Kupliauskienė, vykdytojai: prof., habil. dr. vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, afiliuotasis vyriaus.m.d. prof., habil. dr., R. Karazija, vyr.m.d. dr. S. Kučas, vyr.m.d. dr. R. Karpuškievė, vyr.m.d. vyr.m.d. dr. G. Merkelis, vyr.m.d. dr. A. Tamulis, vyr.m.d. dr. J. Tamulienė, m.d. dr. R. Juršėnas, m.d. dr. A. Momkauskaitė, j.m.d. R. Kivilšienė, techn. G. Kerevičius, doktorantas A. Šliogeris. Priskiriamų publikacijų skaičius: 7 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2013 m. bendrųjų charakteristikų algebrinių išraiškų panaudojimas koreliaciniams efektams atomuose apibūdinti iliustruotas skaičiavimų rezultatais svarbiems konfigūracijų maišymosi atvejams: konfigūracijoms su simetrišku simetrijos pasikeitimu, s ir d konfigūracijų kompleksui bei pagrindinėms atomų konfigūracijoms. Parodyta, kad šios charakteristikos gali būti efektyviai naudojamos banginių funkcijų bazei parinkti bei konfigūracijų maišymosi dėsningumams izoelektronėse ir izonuklonėse sekose tirti. Parašyta programa banginių funkcijų bazei parinkti.

Atliktas daugiakrūvių jonų sužadintų konfigūracijų $4p^5 4d^{N+1}$ ir $4p^6 4d^{N-1} 4f$ metastabilių lygmenų gyvavimo trukmių tyrimas. Gyvavimo trukmės skaičiuotos kvazireliatyvistiniame artinyje, neįskaitant koreliacinių efektų, izoelektroninėse sekose ($Z=50\div 92$) visoms konfigūracijoms $4d^N$, kai $N=1\div 10$. Nustatyta, kad nagrinėjant tokio tipo lygmenų gyvavimo trukmes, būtina išskaityti elektrinių oktopolinių (E3) ir magnetinių kvadrupolinių (M2) šuolių į pagrindinę konfigūraciją tikimybes, nors tradiciškai manoma, kad metastabilių lygmenų gyvavimo trukmes lemia elektrinių kvadrupolinių (E2) ir magnetinių dipolinių (M1) šuolių tikimybės tarp sužadintos konfigūracijos lygmenų.

Atlikta Rb atomo $4p^5 nln'l'$ LSJ autojonizacinių būsenų teorinė klasifikacija ir 30 eV energijos elektronais sužadinto eksperimentinio Auger elektronų spektro identifikacija. Pirmą kartą apskaičiuoti iš Rb atomo autojonizacinių būsenų išspinduliuotų Ožė elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai. Aptikta, kad autojonizacinių būsenų polarizacija (nusakoma šių būsenų rikiavimo parametru vertėmis) gali stipriai įtakoti tiek teorinį tiek eksperimentiškai

išmatuotą intensyvumų spektrą, priklausomai nuo to, koku poliniu kampu sklaidos (sužadavimo) plokštumos atžvilgiu spektras matuotas.

Tiriant asparagino monohidrato fragmentaciją, nustatyta kokie fragmentai ir koku būdu susidaro dėl lėtų elektronų poveikio. Teoriškai iširta galimybė $C_{59}X$ ($X=Li, Na, Mn, Be$) hetero fullerenus naudoti saulės elementų gamyboje. Apskaičiuoti C_{60} spektrai, kurie palyginti su tarpžvaigždinės medžiagos spektrais. Pagrįsta hipotezė, kad tarpžvaigždinėje medžiagoje gali būti įvairios simetrijos fullerenu. Parengta metodika ir programinis paketas simbolinio programavimo kalba, kurie leidžia generuoti efektinio viendalelio šuolio operatoriaus išraiškas trečios eilės Rayleigh-Schrodinger trikdžių teorijos artinyje.

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. A. Kupliauskienė, vykdytojai: vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, yriaus.m.d. G. Gaigalas, vyr.m.d. S. Kučas, vyr.m.d. R. Kisielius, vyr.m.d. R. Karpuškienė, m.d. A. Kynienė, m.d. A. Momkauskaitė, j.m.d. Š. Masys.

2013 m. vykdant projektą atlikti volframo jonų spektrinių charakteristikų bei dvielektroninės rekombinacijos koeficientų skaičiavimai. Išnagrinti W^{37+} jonų $4d^N, 4d^{N-1}5s$ energijos spektrai ir sužadavimo elektronais skerspjūviai bei vidutinių charakteristikų metodo tinkamumas apskaičiuotų charakteristikų tikslumui įvertinti.

