

VU Teorinės fizikos ir astronomijos instituto Atomo teorijos skyriaus 2008 m. publikacijų

SĄRAŠAS

Knygos ir leidiniai

1. Fizikų žinios, Nr. 34, 35 (2008).
2. Lietuvos fizikos žurnalas (Lithuanian Journal of Physics), t. 47, Nr. 1-4 (2008).

Išspausdinti straipsniai

Straipsniai ISI žurnaluose

1. A. Audzijonis, G. Gaigalas, L. Žigas, A. Pauliukas, R. Žaltauskas, A. Kvedaravičius, A. Čerškus. Investigation of the electronic structure of the BiSBr and BiSeBr clusters by density functional method. J. Electr. Spectr. Relat. Phen., **162**, 13-18 (2008).
2. P. Bogdanovich, P. Ščiajev. Estimation of *LS*-coupling validity within configuration interaction approach, Lithuanian Journal of Physics, v. 48, 17-23 (2008).
3. A. Kupliauskienė, K. Glemža, K.-N. Huang, Fluorescence of polarized atoms ionized by polarized electrons, Lithuanian Journal of Physics, Lithuanian Journal of Physics, v. 48, 25-33 (2008).
4. A. Kupliauskienė, V. Tutlys, K.-N. Huang, Properties of Auger electrons following ionization of polarized atoms by polarized electrons, Lithuanian Journal of Physics, Lithuanian Journal of Physics, v. 48, 49-58 (2008).
5. A. Borovik, A. Kupliauskiene. On cascade transitions between autoionizing doublet levels in sodium, Physica Scripta, **77**, 055301 (4pp) (2008).
6. V. Balevicius, Z. Gdaniec, J. Tamuliene, H. Fuess. NMR and quantum chemistry study of mesoscopic structuring in 3-methylpyridine/water/NaBr mixture in the vicinity of the phase separation boundary. Phase Transitions, **81**, 293-301 (2008).
7. K.M. Aggarwal, K. Hamada, A. Igarashi, V. Jonauskas, F.P. Keenan, S. Nakazaki. Radiative rates and electron impact excitation rates for H-like Fe XXVI. Astronomy and Astrophysics, **484**, 879-885 (2008).
8. K.M. Aggarwal, K. Hamada, A. Igarashi, V. Jonauskas, F.P. Keenan, S. Nakazaki. Radiative rates and electron impact excitation rates for H-like Ar XVIII. Astronomy and Astrophysics, **487**, 383-388 (2008).
9. A. Audzijonis, G. Gaigalas, L. Žigas, A. Pauliukas, A. Čerškus, A. Balnionis, A. Kvedaravičius. Electronic structure BiSeI clusters. J. Electr. Spectr. Relat. Phen., **164**, 19-23 (2008).
10. P. Bogdanovich and R. Karpuškienė, *Ab initio* oscillator strengths and transition probabilities in Cr XVII, ADNDT, **94**, 623-649 (2008).
11. A. Bernotas, V. Šimonis. Mixing of heavy baryons in the bag model calculations, Lithuanian Journal of Physics, v. 48, 127-132 (2008).
12. P. Bogdanovich, A. Rancova. Quasirelativistic approach for *ab initio* study of highly charged ions, Physica Scripta, **78**, 045301(9pp) (2008).

- 13.V.Jonauskas, R.Karazija, S.Kučas. The essential role of many-electron Auger transitions in the cascades following the photoionization of 3p and 3d shells of Kr, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 215005 (5pp) (2008).
- 14.A.Kynienė, V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija. On the existence of dipole satellites in the region of $M_{2,3}$ – $L_{2,3}$ non-dipole emission lines for transition elements, *Lith. J. Phys.* **48**, 219-224 (2008).
15. A.Audzijonis, G.Gaigalas, L.Žigas, A.Pauliukas, B.Šalkus, R.Žaltauskas, A.Kvedaravičius, A.Čerškus, J.Narušis. Investigation of the electron structure of the SbSeBr cluster. *Centr. Eur. J. Phys.*, **6**, 415-421 (2008).
- 16.R.Karazija, A.Momkauskaitė. Some peculiarities of the energy level, photoelectron and photoexcitation spectra. *Physica Scripta*, **78**, 065301 (6pp) (2008).
- 17.A.Audzijonis, G.Gaigalas, L.Žigas, R.Sereika, A.Čerškus, A.Pauliukas, R.Žaltauskas. Investigation of the vibrational spectra of a $SbSI(Sb_2S_3)_{0,15}$ crystals in harmonic and anharmonic approximations, *Ferroelectrics*, **377**, 22-35 (2008).
- 18.A.Tamulis. Quantum mechanical control of artificial minimal living cells, *NeuroQuantology*, **6**, 311-322 (2008).

