

VU Teorinės fizikos ir astronomijos instituto Atomo teorijos skyriaus 2011 m.  
publikacijų

## SĀRAŠAS

### Knygos ir leidiniai

1. 7th International Conference on Atomic and Molecular Data and their Applications – ICAMDATA-2010, Editors A.Bernotas, R.Karazija, Z. Rudzikas, AIP Conference Proceedings 1344, Melville, New York, 2011, 258 p.

### Išspausdinti straipsniai

#### Straipsniai ISI žurnalose

1. A. Tamulis, M. Grigalavicius, „The Emergence and Evolution of Life in a “Fatty Acid World” Based on Quantum Mechanics”. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, **41**, 51-71 (2011).
2. A. Tamulis, M. Grigalavicius, S. Krisciukaitis, G. Medzevicius, “Quantum Processes in 8-Oxo-Guanine-Ru(bipyridine)<sub>3</sub><sup>2+</sup> Photosynthetic Systems of Artificial Minimal Cells”, *Central European Journal of Physics*, **9**, 775-791 (2011).
3. R. Juršėnas, G. Merkeliš. Irreducible tensor form of three-particle operator for open-shell atoms, *Cent. Eur. J. Phys.*, **9**, 751-774 (2011).
4. A.Tamulis. Quantum Mechanical Investigations of Photosynthetic Systems of Artificial Minimal Cells Based on 8-Oxo-Guanine-Ru(bipyridine)<sub>3</sub><sup>2+</sup>, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, **8**, 624-636 (2011).
5. R.Karazija, A.Momkauskaitė, L.Remeikaitė-Bakšienė. Formation of narrow group of intense lines in the photoexcitation and emission spectra corresponding to 3s<sup>2</sup>3p<sup>N</sup>- (3s3p<sup>N+1</sup>+ 3s<sup>2</sup>3p<sup>N-1</sup>3d) transitions. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **44**, 035002 (10pp) (2011).
6. J.Li, Ch. Dong, P.Jonsson, G.Gaigalas. M<sub>F</sub>-dependent hyperfine induced transition rates in an external magnetic field for Be-like <sup>47</sup>Ti<sup>18+</sup>. *Phys. Lett. A*, **375**, 914-917 (2011).
7. G.Gaigalas, Z.Rudzikas, P.Rynkun, A.Alkauskas. Dependence of the probabilities of the electric-multipole electron transitions in W<sup>24+</sup>on multipolarity, *Phys. Rev. A*, **83**, 032509(13) (2011).
8. A.Borovik, A.Kupliauskienė, O.Zatsarinny. Excitation cross sections and spectroscopic classification of autoionizing levels in caesium atom, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **44**, 145203 (6pp) (2011).
9. P.Jonsson, P.Rynkun, G.Gaigalas. Energies, E1, M1, and E2 transition rates, hyperfine structures, and Lande g<sub>j</sub> factprs for states of the 2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, 2s2p<sup>3</sup>, and 2p<sup>4</sup> configurations in carbon-like ions between F IV and Ni XXIII, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **97**, 648-691 (2011).
10. E.Gaidamauskas, C.Naze, P.Rynkun, G.Gaigalas, P.Jonsson and M.Godefroid. Tensorial form and matrix elements of the relativistic nuclear recoil operator, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **44**, 175003 (11pp) (2011).
11. A.Kupliauskienė. Theoretical study of the 5p<sup>5</sup> nl n'l' autoionizing states of Cs. *Physica Scripta*, **84**, 045304(7pp) (2011).
12. P.Bogdanovich, O.Rancova, A.Stikonas. Quasirelativistic treatment of spectral characteristics of W<sup>37+</sup>. *Physica Scripta*, **83**, 065302( pp) (2011).

13. M. Franckevičius, J. Tamulienė, J. Babonas, I. Šimkienė, L. Rastenienė, A. Kulbickas, A. Iržikevičius, R. Vaišnoras. UV spectral features of poly(propylene imine) dendrimers. *Lith. J. Phys.*, **51**, 205-209 (2011).
14. I.V.Chernishova, J.E.Kontros, O.B.Shpenik, J.Tamuliene, M.L.Balevicius. Low-energy electron collisions with gas-phase Thymine molecule, *Materials Science (Medžiagotyra)*, **17**, 322-325 (2011).
15. V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija. Auger decay of 3p-ionized krypton, *Phys. Rev. A*, **84**, 0353415(7) (2011).
16. S.Kučas, R.Karazija. Closing of Coster-Kroning transitions and variation of fluorescence and Auger yields in isonuclear sequence of tungsten, *Lith. J. Phys.*, **51**, 198-204 (2011).
17. J.Tamuliene, L.G.Romanova, V.S.Vukstich, A.V.Snegursky. Electron-impact and thermal fragmentation of amino acid molecules: Mechanisms and structure of the molecules, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* (2011). doi:10.1016/j.nimb.2011.10.022.