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, E. Stonkutė, G. Valiauga. Priskiriamų publikacijų skaičius: 4 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2013 m. apskaičiuoti Rb atomo autojonizacinių būsenų sužadavimo iš pagrindinės būsenos skerspjūviai, sužadavimo stipriai ir spartos koeficientai. Šių dydžių skaičiavimai atlikti sužadavimui į $4p^5nln'l'$ ($nl=5s,5p,4d$; $n'l'=5s, \dots, 7s$; $5p, \dots, 7p$; $4d,5d$) konfigūracijų būsenas. Sukurta programinė įranga energijos ir autojonizacijos tikimybių parametrms, sužadavimo ir jonizacijos skerspjūviams pateikti duomenų bazei tinkamu unifikuotu formatu. Gauti duomenys paruošti talpinimui kuriamoje ADAMANT duomenų bazėje. Atliekamas išsamus rodžio isoelektroninės sekos (pagrindinė konfigūracija $4d^9$) sužadintų metastabilių lygmenų gyvavimo trukmių tyrimas. Jau yra suskaičiuotos gyvavimo trukmės kvazirelatyvistinių radialiųjų orbitalių bazėje iki $n=5$ ir $l=4$ skirtingais artiniais, t.y atrenkant pataisines konfigūracijas su skirtingais atrankos parametrais, palaiptinui juos mažinant. Tokiu būdu siekiama nustatyti, kaip skirtingas koreliacinių efektų įskaitymas keičia elektrinių oktopolinių ir magnetinių kvadrupolinių šuolių įtaką metastabilių lygmenų gyvavimo trukmėms.

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. Priskiriamų publikacijų skaičius: 3 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2013 m. vykdant šį projektą išnagrinėtas W^{25+} jono energijos lygmenų ir spinduliuojamųjų šuolių spektras Dirako-Foko artinyje. Atliktas spektro linijų modeliavimas taikant vainikinį artinį bei smūginį-radiacinį modelį. Ištirta radiacinio kaskado įtaka W^{25+} jonų spektrų formavimuisi EBIT plazmoje. Nagrinėti du radiacinio kaskado atvejai: jonams esant elektronų pluoštelio viduje bei pluoštelio išorėje. Parodyta, kad spinduliavimo spektrai šiais atvejais skiriasi. Išnagrinėtas spektras, atitinkantis radiacinį kaskadą pluoštelio išorėje, kai pradiniai lygmenų užimtumai gauti sprendžiant balanso lygtį. Radiacinis kaskadas jonams esant elektronų pluoštelio išorėje gali būti priežastimi, kodėl eksperimentiniame spektre 13-17 nm srityje stebimos tik kelios linijos.

Skaičiuoti W^{45+} jonų sužadavimo elektronais parametrai naudojant IPIRDW artėjimą. Nagrinėtas tiek tiesioginis sužadinimas, tiek sužadinimas per autojonizacinius W^{44+} jono lygmenis. Tuo tikslu Dirako-Foko-Sleterio artinyje ištirti W^{45+} ir W^{44+} jonų energijos lygmenys, radiaciniai šuoliai tarp šių lygmenų, taip pat autojonizaciniai šuoliai iš W^{44+} lygmenų į W^{45+} lygmenis.

3.3. MITA finansuojamas projektas „Europos branduolinės sintezės vystymo sutartis (EFDA 7BP)“, (2013 m., kartu su Lietuvos energetikos institutu), vadovė A.Kupliauskienė, vykdytojai: vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, 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, m.d. A.Momkauskaitė.

Atlikti kai kurių W jonų spektroskopinių parametru skaičiavimai ir jų tikslumo įvertinimai.

3.4. Studentų mokslinė praktika.

Lietuvos Mokslo taryba skyrė lėšas vieno studento mokslinei praktikai ir darbams finansuoti: VU studentas E. Juodsnukis (2012.07.01 - 2012.08.31, vadovas V.Jonauskas).

4. Kiti tarptautiniai projektai.

4.1. Dalyvavimas ERASMUS dėstytojų mainų programoje.

Pagal šią programą G.Gaigalas ir L. Radžiūtė dalyvavo 2013/2014 metų Erasmus dėstytojų mainų programoje su Jogailos vardo universitetu (Krokuva, Lenkija).

