

VU Teorinės fizikos ir astronomijos instituto Atomo teorijos skyriaus 2007 m. publikacijų

## SAŖAŠAS

### Knygos ir leidiniai

1. Z.Rudzikas. Theoretical atomic spectroscopy, Cambridge University Press, Cambridge, 2007, 424 p.
2. R.Karazija. Fizikos metodologija ir filosofija, Vilniaus pedagoginio universiteto leidykla, Vilnius, 2007, 162 p. ISBN 978-9955-20-207-3
3. R.Kivilšienė, E.Makariūnienė. Iš akademiško Povilo Braždžiūno nuotraukų elektroninio katalogo, Vilniaus universiteto leidykla, 2007, 35 p.
4. Fizikų žinios, Nr. 34, 35 (2007).
5. Lietuvos fizikos žurnalas (Lithuanian Journal of Physics), t. 46, Nr. 1-4 (2007).

### Išspausdinti straipsniai

#### Straipsniai ISI žurnaluose

1. V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija, P.H.Norrington. Global characteristics of atomic spectra and their use for the analysis of spectra. VI. Transition arrays in the relativistic Dirac-Breit approximation. *Physics Scripta*, **75**, 237-244 (2007).
2. A.Audzijonis, G.Gaigalas, L.Žigas, A.Pauliukas, R.Žaltauskas, A.Čerškus, J.Narušis, A.Kvedaravičius. Electronic structure of the BiSI clusters, *Physica B*, **391**, 22-27 (2007).
3. A.Kupliauskienė. A general expression for the excitation cross-section of polarized atoms by polarized electrons. *Physica Scripta*, **75**, 524-530 (2007).
4. Ch. Froese Fischer, G.Tachiev, G.Gaigalas, M.R.Godefroid. An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations. *Comput. Phys. Communications*, **176**, 559-579 (2007).
5. A.Kupliauskienė, P.Bogdanovich, A.Borovik. Radiative transitions between lowest autoionizing states in sodium. *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 7-13 (2007).
6. P.Bogdanovich, R.Karpušienė, O.Rancova. Influence of the two-electron transitions on the radiative lifetimes of excited levels in the boron isoelectronic sequence. *Physics Scripta*, **75**, 669-675 (2007).
7. V.Jonauskas, S.Kučas, R.Karazija. On the interpretation of the intense emission of tungsten ions at about 5 nm. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **40**, 2179-2188 (2007).
8. A.Borovik, V.Vakula, A.Kupliauskienė. The  $4p^6$ -core excited autoionizing states in strontium: Classification and excitation dynamics. *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 129-135 (2007).
9. J.Tamulienė, Ž.Rinkevičius, A.Tamulis. Investigations of neutral radical molecules suitable for quantum information processing. *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 137-142 (2007).
10. P.Bogdanovich, R.Karpušienė. Theoretical investigation of energy spectra of tungsten ions  $W^{29+}$ - $W^{34+}$ . *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 151-162 (2007).
11. A.Tamulis, V.I.Tsifrinovich, S.Tretiak, G.P.Berman, D.L.Allara. Neutral radical molecules ordered in self-assembled monolayer systems for quantum information processing. *Chem. Phys. Letters*, **436**, 144-149 (2007).
12. A.Tamulis, V.Tamulis. Question 9: Quantum self-assembly and photoinduced electron tunneling in photosynthetic systems of artificial minimal living cells. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, **37**, 473-476 (2007).
13. A.Kulbickas, J.Tamulienė, L.Rasteniene, M.Franckevicius, R.Vaisnoras, M.Marcos, J.L.Serrano, B.Jaskorzynska, L.Wosinski. Optical study and structure modelling of PPI liquid crystalline dendrimer derivatives. *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications*, **5**, 178-183 (2007).

14. S.Kučas, V.Jonauskas, R.Karazija, A.Momkauskaitė. Intensity enhancement in the emission spectra of Sb, Sn, and W ions due to the mixing of configurations with symmetric exchange of symmetry. *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 249-254 (2007).
15. R.Juršėnas, G.Merkelis. Coupling schemes for two-particle operator used in atomic calculations, *Lithuanian J. Phys.*, **47**, 255-266 (2007).
16. P. Bogdanovich and H. S. Chou, Comparison of two theoretical methods for studying 2-2 transitions in beryllium isoelectronic sequence, *Lithuanian Journal of Physics*, v. 47, 387-396 (2007).
17. P. Bogdanovich and O. Rancova, Adjustment of the quasirelativistic equations for *p*-electrons, *Phys. Rev. A*, **76**, 012507 (2007).