### **Straipsniai kituose žurnaluose ir leidiniuose**

1. A.Bernotas, R.Karazija, Z.Rudzikas. ICAMDATA 2010 challenges. Preface, 7th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications ICAMDATA-2010, Book Series: AIP Conference Proceedings, V. 1344, p. 1-3 (2011).
2. G.Gaigalas, Z.Rudzikas. Challenges of Theoretical Spectroscopy of Heavy and Superheavy Atoms and Ions, 7th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications ICAMDATA-2010, Book Series: AIP Conference Proceedings, V. 1344, p. 42-59 (2011).
3. A.Tamulis, M.Grigelavičius. Quantum Mechanical Evolution of Fatty Acids World Life, Viva Origino, Vol. 38 (No. 2), pages 4-17 (2010).

### **Pranešimai ir santraukos**

#### Pranešimai, kurių santraukos buvo spausdinamos.

1. P.Jonsson, S.Gustafsson, J.Ekman, P.Bengtsson, P.Rynkun, G.Gaigalas. Transition rates in the B-, C-, N-, O-, and Ne-like sequences from relativistic CI calculations, 43<sup>rd</sup> Conference of EGAS, Freiburg, Switzerland, (June 28 – July 2, 2011), Conference Physics Abstracts, v. 35C, 142 (2011).
2. P.Rynkun, A.Alkauskas, G.Gaigalas, Z.R.Rudzikas, Peculiarities of spectroscopic properties of W<sup>8+</sup>, 43<sup>rd</sup> Conference of EGAS, Freiburg, Switzerland, (June 28 – July 2, 2011), Conference Physics Abstracts, v. 35C, 149 (2011).
3. S.Verdenbout, M.R.Godefroid, P.Rynkun, P.Jonsson, G.Gaigalas, C.Froese Fischer. Interaction of variational localized correlation functions for atomic properties, 43<sup>rd</sup> Conference of EGAS, Freiburg, Switzerland, (June 28 – July 2, 2011), Conference Physics Abstracts, v. 35C, 155 (2011).
4. S.Verdenbout, J.G.Li, C.Naze, M.R.Godefroid, P.Jonsson, G.Gaigalas. Atomic properties of neutral Ne using the LCFI method, 43<sup>rd</sup> Conference of EGAS, Freiburg, Switzerland, (June 28 – July 2, 2011), Conference Physics Abstracts, v. 35C, 156 (2011).
5. Š.Masys, S.Mickevičius, S.Grebinskij, V.Jonauskas. 43<sup>rd</sup> Conference of EGAS, Freiburg, Switzerland, (June 28 – July 2, 2011), Conference Physics Abstracts, v. 35C, 142 (2011).