4.2. VISBY programos projektas „Atominių struktūrų skaičiavimai ir jų taikymas astronomijoje ir plazmos fizikoje (Computational atomic structure with applications to astronomy and plasma physics)“ (2010-2013 m., kartu su Švedijos, Olandijos, Lenkijos mokslininkais)

Remiantis reliatyvistinėmis banginėmis funkcijomis gautomis iš daugiakonfigūracinio Dirako, Hartrio ir Foko (MCDHF) ir konfigūracijų sąveikos skaičiavimų, E1, M1, E2, M2 šuolių tikimybės, svoriniai oscilatoriaus stipriai ir gyvavimo trukmės apskaičiuotos $(1s^2)2s^22p^4$, $2s2p^5$ ir $2p^6$ konfigūracijų būsenoms visiems deguonies izoelektronės sekos jonams tarp F II ir Kr XXIX. Valentiniai ir kamieno-valentiniai koreliaciniai efektai buvo įtraukti atliekant viengubus-dvigubus sužadinius iš “multireference” (SD-MR) norint padidinti virtualių orbitalių bazę. Apskaičiuotos

energijos lyginant su NIST duomenų baze daugeliu atveju skiriasi mažiau negu 600 cm^{-1} . Kai kuriems spektrams gauti žymiai didesni skirtumai, o rezultatai geriau sutampa su Edlén interpoliuotomis vertėmis (Edlén, B. 1983, *Phys. Scr.*, **28**, 51). Lygmenims, kuriems yra pateiktos eksperimentinės gyvavimo trukmės, sutapimas visiems jonams, išskyrus mažai jonizuotus, gavosi eksperimento paklaidų ribose.

Atsižvelgiant į prieš tai atliktus Charlotte Froese Fischer darbus, buvo plėtojami kompiuteriniai paketai, paremti daugiakonfigūraciniu metodu ir skirti atominių struktūrų skaičiavimams. Teorijos pagrindas remiasi konfigūracinių būsenos funkcijų bazių pasirinkimo ir išplėtimo metodika. Pristatyti energijų ir šuolių tikimybių skaičiavimai, bei įvertintas rezultatų tikslumas. Daugiakonfigūracinių metodų apribojimai yra aptarti ir parodyta kaip tuos apribojimus galima apeiti dalinant didelės apimties skaičiavimus į kelis mažesnius.

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.

4.4. COST TA1201 „Lytis, mokslas, technologijos ir aplinka“ (GenderSTE) (Gender, Science, Technology and Environment (GenderSTE)), 2012.10.31-2016.11.27, vadovė prof. Ines Sanchez de Madariaga (Ispanija), dalyvauja 33 šalys. Lietuvos atstovas vykdomajame komitete D. Šatkovskienė, pavaduojantis atstovas A. Kupliauskienė.

2013 m. dalyvauta organizuojant SAPGERIC konferenciją Vilniuje Lietuvos pirmininkavimo Europos Sąjungai proga 2013.11.21-22.

4.5. COST MP1208 „Inercinės išlaikymo sintezės fizikos ir mokslinės bendruomenės vystymas NIF (Nacionalinio uždegimo įrenginio) paleidimo laikotarpiu" (Developing the Physics and the Scientific community for Inertial Confinement Fusion at the time of NIF ignition) (2012-11-21 -2017-12-17, vadovas prof. D. Batani, dalyvauja 18 valstybių). Lietuvos atstovas vykdomajame komitete P. Bogdanovičius, pavaduojantis atstovas R. Kisielius.

Kadangi dalyvavimas šiame projekte buvo patvirtintas tik 2013 m. gale, darbai dar nėra pradėti.

4.6. COST CM1301 „Chemija elektronų indukuotai nano gamybai“ (Chemistry for Electron-Induced Nanofabrication (CELINA)) (2013-10-23 - 2017-10-22, vadovas prof. P.Swiderek, dalyvauja 31 valstybė). Lietuvos atstovas vykdomajame komitete J. Tamulienė.

Kadangi dalyvavimas šiame projekte buvo patvirtintas tik 2013 m., darbai dar nėra pradėti.

5. Moksliniai renginiai

R.Karazijos pastangomis rugsėjo 19 d. surengti eiliniai prof. A.Jucio skaitymai.

6. Seminarai ir kvalifikacijos kėlimas

2013 m. įvyko 28 (pernai 27) Atomo teorijos skyriaus seminarai. Metų pradžioje buvo svarstyti biudžetinių temų (V. Jonausko, G. Gaigalo, A. Kupliauskienės) ir asmeniniai darbuotojų

planai 2013 metams, bei ES Struktūrinių fondų finansuojamų P. Bogdanovičiaus ir V. Jonausko projektų užduotys 2013 m. Taip pat aptartas FP7 Euratom-LEI (vad. A. Kupliauskienė) projektas. Metų pabaigoje vyko biudžetinių temų ataskaitos už 2013 metus, A. Kupliauskienė, P. Bogdanovičius ir V. Jonauskas papasakojo apie savo vadovaujamų projektų atliktus tyrimus.