Straipsniai kituose žurnaluose ir leidiniuose

- 1.A.Tamulis, V. Tamulis, H. Ziock, S. Rasmussen, "Influence of Water and Fatty Acid Molecules on Quantum Photoinduced Electron Tunnelling in Photosynthetic Systems of PNA Based Self-Assembled Protocells, chapter #2 in book "Multiscale Simulation Methods for Nanomaterials", Edited by Richard B. Ross and Sanat Mohanty, John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, ISBN: 978-0-470-10528-3, 304 pages, January 2008. <http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0470105283.html>
- 2.A.Tamulis, V. Tamulis. Quantum mechanical design of molecular electronics OR gate for regulation of minimal cell functions, *J. Comput. Theor. Nanoscience*, **5**, 545-553 (2008).
- 3.J.Tamulienė, G.Badenes, R.Vaišnoras, M.Balevičius, L.Rastenienė. Study of single of Co_n ($n=6,8,10,12$) nanoparticles structure, Nano-Design, Technology, Computer Simulations (NDTCS '08), Proceedings of 12th International Workshop on New Approaches to High-Tech, Minsk, Belarus, p.40-44 (2008).
- 4.A.Tamulis. Quantum self-assembly of artificial minimal living cells and molecular electronic control. *Viva Origino*, **36**, 1019 (2008).
- 5.J.Li, G.Gaigalas, C.Dong. Electron correlation effects on the hyperfine induced $^{47}Ti^{18+}$ ($2s2p^3P_0 \rightarrow 2s2^1S_0$) transition probabilities, Proceedings of Japan-China Joint Seminar on Atomic and Molecular Processes in Plasma, Oct. 8-12, 2007, Dunhuang, China, 168-173 (2008).
- 6.S.Bekešienė, V.Kleiza, J.Tamulienė. Theoretical study on the molecular structures of nitrophenols and trinitrophenols. Proceedings of the 3rd International workshop "Intelligent Technologies in Logistics and Mechatronics Systems" ITELMS'2008, Kaunas, Technologija, 2008, p. 7-12.
- 7.J.Tamulienė, R.Vaišnoras, G.Badenes, L.M.Balevičius. Co_6O_m ($m=1 \dots 7$) nanoparticles geometric and electronic structure changes within increasing of oxygen number. Proceedings of the 3rd International workshop "Intelligent Technologies in Logistics and Mechatronics Systems" ITELMS'2008, Kaunas, Technologija, 2008, p. 103-106.
- 8.J.Tamulienė, G.Badenes, R.Vaisnoras. Liquid dendrimer applying to catch and keep nanoparticles. Science and Supercomputing in Europe, HCP-Europa (High Performance

- Computing), Ed. P.Alberigo, G.Erbacci, F.Garafalo, S.Monfardini, 1095-1105 (2007), ISBN 978-88-86037-21-1.
- 9.J.Tamulienė, R.Vaišnoras, G.Badenes, L.M.Balevičius. Investigation of optical properties of azo-dendrimers. Int. Conf. Radiation Interaction with Material and its Use in Technologies 2008, Program and materials, Kaunas, Technologija, 271-273 (2008).
- 10.A.Tamulis. Quantum mechanical interpretation of the origin of life. Mokslas Gamtos mokslų fakultete, Penktosios mokslinės konferencijos pranešimai, Vilniaus universiteto leidykla, 2008, p.7-19.
- 11.Steen Rasmussen, James Bailey, James Boncella, Liaohai Chen, Gavin Collis, Stirling Colgate, Michael DeClue, Harold Fellermann, Goran Goranovic, Yi Jiang, Chad Knutson, Pierre-Alain Monnard, Fouzi Mouffouk, Peter E. Nielsen, Anjana Sen, Andy Shreve, Arvydas Tamulis, Bryan Travis, Pawel Weroniski, William H. Woodruff, Jinsuo Zhang, Xin Zhou and Hans Ziock. "Assembly of a minimal protocell", in MIT Press book, "Protocells: Bridging nonliving and living matter" , Editors: S. Rasmussen, M. A. Bedau, L. Chen, D. C. Krakauer, D. Deamer, N. H. Packard, and P. F. Stadler, p. 125-156, 2008.
12. Libertas Klimka, Rasa Kivilšienė. Panevėžio pijorų mokykla XIX a. pirmojoje pusėje // Iš Panevėžio praeities: švietimo istorijos puslapiai, 8-18 (2008).
- 13.K.Paulikas, J.Tamulienė, R.Vaišnoras, G.Badenes, L.M.Balevičius. Dendrimerių molekulių ertmių prigimties nustatymas naudojant GRID'ą. Jaunųjų mokslininkų darbai, Šiauliai, VŠĮ Šiaulių universiteto leidykla, 194-2001 (2008).
- 14.G.Gaigalas, E.Gaidamauskas, P.Jonsson. Multiconfiguration Dirac-Hatree-Fock calculations for the hyperfine-structure parameters and the scalar-pseudoscalar interaction constant of ^{133}Cs . J. Phys: Conf. Series, **130**, 012008 (2008).