6. A.Borovik, V.Ilyashevich, A.Kupliauskiene. Ejected-electron excitation functions of the  $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$  autoionizing states of rubidium atoms excited by 15 to 640 eV electrons, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, We007 (2011).
7. A.Borovik, V.Ilyashevich, A.Kupliauskiene. Autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, We010 (2011).
8. V.Jonauskas, A.Kynienė, R.Kisielius, Š.Masys. Theoretical study of W<sup>20+</sup> spectra formation in EBIT plasma. 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, We016 (2011).
9. V.Ilyashevich, A.Borovik, A.Kupliauskiene. Ejected-electron spectra of Rb atoms excited by low-energy electron impact, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, We021 (2011).
10. V.Jonauskas, Š.Masys, E.Bučius. Theoretical study pf lines from W<sup>13+</sup> spectra, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, We032 (2011).
11. A.Kupliauskienė. Theoretical study of the 5p<sup>6</sup>-core autoionizing states of Cs excited by electron impact, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, Fr005 (2011).
12. A.Borovik, A.Kupliauskienė, O.Zatsarinsky. New spectroscopic classification of lowest autoionizing levels in Cs atoms, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, Fr006 (2011).
13. V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija. Auger decay of 3p-ionized krypton, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts, Fr148 (2011).
14. S.Vedebout, P.Rynkun, A.-J.Gaigalas, C. Froses Fischer , M.R.Godefroid. Interaction of variational localised correlation functions for atomic properties of Be I, 27<sup>th</sup> ICPEAC, Belfast, UK, 27 July - 2 August, 2011, Abstracts (2011).
15. Š.Masys, V.Jonauskas, S.Mickevičius, S.Grebinskij. Plonujų BiFeO<sub>3</sub> plėvelių pusiau kamieninių elektronų būsenų eksperimentinis ir teorinis tyrimas. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 47.
16. A.Tamulis, M.Grigelavičius, J.Baltrusaitis. Kvantiniai mechaniniai riebalinių rugščių gyvybės evoliucijos tyrimai ir pritaikymai dibtinių minimalių ląstelių magnetiniam valdymui. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 150.
17. R.Juršėnas, G.Merkelis. Trijų kūnų Šredingerio lygties su elektrostatiniu potencialu analiziniai sprendiniai: surištos būsenos. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 203.
18. V.Jonauskas, Š.Masys. Teorinis W<sup>13+</sup> spektro susidarymo EBIT plazmoje tyrimas. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 226.
19. J.Tamulienė, A.Snegursky, L.G.Romanova, V.S.Vukstich. SH<sub>3</sub> katijono susidarymas dėl methionino molekulės poveiko lėtaisiais elektronais. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 232.
20. G.Kerevičius, A.Kupliauskienė. Ožė elektronų iš elektronais sužadintų Rb atomo autojonizacinių būsenų kampinis pasiskirstymas. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 233.
21. A.Kupliauskienė, K.Glemža, A.Borovik. Cs atomo žemiausiu autojonizacinių lygmenų spektroskopinės klasifikacijos patikslinimas. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 257.
22. L.Klimka, R.Kivilšienė. Fizika pijorų mokyklose XVII – XIX a. pirmoje pusėje. 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2011 m. spalio 6-8 d, p. 312.

23. A.Tamulis, M.Grigelavičius, J.Baltrušaitis. Qunatum mechanical evaluation of fatty acids world life and applications for magnetically controlled artificial minimal cells. COST Action CM0703 Meeting „ChembioGenesid 2011“, 27-30 October, 2011, Heraklion – Crete, p. 26-27.
24. R.Karazija, S.Kučas, V.Jonauskas, A.Momkauskaitė. Formation of a narrow group of intense lines in the emission and photoexcitation spectra. 3th International Conference on Current Developments in Atomic, Molecular, Optical and Nano Physics with Applications, New Delhi, 2011, p. 31-32.
25. S.Kučas, A.momkauskaitė. Auger cascades after the 1s photoionization in the astrophysically important light atoms and ions, 3th International Conference on Current Developments in Atomic, Molecular, Optical and Nano Physics with Applications, New Delhi, 2011, p. 136.
26. A.Šliogeris, J.Tamulienė, R.Vaišnoras, L.M.Balevičius.  $\text{Co}_6\text{O}_m$  ( $m=0-9$ ) optinių savybių tyrimas kvantinės chemijos metodais. Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai : pirmosios LMA Jaunuju mokslininkų konferencijos pranešimų santraukos, Vilnius, 2011.02.08 .
27. J.Tamulienė, L.G.Romanova, V.S.Vukstich, A.V.Snugursky. Electron-impact and thermal fragmentation of the amino acid molecules: mechanisms and structure of the molecules. CEPAS 2011 & CEAMPP 2011 : 5th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems : contributed papers and abstracts of invited lectures (2011).
28. J.Tamulienė, L.G.Romanova, V.S.Vukstich, R.V.Lutsiuk, A.V.Snugursky, M.L.Balevičius. Quantum-mechanical investigations of dissociative ionization of the methionine molecule. ERPOS 12 : Electronic and related properties of organic systems : 12th international conference, 11-13 July 2011, Vilnius, Lithuania. p. 147.
29. J.Tamulienė, M.L.Balevičius. What are ways to locate NH<sub>4</sub> cations in G-quartets? Theoretical study. Third International meeting on G-Quadruplex and G-assembly : Sorrento, Italy, June 28 - July 1, 2011 : program and book of abstracts p. 164.
30. R.Juršėnas. Symbolic programming package NCoperators with applications in atomic physics, Conference on Computational Physics CCP2011 (2011 10 30 – 2011 11 03), Gatlinburg, USA, 2011, p. 15.