Seminaruose buvo svarstyta 11 spausdinti pateikiamų straipsnių: 3 straipsnius pristatė R. Juršėnas, A. Tamulis – 2, po vieną Š. Masys, R. Karazija, J. Tamulienė, P. Rynkun, P. Bogdanovičius, A. Alkauskas. Taip pat P. Rynkun papasakojo apie S. Verdebont ir kt. straipsnį.

Seminaruose išklaustytos ataskaitos už komandiruotes (G. Gaigalas 2 kartus, R. Juršėnas 3 kartus, A. Kupliauskienė, J. Tamulienė, V. Jonauskas, P. Bogdanovičius, G. Merkelis, R. Kisielius ir L. Radžiūtė – po vieną kartą). Seminaruose taip pat buvo svarstytos pranešimų nacionalinėje fizikos ir tarptautinėse konferencijose tezės. Du seminarai buvo skirti konkursuose dalyvaujančių ir atestuojamų darbuotojų pranešimams (m.d. A. Momkauskaitės ir j.m.d. (0.5 etato) R. Kivilšienės). A. Tamulis skaitė pranešimą dėl terminuotos darbo sutarties sudarymo. Visų pranešėjų kandidatūroms buvo pritarta.

Doktorantas Š. Masys atsiskaitė už VU TFAI ATS doktorantūros studijas bei pristatė savo disertacijos pirminį variantą.

Seminarai buvo lankomi gana gerai. Visuose (28) seminaruose dalyvavo ATS seminaro pirmininkė A. Kupliauskienė, mažiausiai seminare pasirodė G. Gaigalas (10 kartų). 15 kartų seminare dalyvavo J. Tamulienė. Visi kiti darbuotojai ir studentai dalyvavo nuo 20 iki 27 seminarų.

Keturi skyriaus darbuotojai kėlė savo kvalifikaciją stažuotėse užsienyje: G. Gaigalas – Japonijoje, R. Juršėnas – Vokietijoje, J. Tamulienė ir L. Radžiūtė – Lenkijoje.

Doktorantė L. Radžiūtė išlaikė „Teorinės atomų spektroskopijos“ ir „Optinės spektroskopijos“ egzaminus.

R. Kisielius tobulinosi tarptautinėse konferencijose „Kosmoso ekonomika daugiapoliariniame pasaulyje“ ir „Invest in Researchers“ Lietuvoje

J. Tamulienė dalyvavo AdVenture, InfoLaboratorija ir TP-Uni mokymuose.

7. Pedagoginė veikla

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

V. Jonauskas vadovavo doktorantui Š. Masiui, studento E. Juodsnukio vasaros mokslinei praktikai ir skaitė paskaitas TFAI doktorantams.

G. Gaigalas vadovavo doktorantei L. Radžiūtei ir dviem doktorantams iš LEU: P. Rynkun ir A. Alkauskui. Jis taip pat skaitė „Kvantinės molekulių teorijos“ paskaitas (4 kreditai) LEU pirmo kurso magistrantams, buvo LEU valstybinių egzaminų bei baigiamųjų magistrinių ir bakalauro darbų gynimo komisijų narys.

J. Tamulienė vadovavo VU GMF bakalauro studijų studentės L. Baliulytės baigiamajam darbui, skaitė 2 vadybos kursus VU MIF studentams, atnaujino jų sandus bei paruošė paraišką studentų mokslinei praktikai.

G. Merkelis skaitė paskaitas TFAI doktorantams bei buvo doktorantūros egzaminų komisijoje.

A. Kupliauskienė vadovavo G. Kerevičiaus (VU FF) magistro studijų kursiniams darbams.

P. Bogdanovičius skaitė paskaitas mokyklos „Fizikos Olimpas“ moksleiviams (14 val.), kandidatams į Lietuvos komandą TFO (16 val.), ruošiant Lietuvos komandą TFO (16 val.). Jis taip pat dirbo su keliais gabiais moksleiviais (~40 val.).