Pranešimai ir santraukos

Pranešimai, kurių santraukos buvo spausdinamos.

1. A.Kupliauskienė, V.Tutlys. Properties of Auger electrons following excitation of polarized atoms by polarized electrons. 4th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems, Cluj-Napoca, Romania, June 18-20, 2008, Book of Abstracts, p. 65.
2. A.Kupliauskienė. Fluorescence of polarized atoms excited by polarized electrons. 4th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems, Cluj-Napoca, Romania, June 18-20, 2008, Book of Abstracts, p. 66.
- 3.R.Karazija, A.Momkauskaitė. Peculiarities of the energy level and photoelectron spectra of atoms with a half-filled shell, 21st International Conference on X-Ray and Inner-shell processes, June 22-27, 2008, Book of Abstracts, 103 (2008).
4. A.Kynienė, V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija. On the existence of dipole satellites in the region of $M_{2,3}$ - $L_{2,3}$ non-dipole emission lines for transition elements, 21st International Conference on X-Ray and Inner-shell processes, June 22-27, 2008, Book of Abstracts, 107 (2008).
- 5.V.Jonauskas, R.Karazija, S.Kučas. The essential role of many-electron Auger transitions in the cascades following the photoionization of 3p and 3d shells of Kr, 21st International Conference on X-Ray and Inner-shell processes, June 22-27, 2008, Book of Abstracts, 129 (2008).
6. G.Gaigalas, E.Gaidamauskas, Z.Rudzikas. Atomic structure calculations of Cm^{+4} and Am^{+3} ions. Europhysics Conference Abstracts (40th EGAS, Graz, 2-5 July, 2008), 32E, p. 32 (2008).

7. E. Gaidamauskas, G. Gaigalas, J. Bieron, S. Fritzsche, P. Jonson. MCDHF calculations of the electric dipole moment of radium induced by the nuclear Schiff moment. Europhysics Conference Abstracts (40th EGAS, Graz, 2-5 July, 2008), 32E, p. 33 (2008).
8. O. Rancova, P. Bogdanovich, R. Karpuškienė. Application of new quasirelativistic approach for treatment of oxygen-like Iron and Nickel. Europhysics Conference Abstracts (40th EGAS, Graz, 2-5 July, 2008), 32E, p. 43 (2008).
9. R. Juršėnas. Coupled tensorial forms of atomic two-particle operator. Europhysics Conference Abstracts (40th EGAS, Graz, 2-5 July, 2008), 32E, p. 45 (2008).
10. R. Karpuškienė, P. Bogdanovich, O. Rancova. Ab initio calculations of aluminium-like calcium. Europhysics Conference Abstracts (40th EGAS, Graz, 2-5 July, 2008), 32E, p. 201 (2008).
11. G. Gaigalas, E. Gaidamauskas, Z. Rudzikas. Atomic structure calculations of the Cm⁴⁺. Plutonium future – “The Science” 2008, A Topical Conference on Plutonium and the Actinides, Abstracts Booklet, 47-48 (2008).
12. P. Bogdanovich, O. Rancova, R. Karpuškienė. Quasirelativistic *ab initio* study of gallium-like molybdenum and tungsten. 14th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, 1-5 September, 2008, Japan, Tokyo, Book of Abstracts, A-a11 (2008).
13. Per Jonsson, Jiguang Li, G. Gaigalas, Chenzhong Dong. Hyperfine structures, isotope shifts and transition rates of C II, N III, and O IV from relativistic configuration interaction calculations. ICAMDATA 06, Beijing, China, Oct. 28-31, 2008. Book of Abstracts, 37 (2008).
14. Li Jiguang, Per Jonsson, G. Gaigalas, Dong Chenzhong. Hyperfine induced 1s2s ¹S₀ → 1s² ¹S₀ M1 transition of he-like ions. ICAMDATA 06, Beijing, China, Oct. 28-31, 2008. Book of Abstracts, 88 (2008).
15. A. Tamulis. Self-assembly of complex systems: artificial living Cells? First IAA Symposium on Searching for life signatures. Book of Abstracts, UNESCO, Paris, France, September 22-26, 2008, p. 21.
16. Libertas Klimka, Rasa Kivilšienė. Teaching in Pious Order Schools in Lithuania in XVIII-XIX c. Nova Miscellanea historiae Scientiarum Baltica – 50. Abstracts and Programme of the 23rd international Baltic conference on the History of Science, Riga, 9-10 October, 2008, (Book of Abstracts, p. 74).
17. A. Tamulis, “Self-Assembly of Complex Systems: Artificial Living Cells?”, in book of abstracts of First International Academy of Astronautics Symposium on “*Search for Life Signatures*” page 21, UNESCO, Paris, France, September 22-26, 2008.