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

18. Ž.Rinkevičius, A.Tamulis, J.Tamulienė.  $\beta$ -Diketo structure for quantum information processing. *Lithuanian J. Phys.*, **46**, 413-416 (2006).
19. A.Kynienė, S.Kučas, R.Karazija. Monitoring of  $L_{2,3}$  X-ray emission of transition element atoms near 2p threshold. *Lithuanian J. Phys.*, **46**, 425-431 (2006).
20. J.Tamulienė, M.L.Balevičius. Search of sensitizer of peptide nucleic acid sequence with adenine and guanine bases. *Viva Origino*, **34**, 112-115 (2006).
21. A.Tamulis, V.Tamulis. Quantum self-assembly and photoinduced electron tunneling in photosynthetic system of minimal living cell. *Viva Origino*, **35**, 66-72 (2007).
22. J.Tamulienė, R.Vaišnoras, M.-L. Balevičius, L.Rastinienė. Geometrical structure of small nanoparticles. *Advanced Optical Materials, Technologies, and Devices, Proc. of SPIE*, vol. 6596, 65961G (5) (2007).

#### **Pranešimai ir santraukos**

##### Pranešimai, kurių santraukos buvo spausdinamos.

1. G.Gaigalas, Z.R.Rudzikas. On the theory of energy spectra of heavy atoms and ions. 37<sup>imes</sup> Journées des Actinides, Programme and Abstracts (24-27 March, 2007), Portugal, p. 110 (2007).
2. R.Kivilienė, E.Makariūnienė. Akademiko Povilo Braždžiūno nuotraukų elektroninis katalogas. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 5, 2007.
3. R.Karazija, S.Kučas, V.Jonauskas, A.Momkauskaitė. Jonų emisija siaurame dažnių intervale kaip spinduliuotės šaltinis EUV litografijoje ir tokamake. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 14, 2007.
4. A.Bernotas. Ribinės sąlygos generuoti chaotinius impulsus modeliniuose neuronų tinkluose. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 124, 2007.
5. A.Tamulis, V.Tamulis. Kvantinis mechaninis dirbtinių gyvių ląstelių modeliavimas. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 128, 2007.
6. A.Kupliauskienė. Elektronais sužadintų poliarizuotų atomų fluorescencijos spinduliuotės tyrimas. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 146, 2007.
7. A.Kupliauskienė, V.Tutlys, Keh-Ning Huang. Auger electrons from polarized atoms ionized by polarized electrons. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 147, 2007.

8. J.Tamulienė, R.Vaišnoras, G.Badenas, L.M.Balevičius.  $\text{Co}_2\text{O}_n$  (nž1-7) kvantinės chemijos tyrimai. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 181, 2007.
9. G.Gaigalas, E.Gaidamauskas, P.Jonsson. Generalization of the multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method for the investigations of parity and time reversal symmetry violations in the many-electron atoms. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 192, 2007.
10. G.Gaigalas, C.Froese Fischer, M.Glodenienė. Correlation effects for studying the excitation energies of Fe X. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 193, 2007.
11. G.Gaigalas, S.Fritzsche. The Jahn program for transformation of atomic state functions from a jj-coupled to an isospin basis. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 194, 2007.
12. P.Bogdanovičius, O.Rancova. Patikslintos kontaktinės sąveikos įskaitymas sprendžiant kvazireliatyvistines Hartree ir Fock lygtis p-elektronams. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 195, 2007.
13. A.Momkauskaitė, R.Karazija. Atomų, turinčių neužpildytą sluoksnį, energijos lygmenų, fotoelektronų ir fotosužadavimo spektrų ypatumai. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 196, 2007.
14. A.Kupliauskienė, K.Glemža, Keh-Ning Huang. Fluorescence from polarized atoms ionized by polarized electrons. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 198, 2007.
15. A.Kynienė, S.Kučas, V.Jonauskas. Elektrinių dipolinių ir kvadrupolinių šuolių intensyvumo santykis geležies grupės elementuose. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 201, 2007.
16. P.Bogdanovich, Hsianh-Shun Chou. Comparison of two theoretical methods while investigating Beryllium isoelectronic sequence. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 208, 2007.
17. P.Bogdanovičius, P.Ščajev. LS-ryšio grynumo įvertinimas konfigūracijų superpozicijos metodu. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 209, 2007.
18. R.Karpušienė, P.Bogdanovičius. Volframo jonų  $\text{W}^{29+}$  -  $\text{W}^{34+}$  energijos spektrų teorinis tyrimas. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 210, 2007.
19. A.Bernotas, V.Šimonis. Sunkiųjų barionų banginių funkcijų maišymosi tyrimas MIT maišų modelyje. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 211, 2007.
20. R.Juršėnas, G.Merkelis. Įvairūs dvielektronio operatoriaus, naudojamo atominiuose skaičiavimuose, surištieji tenzoriniai pavidalai. 37-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, Programa ir pranešimų tezės, Vilnius, 2007 m. birželio 11-13 d., p. 219, 2007.
21. A.Kupliauskienė. A General expression for polarized electron-impact excitation cross section of polarized atoms. XXV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July, 2007, p. Th041.
22. A.A.Borovik, V.V.Vakula, A.Kupliauskiene. On the classification of the  $4p^5 4d 5s^2$  autoionizing levels in strontium. XXV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July, 2007, p. We088.
23. A.Kupliauskiene, P.Bogdanovich, L.Shimon, A.Borovik. On radiation transitions between doublet autoionizing states in sodium. XXV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July, 2007, p. Fr063.