8. Dalyvavimas leidybinėje veikloje

R.Karazija dalyvavo „Lietuvos fizikos žurnalo“ ir „Journal of Atomic, Molecular, Condensate and Nano Physics“ leidime kaip redkolegijų narys. A. Kynienė su bendraautoriais paruošė mokymo priemonę dešimtos klasės moksleiviams. R. Kivilšienė redagavo, maketavo ir paruošė spaudai instituto leidinį „Lietuvos dangus 2014“, kartu su bendraautorėmis E. Makariūniene ir E. Šėgždiene baigia rengti Z. R. Rudziko bibliografiją. A. Momkauskaitė išvertė iš anglų kalbos ir išspausdino Lucy ir Stephen Hawking. Džordžas ir Didysis sproginimas (*George and the Big Bang*) knygą.

9. Dalyvavimas mokslo organizavimo, ekspertinėje ir visuomeninėje veikloje.

Lyginant su 2012 m., šiais metais skyriaus darbuotojai aktyviau 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 38 str.), projekto „Nacionalinės mokslo populiarinimo sistemos sukūrimas ir įgyvendinimas“ ekspertas, LEU Fizinių ir technologijos mokslų srities konkursų ir atestacijos komisijos narys, LMA jaunujų 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, Instituto tarybos narys.

V.Jonauskas buvo VU TFAI Tarybos sekretorius, instituto tarybos narys.

R.Juršėnas buvo ATS seminario sekretorius.

R. Kisielius pagalbėjo skyriaus darbuotojams iškilus kompiuterių problemoms, buvo autorinių darbų priėmimo komisijos narys, tarptautinio projekto EURATOM/LEI priežiūros komiteto narys, buvau TFAI atstovas susitikime su tarptautine ekspertų grupe dėl VU veiklos išorinio vertinimo.

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

A.Kupliauskienė buvo ATS vedėja, Asociacijos “BASNET forumas” valdybos pirminkė, VU TFAI Skatinimo komisijos pirmininkė, paruošė ir įrišo ATS 2012 m. skyriaus darbuotojų publikacijas, instituto tarybos narė, VU TFAI interneto svetainės redakcinės komisijos pirmininkė, Tarptautinės konferencijos SAPGERIC vietinio organizacinio komiteto narė.

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.

J.Tamulienė buvo LMS valdybos narė, LFD išdininkė, VU ir VU TFAI profesinių sąjungų 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 4 mokslo populiarinimo straipsnius, perskaitė 14 paskaitų. Labiausiai pasižymėjo R. Karazija, kuris parašė 2 straipsnius ir perskaitė 7 paskaitas. R. Kisielius parašė straipsnį enciklopedijai, R. Kivilšienė parašė vieną straipsnį. J. Tamulienė perskaitė 3, A. Kynienė – 2, P. Bogdanovičius ir A. Kupliauskienė – po vieną paskaitą. Kitų darbuotojų dalyvavimo mokslo populiarinimo veikloje pėdsakų neaptikta.

11. Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai

2013 m. 9 skyriaus darbuotojai 15 kartų buvo išvykę į užsienį. Komandiruočių sąrašas pridedamas. G. Gaigalas, R. Juršėnas, J. Tamulienė ir L. Radžiūtė buvo ilgalaikėse stažuotėse. G. Gaigalas buvo išvykęs 4 kartus, P. Bogdanovičius 3 kartus, kiti po vieną ar du kartus. Skyriuje lankėsi 3 svečiai iš užsienio: prof. Gary J. Ferland iš JAV (Kentucky universitetas), prof. J. Bieron iš Lenkijos (Jogailos universitetas) ir prof. J. Katriel iš Izraelio.

12. Darbuotojų kvalifikacijos, pareigų ir skaičiaus pasikeitimai

2013 m. gruodžio 19 d. skyriuje dirbo 18 darbuotojų: 3 vyriausieji, 6 vyresnieji, 3 mokslo, 4 jaunesnieji mokslo darbuotojai (iš jų 1 įdarbintas projekte) ir 2 technikai. Jie užėmė 13,5 iš biudžeto finansuojamo etato ir 6,25 iš projektų lėšų finansuojamo etato. Taip pat skyriuje buvo vienas afiliuotasis vyriausiasis mokslo darbuotojas ir 1 doktorantė. Darbuotojų sąrašas pridedamas.

A. Momkauskaitė laimėjo konkursą m.d. pareigoms penkerių metų laikotarpiui. R. Kivilšienė išrinkta jaunesniaja mokslo darbuotoja. Skyrių paliko A. Tamulis, nes išėjo į pensiją. Į darbą buvo priimti j.m.d. P. Rynkun ir technikas D. Stonys. Š. Masys sėkmingai baigė doktorantūrą ir pradėjo dirbti j.m.d. pareigose pilnu etatu.