Skaityti pranešimai, kurių santraukos nebuvo spausdinamos.

1. J. Tamulienė, G. Badenes, R. Vaišnoras, M. Balevičius, L. Rastėnienė. Study of single of Co_n (n=6,8,10,12) nanoparticles structure, 12th International Workshop on New Approaches to High-Tech, Minsk, Belarus (2008).
2. J. Tamulienė, R. Vaišnoras, G. Badenes, L. M. Balevičius. Investigation of optical properties of azo-dendrimers. Int. Conf. Radiation Interaction with Material and its Use in Technologies 2008, Kaunas, 24-27 September, 2008.
3. G. Gaigalas, E. Gaidamauskas, Z. Rudzikas. Production of theoretical spectroscopic data for complex heavy atoms and ions. ICAMDATA 06, Beijing, China, Oct. 28-31, 2008.
4. A. Kupliauskienė. Activities of the Institute of Theoretical Physics and Astronomy of Vilnius University within Contract of Association, 2nd SC Meeting, Association of EURATOM/LEI, Kaunas, 18 April, 2008.
5. K. Paulikas, J. Tamulienė, R. Vaišnoras, G. Badenes, L. M. Balevičius, “Dendrimerių molekulių ertmių prigimties nustatymas naudojant grid’ą”, Tarptautinė mokslinė konferencija “Gamtos mokslų (Biologija, Ekologija, Fizika) aktualijos ir perspektyvos, gegužės 15-16 d., Šiauliai.

- 6.A.Tamulis, Programuojamos dirbtinės gyvos ląstelės – naujos kartos ginklai prieš vėžį ir aplinkos taršą, Mokslo festivalis, Vilniaus Universiteto Centriniai rūmai, Teatro salė, 2008 m. rugsėjo 16. Dr. R. Maskoliūno recenzija apie paskaitą patalpinta <http://mokslofestivalis.eu/lt/news/191/17>.
- 7.A.Ramanavičius ir A.Tamulis. „Dirbtinių programuojamų ląstelių sintezės ir tyrimo galimybės Lietuvoje“, centre „NaboTechnas“, VU ChF, Naugarduko g. 24, Vilnius, 2008 m. gruodžio 1 d., specialus COST veiklas integruojatis seminaras.
- 8.A.Tamulis, invited lecture “Programmable Artificial Living Cells – New Kind of Information Technologies”, Seminar on “*NanoBio Technologies and Genomics*”, September 16, 2008, Vilnius University Faculty of Chemistry, Naugarduko street 24, Vilnius.
- 9.A.Tamulis, lecture “Quantum Mechanical Modeling of Artificial Minimal Living Cells”, in “Cell Model Systems Summer School” CNR, Rome, 8-13 June, 2008.
- 10.Arvydas Tamulis, invited lecture “Quantum mechanical self-assembly of artificial living cells, photosynthesis and control”, International conference on „Innovative Medicine“, May 22-24, 2008, Hotel „ARTIS“, Liejyklos str. No 11/25, Vilnius, Lithuania.
- 11.A.Tamulis, invited lecture “Quantum mechanical processes of self-assembly, photosynthesis and control of artificial living cells”, Workshop of „Biomedicine Physics and Nanophotonics Studies Center“, 2008-04-29, Hotel Best Western „Naujasis Vilnius“, Konstitucijos ave. No 14, Vilnius, Lithuania.
- 12.A.Tamulis, “Quantum Self-Assembly of Artificial Living Cell and Molecular Electronics Control of Photosynthesis and Gene Dehybridization”, presentation in European Center For Living Technology Workshop on Protocell Modelling, March, 10-12, 2008, Venice.
- 13.Arvydas Tamulis, invited lecture "Quantum Mechanical Self-assembling of Artificial Minimal Cells and Control by Molecular Electronics and Spintronics Logical Devices" in international Nanotechnology School on "Nanostructured materials for biosensors and medicine", 2008, February 18-22, School place: “Klaipeda hotel“, L. Stuokos–Guceviciaus street 3, Vilnius.