24. A.Tamulis, V.Tamulis. Quantum mechanical self-assembling of artificial minimal cells and control by molecular electronics and spintronics logical devices. Book of Abstracts of COST D27 Final Evaluation Conference “Prebiotic Chemistry and Early Evolution”, Inter-University Center, Dubrovnik, Croatia, May 11-13, 2007, p. 30-31.
25. G.Gaigalas, E.Gaidamauskas, Per Jonsson. Multiconfiguration Dirac-Fock calculations for the hyperfine-structure parameters and the scalar-pseudoscalar interaction constant of  $^{133}\text{Cs}$ . The 9th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas, 7-10 August 2007, Lund. Sweden, p. 37-38 (2007).
26. J.G.Li, G.Gaigalas, C.Z.Dong. Theoretical study of the hyperfine induced  $^{47}\text{Ti}^{18+}$  ( $2s2p^3\text{P}_0-2s^2^1\text{S}_0$ ) transition probability. The Second China-Japan Joint Seminar on Atomic and Molecular Processes in Plasma (8th-13th October, 2007, Dunhuang, China), Book of Abstracts, p. 55-56 (2007).
27. L. Rasteniënė, A. Kublickas, J. Tamulienė, M. Franckevičius, R. Vaišnoras ir kiti „Synthesis and modeling of Co(2+)encapsulated PPI dendrimer“E-MRS 2007 Spring meetings, Strasburas, Prancūzija.
28. Arvydas Tamulis, *Invited lecture*, „Quantum Mechanical Self-assembling of Artificial Minimal Cells and Control by Molecular Electronics and Spintronics Logical Devices“, International School „Advanced Methods in Biophysics“, 26-30 November, 2007, Hotel „Trasalis“, Trakai, Lithuania, 3 pages.

Skaityti pranešimai, kurių santraukos nebuvo spausdinamos.

1. A.Kupliauskienė. Atidarymo pranešimas. EU Struktūrinių fondų remiamas paskaitų ciklas ”Tarpautinis termobranduolinis reaktorius ITER – energetikos perspektyvos”, 2007 m. Kovo 26-30 d., Vilnius, VU TFAI.
2. R.Kisielius. Įvadas į R matricos metodą. EU Struktūrinių fondų remiamas paskaitų ciklas ”Tarpautinis termobranduolinis reaktorius ITER – energetikos perspektyvos”, 2007 m. Kovo 26-30 d., Vilnius, VU TFAI.
3. A.Kupliauskienė. Eelementarūs atomų ir elektronų sąveikos vyksmai plazmoje. EU Struktūrinių fondų remiamas paskaitų ciklas ”Tarpautinis termobranduolinis reaktorius ITER – energetikos perspektyvos”, 2007 m. Kovo 26-30 d., Vilnius, VU TFAI.
4. A.Kupliauskienė. Theory of many electron atoms in Vilnius. Joint Taiwan-Baltic Seminar on atomic Physics (April 2-5, 2007, IAMS, Academia Sinica, Republic of China).
5. A.Kupliauskienė. Electron and photon interaction with atoms. Joint Taiwan-Baltic Seminar on atomic Physics (April 2-5, 2007, IAMS, Academia Sinica, Republic of China).
6. P.Bogdanovich. Modern methods for the investigation of many-electron atoms and ions. Joint Taiwan-Baltic Seminar on atomic Physics (April 2-5, 2007, IAMS, Academia Sinica, Republic of China).
7. A.Kupliauskienė. Taiwan-Baltic theoretical studies of spectroscopy of atoms and their behaviour in strong laser fields. 6<sup>th</sup> Steering Committee Meeting “The Mutual Funds for Science Cooperation of Lithuania, Latvia and Taiwan”, Vilnius, June 7, 2007.
8. A.Kupliauskienė. BASNET Lithuanian Cluster report for the second year. BASNET Closing Conference devoted to the Baltic States Women in Sciences Strategy, Vilnius, October 22-23, 2007.
9. A.Tamulis. Quantum mechanical self-assembling of artificial minimal cells and control by molecular electronics and spintronics logical devices. Part1 and Part 2. International School “Advanced Methods in Biophysics”, 26-30 November, 2007, Hotel “Trasalis”, Trakai, Lithuania.
10. G.Gaigalas, ”Hyperfine-structure investigation with Maple” Malmės universitete (Švedija) vasario 14 dieną.