R. Karazijai 2012 m. išėjus į pensiją ir tapus afiliuotuoju vyriausiuoju mokslo darbuotoju skyriuje nuo 4 iki 3 sumažėjo aukščiausios kvalifikacijos darbuotojų skaičius. Pastaraisiais metais labai gerų rezultatų yra pasiekęs V. Jonauskas, kuris atitinka visus kvalifikacinius reikalavimus, keliamus vyriausiesiems mokslo darbuotojams. Todėl, instituto administracija turėtų tarpininkauti, kad VU Rektorius 2014 m. paskelbtų konkursą vyriausiojo mokslo darbuotojo pareigoms užimti Atomo teorijos skyriuje.

13. Įsigyti nauji įrenginiai, kompiuteriai ir kiti prietaisai.

2013 m. reikšmingai pagerėjo turėti skaičiavimo technikos pajėgumai, nes buvo įsigyta galingų kompiuterių, serverių, stacionarių ir nešiojamų kompiuterių bei kitos technikos.

Iš instituto lėšų įsigytas skeneris už 258,75 Lt.

Iš projektų lėšų:

1. (VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-013) įsigyti 6 galingi kompiuteriai ir 2 monitoriai.
2. (VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-015) įsigytas planšetinis kompiuteris Nexus 7, skaičiavimo sistema, 2 stacionarūs kompiuteriai, 3 monitoriai, 4 vidiniai kietieji diskai, 4 išoriniai kietieji diskai, kietasis diskas serveriui, 3 nešiojami kompiuteriai ir 8 atmintukai.
3. (iš kitų projektų) įsigytas stacionarus kompiuteris, 2 planšetiniai kompiuteriai, elektroninė knyga, išorinis diskas, komutatorius, nešiojamas kompiuteris.

Visa skaičiavimo technika, įsigyta iš dotacijos projektų lėšų, skirta jų vykdymui. Nedalyvaujantys projektuose darbuotojai dirba su baigiančiais išiekvoti savo resursus senais

kompiuteriais. 2012 m. priimta doktorantė L. Radžiūtė dirba su savo asmeniniu kompiuteriu, nors institutas gauna papildomą finansavimą už doktorantus ir galėtų nupirkti stacionarų kompiuterį darbui.

14. Kiti paminėtini darbai

R. Kisielius gavo finansavimą (Visiting professor) dviems moksliniams vizitams Fudan universitete (Kinija) 2014 metams.

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

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

Straipsnis A. Borovik, A. Kupliauskiene, O. Zatsarinny. Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **46**, 215201 (2013) žurnalo redakcijos buvo atrinktas kaip vienas iš trijų geriausių 2013 m. 46 tomo 21 numerio straipsnių (<http://iopscience.iop.org/0953-4075/labtalk-article/55361>).

R. Juršėnas dalyvavo projekte Podoktorantūros stažuočių įgyvendinimas Lietuvoje“ (Nr. VP1-3.1-ŠMM-01-V-02-004) kaip mokslininkas stažuotojas Vilniaus Universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institute. Temos (vad. Dr. G. Juzeliūnas) pavadinimas „Sukinio-orbitos sąveika labai šaltų atomų dujose (SOS-AD)“. Pagrindiniai rezultatai: (1) Pirmą kartą teoriškai apskaičiuotas vienmačio labai šalto atomo su sukinio-orbitos sąveika spektras esant trumpo veikimo sutrikdymui. (2) Įrodyta, kad dvimačio šalto Fermi atomo su Rashba sukinio-orbitos sąveika surišta būseną, esant trumpo veikimo sutrikdymui, egzistuoja tik tada, kai masių centro impulsas yra nulinis. (3) Pasiūlyta ir įrodyta redukavimo teorema, kuri leidžia nustatyti kriterijų, pagal kurį dviejų separabilios Hilberto erdvės spektrinių operatorių spektras yra lygus atskirų spektrinių operatorių spektrų sumai; rezultatas pritaikytas tiriant Rashba Hamiltoniano spektrą. (4) Sukurtas analizinis metodas, leidžiantis trijų kūnų sistemą aprašanti Hamiltonianą užrašyti santykinų koordinatų atžvilgiu. Ši technika efektyvi tuo, kad gauto Hamiltoniano spektrą galima rasti analiziškai Hughes-Eckart nario tikslumu.