Mokslo populiarinimo straipsniai, knygos, filmai

- 1.A.Bernotas. Klimato kaita – iššūkis civilizacijai, Mokslas ir technika, Nr. 1, 2-4 (2008).
- 2.R.Karazija. Unikalūs mokslo prietaisai, Mokslas ir gyvenimas, 2008, Nr. 6, p. 2-3.
- 3.O.Rancova. Mokslas – pramonė – produktas – vartotojas – mokslas. Fizikų žinios, 2008, Nr. 34, 20-21.
- 4.R.Karazija. Stebuklingas kompiuteris, atveriantis Visatą. Knygoje “S.Hawking. Džordžas ir Visatos paslaptys, K.: Jotema, 2008, p. 208-210.
5. O.Rancova, E.Stonkutė. Visatą tirsime naudodami ir Europos Sąjungos mokslo infrastruktūrą, Mokslas ir gyvenimas, Nr. 6, 38-41 (2008).
- 6.G.Gaigalas. Nevienišas su savo idėjomis ir darbais, Mokslas ir gyvenimas, Nr. 2, 2008 p. 6- 7.
- 7.G.Gaigalas. Bendrosios fizikos katedra tarptautinių mokslinių tyrimų sukuryje, Šviesa, Nr.7, 2008 p.6.
8. A.Momkauskaitė ir A. Bernotas. Lucy ir Stephen Hawking. Džordžas ir Visatos paslaptys (George’s Secret Key to the Universe). – Kaunas: Jotema, 2008. – 320 p. (vertimas iš anglų k., vaikams).
9. A.Bernotas. Physical Review Letters“ redaktoriaus Reinhardt Schuhmann vedamojo viename PRL numerių vertimas, „Fizikų žinioms“ Nr. 35.
10. A.Bernotas. „Mokslo Lietuvai“ Gedimino Zemlicko interviu su Europos mokslinių tyrimų tarybos prezidentu Fotis Kafatos vertimas.

11. A. Tamulio idėja apie Molecular Quantum Computing Life yra publikuojama *The Encyclopedia of Science* http://www.daviddarling.info/encyclopedia/M/molecular_quantum_computing_cloud.html
12. <http://mokslasplius.lt/mokslo-naujienos/2008/04/24/nano-bio-robotai> . Download MOV file
13. A. Tamulio sukurtas filmas apie Venecijos nano biotechnologijų 2008 pavasario konferencijas yra webserveryje <http://mokslasplius.lt/mokslo-naujienos/2008/04/24/dirbtine-gyvybe-mokslines-konferencija-venecijoje>
14. A. Tamulio paskaita/filmas VU TFAI Taryboje Kovo 20, 2008 pavadinta “Dirbtinių gyvų ląstelių savaiminis susidarymas ir kvantinis mechaninis kontroliavimas” yra webserveryje <http://mokslasplius.lt/mokslo-naujienos/2008/04/28/kvantinis-mechaninis-dirbtiniu-minimaliu-gyvu-lasteliu-kontroliavimas>

Mokslo populiarinimo paskaitos

1. R. Karazija – 4 mokslo populiarinimo paskaitos.
2. P. Bogdanovičius – 18 val. paskaitų moksleiviams “FO” mokykloje.
3. P. Bogdanovičius – 6 paskaitos moksleiviams - Vilniaus m. Fizikos mokytojų konferencijoje, Žvėryno gimnazijos moksleiviams, Fizikos olimpiados dalyviams, VPU FTF studentams, Žirmūnų ir kitų gimnazijų moksleiviams, Mokslo festivalyje „Erdvėlavis Žemė“.
4. O. Rancova, „Žvaigždžių energija – žmonėms“, renginys „Tyrėjų naktis“ (2008 m. Molėtų astronomijos observatorijoje).
5. A. Tamulis. “Kvantinis mechaninis dirbtinių gyvų ląstelių kontroliavimas”, paskaita yra R. Maskoliūno TV laidoje „Negali Būti“ LRT 2008-03-29 ir webserveryje.
6. A. Tamulis. Paskaita mokslo festivalyje „Erdvėlavis – Žemė“.