11. G.Gaigalas, "Hyperfine-structure investigation with Maple" The College of Physics and Electrical Engineering, Lanzhou Northwest Normal University (Kinija) gegužės 17 dieną.
12. G.Gaigalas, "Spin-angular Investigation for Studies of Many-electron atoms and ions" The College of Physics and Electrical Engineering, Lanzhou Northwest Normal University (Kinija) birželio 6 dieną.
13. G.Gaigalas, "Spin-angular Investigation for Studies of Many-electron atoms and ions" Lundo universitete (Švedija) rugpiūčio 6 dieną.
14. G.Gaigalas, "Scientific Research in ITPA (Lithuania)" The College of Physics and Electrical Engineering, Lanzhou Northwest Normal University (Kinija) birželio 6 dieną.

### **Mokslo populiarinimo straipsniai, knygos**

1. A.Bernotas. MA sesija "Kurkime saugią Lietuvą". Lietuvos mokslų akademijos žinios, 2007, Nr. 3 (46), p. 3.
2. Z.Rudzikas. Lietuvos mokslų akademijos 2007 m. birželio 12 d. visuotinio susirinkimo sesijos "Kurkime saugią Lietuvą" rezoliucija, Lietuvos mokslų akademijos žinios, 2007, Nr. 3 (46), p. 4.
3. A.Bernotas. XI-ojoje Baltijos šalių intelektualinio bendradarbiavimo konferencijoje. Lietuvos mokslų akademijos žinios, 2007, Nr. 3 (46), p. 5.
4. Apdovanoti Lietuvos MA nariai. Lietuvos mokslų akademijos žinios, 2007, Nr. 3 (46), p. 52.
5. Z.Rudzikas. Baltijos šalims svarbu derinti savo balsus ir veiksmus, Mokslo Lietuva, 2007 lapkričio 1-21 Nr. 19(375).
6. Z.Rudzikas. Mokslas ir organizuota pilietinė visuomenė, Mokslas ir gyvenimas, 2007 m. spalio mėn. Nr. 10, p. 4-5.
7. G. Gaigalas, "Akimirkos su kinų mokslininkais" Šviesa Nr. 14, 2007.
8. G. Gaigalas, "Bendrosios fizikos katedros svečiai: prof. Per. Jonsson" Šviesa, 2007.
9. R.Karazija, „Milžiniškos magnetovaržos reiškiny“ . Fizikų žinios“ Nr 33, p. 13.
10. R.Karazija, LMA užsienio nariui I.Martinsonui – 70. Lietuvos mokslų akademijos žinios. 2007, Nr 4.
11. J. Tamulienė, M-L. Balevičius „Kasdieniai stebuklai“, Vaga, 2007.
12. V.Tutlys, R.Karazijai 65- ri. Mokslų akademijos žinios (2007) (Tutlio tekstas, pavardės kitų žmonių)
13. V.Tutlys, Sinchotroninė spinduliuotė – mokslinio tyrimo instrumentas, Fizikų žinios, Nr. 33, (2007).
14. A.Tamulis. Dirbtinės gyvosios ląstelės ir nanobiorobotai, Mokslas ir technika, Nr. 12, 26-28, 2007.
15. A.Audzijonis, G. Gaigalas, L. Zigas, R. Zaltauskas, E. Tamulienė, A. Pauliukas "Fizikinis eksperimentas kietojo kuno optikos mokslinėje laboratorijoje" Vilniaus pedagoginio universiteto leidykla, Vilnius 2007

### **Mokslo populiarinimo paskaitos**

1. R.Karazija. Paskaita TFAI planetariume „Nobelio fizikos premijos – nuo Rentgeno iki šių metų laureatų“.
2. R.Karazija. Pranešimas doc. V.Kaveckio šimtmečio minėjime „V.Kaveckis ir A.Jucys – bičiuliai ir bendradarbiai“ (VPU).
3. J.Tamulienė, „Europos tyrėjų naktis“ - 2007-09-26.

4. J.Tamulienė, Pranešimas TPA informacinėje dienoje – 2007-11-28.
5. Z.Rudzikas, Evaluation of ERC proposals. TPA informacinė diena – 2007-12-04.