15. Bendradarbiavimas

G. Gaigalas palaiko labai plačius tarptautinius ryšius. Jis bendradarbiauja su JAV, Belgijos, Lenkijos, Švedijos mokslininkais, dalyvauja tarptautinės grupės „The International Collaboration on Computational Atomic Structure“ (internetinės svetainės adresas: <http://ddwap.mah.se/tsjoek/compas/>) mokslinėje veikloje. R. Kisielius bendradarbiauja su JAV mokslininkais iš Kentukio ir Pietų Karolinos universitetų. A. Kupliauskienė ir J. Tamulienė dirba kartu su Užgorodo eksperimentatoriais iš Ukrainos. J. Tamulienė palaiko mokslinius ryšius su Lenkijos mokslininkais. Skyriaus darbuotojai taip pat palaiko ryšius su Didžiosios Britanijos (Strtclyde, Culham, Belfastas, Londonas) ir Kinijos teoretikais.

16. Problemos, pasiūlymai ir pageidavimai administracijai.

2013 m. turėjome FP7 projekto EURATOM vietinį auditą už 2012 m. ir Europos Komisijos auditą už 2010-2011 metus. Pirmą kartą susidūrėme su problema, kai VU buhalterija neturi teisės pateikti informacijos netgi auditoriams apie projekto vykdytojų vidutinius valandinius atlygius bei iš visų projektų gautas išmokas. Teko gauti kiekvieno vykdytojo asmeninį sutikimą. Toks informacijos įslaptinimas sukuria palankias sąlygas neskaidriam projektinių lėšų panaudojimui.

Sukurtos labai nepalankios sąlygos aparatūrai įsigyti. Nuo 2005 m. skyriaus darbuotojai kolektyviai naudoja tinkliniu spausdintuvu HP Laser Jet P2055, kuris jau yra išnaudojęs visus savo resursus ir gali bet kada sugesti. Pradėjome rūpintis naujo spausdintuvo pirkimu. Pasirodo sudarytoje pirkimo sutartyje su konkursą laimėjusia firma visai nėra pigių tinklinių nespalvotų spausdintuvų, galinčių spausdinti tiek iš Microsoft, tiek iš Linux operacines sistemas naudojančių kompiuterių. Vietoje 1340 Lt kainuojančio spausdintuvo siūlo pirkti apie 5000 Lt kainuojančius spausdintuvus. Kadangi sąžinė neleido taip švaistyti Lietuvos biudžeto pinigus, spausdintuvo pirkimo atsisakėme.

Turime priekaištų VU pirkimų direkcijai dėl kompiuterinės įrangos pirkimų. Šiuo metu stengiamasi visus pirkimus vykdyti per konkursą laimėjusias organizacijas ar CPO. Tai labai riboja pasirinkimą ir mažiausiai 20% užkelia pirkinių kainą. Tuo tarpu pirkimų direkcija visai nesuinteresuota, kad mes mokėtume mažiau, nes mokama iš VU TFAI sąskaitos, o ne iš bendro VU biudžeto.

Didėjant skyriaus (o taip pat viso TFAI) turimų kompiuterių skaičiui, pradeda trūkti IP adresų naujiems kompiuteriams. Mūsų institutas turi tik 128 IP adresus, kuriuos dalinasi su biblioteka ir planetariumu. Būtinai reikia išplėsti adresų kiekį iki pilno komplekto (256 adresų). VU ITTC tam neprieštaruoja, o didžiausias kliuvinys yra atsakingo už kompiuterius darbuotojo nenoras padaryti visų institute veikiančių kompiuterių adresų pakeitimą.

Reikėtų iš pagrindų peržiūrėti ir sutvarkyti TFAI kompiuterinius tinklus. Šiuo metu institute praktiškai nėra žmogaus, kuris būtų už tai atsakingas.

Pageidautina, kad metų pradžioje kiekvieno darbuotojo publikacijų sąrašą, esantį TFAI svetainėje, Alina Momkauskaitė atnaujintų pagal metinėje ataskaitoje pateiktus duomenis.

16. Mokslinė produkcija.

Skyriaus darbuotojams 2013 metai labai derlingi. Jau seniai nėra buvę tokių gerų rezultatų. Atspausdint 32 straipsniai (2010 buvo 27, 2011 - 20, 2012 - 24). Jų tarpe 24 ISI sąrašo žurnaluose (2010 buvo 19, 2011 - 17, 2012 - 16), 5 kituose ISI sąrašo leidiniuose ir 3 straipsniai kituose leidiniuose. Jeigu skaičiuosime užimtais biudžeto etatais bus daugiau nei po 1,7 ISI straipsnio. Atspausdintos 45 pranešimų konferencijose tezės. Taip pat atspausdinti užsienio leidykloje 2 knygų skyriai.