#### Skaityti pranešimai, kurių santraukos nebuvo spausdinamos.

1. A. Borovik, A. Kupliauskienė, Electron-impact excitation of the 5p56s2 2P3/2,1/2 autoionizing states in Cs atoms, Tarptautinė konferencija „Mokslas, inovacijos, lytiškumas“, 2011 m. lapkričio mėn. 24-25 d., Vilnius, Lietuva.
2. J. Tamulienė, L. Baliulytė, V.S. Vukstich, L.G. Romanova, R. Lutsyuk, A.V. Snugursky, Quantum-mechanical study of the alanine molecule fragmentation by low energy electrons, Tarptautinė konferencija „Mokslas, inovacijos, lytiškumas“, 2011 m. lapkričio mėn. 24-25 d., Vilnius, Lietuva.
3. A. Kupliauskienė, Stendinių pranešimų „Naujausi Lietuvos mokslininkų tyrimai (fizika)“ apžvalga, Tarptautinė konferencija „Mokslas, inovacijos, lytiškumas“, 2011 m. lapkričio mėn. 24-25 d., Vilnius, Lietuva.
4. R.Kisielius, Effective coefficients for lines formed by dielectronic and radiative recombination in ions of astrophysical interest. International Seminar in Culham Science Centre, Abington (UK), 2011 m. spalio 24 d.
5. A.Tamulis, Quantum Mechanical Evolution of Fatty Acids World Life and Applications for Magnetically Controlled Artificial Minimal Cells, 5-th International NanoSchool, Faculty of Chemistry, Vilnius University, Naugarduko st. 24, Vilnius, 2011 November 15 – 17.
6. R.Kisielius, “Modifikuotas reliatyvistinis artinys atominių duomenų skaičiavimams”, Kaunas, LEI, 2011-04-12.

## **Mokslo populiarinimo straipsniai, knygos**

- 1 A.Momkauskaitė išvertė knygą: Lucy ir Stephen Hawking „Džordžas - Visatos lobiu ieškotojas“, Kaunas, Jotema, 2011, 299 p.
- 2 R.Karazija. Nuo mokslininkų laiškų iki mokslo žurnalų, Mokslas ir gyvenimas, 2011, Nr. 10, p.36-37.
- 3 R.Karazija. Zenonas Rokus Rudzikas (1840-2011)/ nekrologas lietuvių kalba. Lietuvos fizikos žurnalas, 51, 88 (2011).
- 4 R.Karazija. Zenonas Rokus Rudzikas (1940-2011)/ nekrologas anglų kalba, Lith. J. Phys., 51, 89 (2011).
- 5 A.Kazlauskas, R.Kivilšienė, S.Matulaitytė. Datos ir jubiliejai 2012 m., Lietuvos dangus 2012, 2011, p. 87-97.

## **Mokslo populiarinimo paskaitos, filmai**

- 1 R.Karazija,Visatos laiaks, erdvė ir materija, Septintoji verslo vadovų konferencija, Palanga.
- 2 R.Karazija, Fizinių mokslų leidybos Lietuvoje pradžia. MA Matematikos, fizikos ir chemijos išplėstinis posėdis, Vilnius.
- 3 R.Karazija, „Lietuvos fizikos žurnalo“ penkiasdešimtmetis: raidos bruožai. A.Jucio akademiniai skaitymai, Vilnius.
- 4 R.Karazija, Šiuolaikinės fizikos atradimai ir peoblemos. Moksleivių akademijos „Civitas“ Moleétu skyrius.
- 5 R.Karazija, Fizikos Nobelio premijos, Moksleivių akademijos „Civitas“ Vilniaus skyrius.
- 6 R.Karazija, Žaislai ir fizikos dësniai, Moksleivių akademijos „Civitas“ Pakruojo skyrius.
- 7 R.Karazija, Žaislai ir fizikos dësniai, Moksleivių akademijos „Civitas“, Vilniaus P.Vileišio vidurinė mokykla, VII klasė.
- 8 R.Karazija, Žaislai ir fizikos dësniai, Moksleivių akademijos „Civitas“, Vilniaus P.Vileišio vidurinė mokykla, VIII klasė.
- 9 R.Karazija, Išmanieji žaislai. Mokslo festivalis „Erdvėlaivis-Žemė“, Vilniaus Žeručio pradinė mokykla.
- 10 R.Karazija, Visatos pradžios teorijos. Inteviu DELFI video.
- 11 J.Tamulienė, Muziejų naktis, Vilnius, gegužės mén.
- 12 J.Tamulienė, Pamatyk kitaip, Kaunas, gegužės mén.
- 13 J.Tamulienė, „Erdvėlaivis-Žemė“, Vilnius, rugsejo mén.
- 14 J.Tamulienė, „Tyrėjų naktis“, Molėtų observatorija, rugsejo mén.
- 15 P.Bogdanovičius. Dvi mokslo populiarinimo paskaitos moksleiviams.
- 16 A.Kupliauskienė. Atomo teorijos skyriaus darbai. VU FF studentams.