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, 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 – bendra autorių skaičius, IF – Impact Factor, AIF – Agregate Impact Factor. Po to apskaičiuojami taškai AIV padauginant iš 3. Jeigu ISI

sąrašo žurnalo IF mažėnis 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 42.5 taško. 2012 metais buvo apie 24 taškus. Beveik visi syriaus darbuotojai šiais metais turi ISI straipsnių. Padalinus taškus iš įdarbintų žmonių skaičiaus gaunamas taškų vidurkis lygus apie 2.1.

Visų publikacijų sąrašai pridedami.

UŽSIENIO KOMANDIRUOTĖS 2013 m.

A. Kupliauskienė	Liepos 24-31	Kinija
G.Gaigalas	Kovo 18-29	Japonija
G.Gaigalas	Birželio 3-9	Lenkija
G.Gaigalas	Liepos 24-rugpjūčio 1	Kinija
G.Gaigalas	Regsjė 2– gruodžio 26	Japonija (stažuotė)
P.Bogdanovičius	rugpjūčio 5-10 d.d.	Belgija
P.Bogdanovičius	liepos 5-15 d.d.	Danija
P.Bogdanovičius	lapkričio 28 – gruodžio 6	Rusija
R.Juršėnas	Kovo 17-29	Vokietija (stažuotė)
R.Juršėnas	Birželio 23-29	Vokietija
V.Jonauskas	Rugpjūčio 4-10	Belgija
J.Tamulienė		Lenkija (stažuotė)
G.Merkelis	Birželio 23-29	Belgija
L.Radžiūtė	Rugpjūčio 9-12	Švedija
L.Radžiūtė	Liepos 2-spalio 2	Lenkija (stažuotė)

Atomo teorijos skyriaus darbuotojų 2013 m. gruodžio 19 d.

sąrašas

Eil. Nr.	Pareigos, pavardė, vardas	Etatai biudžetinis (projektinis)
1	Vyriaus.m.d. Bogdanovičius Pavelas	0,75 (0,75)
2	Vyriaus.m.d. Gaigalas Gediminas	0,75 (0,5)
3	Vyriaus.m.d. Karazija Romualdas	
4	Vyriaus.m.d. Kupliauskienė Alicija	1 (0,25)
5	Vyr.m.d. Jonauskas Valdas	0,75 (0,75)
6	Vyr.m.d. Kisielius Romualdas	0,5 (1)
7	Vyr.m.d. Kučas Sigitas	1 (0,25)
8	Vyr.m.d. Merkelis Gintaras	1 (0,5)
9	Vyr.m.d. Karpuškienė Rasa	1 (0,5)
10	Vyr.m.d. Tamulienė Jelena	1
11	m.d. Juršėnas Rytis	0,5 (1)
12	m.d. Kynienė Aušra	1 (0,25)
13	m.d. Momkauskaitė Alina	1
14	j.m.d. Kivilšienė Rasa	0,5
15	j.m.d. Šarūnas Masys	1 (0,5)
16	j.m.d. Pavelas Rynkun	0,75 (0,25)
17	Techn. Gintaras Kerevičius	0,5
18	Techn. Darius Stonys	0,5
19	j.m.d. Andrius Alkauskas	0 (0,25)
20	Laima Radžiūtė	doktorantė

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	10 (1, 0)	11.576
V.Jonauskas	7(1, 1)	5.424
Š.Masys	6 (0,0)	4.233
R.Kisielius	5 (0, 0)	3.989
R.Juršėnas	2 (0,0)	3.339
S.Kučas	2 (0, 1)	2.304
A.Kupliauskienė	2 (1, 2)	2.254
P.Bogdanovičius	2 (0, 0)	2.017
R.Karazija	1 (0,1)	1.855
A.Kynienė	3 (0,0)	1.724
R.Karpuškienė	1 (0,0)	1.118
G.Kerevičius	1 (0,0)	0.859
A.Tamulienė	1(3, 2)	0.512
A.Alkauskas	1 (0,0)	0.419
G.Merkelis	1 (0,0)	0.419
P.Rynkun	1 (0,0)	0.419
A.Momkauskaitė	0 (0, 1)	
L.Radžiūtė		
R.Kivilšienė		
D.Stonys		

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

NI – užsienio institucijų skaičius +1

NA – bendraautorių skaičius

IF – Impact Factor

AIF – Agregate Impact Factor