

VU TEORINĖS FIZIKOS IR ASTRONOMIJOS INSTITUTAS
(direktorė habil.dr. Gražina Tautvaišienė)

2009 m. ATASKAITA

Darbuotojai, mokslo publikacijos

2009 m. institute dirbo 109 darbuotojai, iš jų 66 mokslo darbuotojai ir kiti tyrėjai (13 habilituotų daktarų, 2 atlikę habilitacijos procedūrą ir 36 mokslų daktarai) ir 11 doktorantų. Pagrindinėse pareigose dirbo 39 mokslininkai. Institute veikė keturi moksliniai padaliniai: Astronomijos observatorija (AO, vad. G. Tautvaišienė), Atomo teorijos skyrius (ATS, vad. A.Kupliauskienė), Branduolio teorijos skyrius (BTS, vad. E.Norvaišas), Vyksmų ir sandarų teorijos skyrius (VSTS, vad. B. Kaulakys) ir Studijų katedra (vad. G. Merkelis). VU TFAI planetariume dirbo 14 darbuotojų, iš jų 2 mokslo darbuotojai.

Instituto darbuotojai 2009 m. paskelbė 94 VU TFAI vardu įregistruotus mokslinius straipsnius, iš jų 42 – leidiniuose, įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų bazę, bei 52 publikuotus kituose žurnaluose bei tarptautinių konferencijų darbuose. 39 mokslinės publikacijos paskelbtos Molėtų observatorijos teleskopų stebėjimo rezultatų pagrindu.

2009 m. išleisti 4 tarptautinio mokslinio žurnalo „Baltic Astronomy“ numeriai (ISI žurnalas nuo 2003 metų, 48 sp.1.), du „Fizikų žinios“ numeriai, kasmetinis leidinys „Lietuvos dangus 2010“, 9 instituto darbuotojai buvo 5 mokslo leidinių atsakingais redaktoriais ir redkolegijų nariais.

Pažymėdami Tarptautinius astronomijos metus 2009 (TAM2009) AO darbuotojai ypač aktyviai dirbo mokslinės žiniasklaidos srityje. 2009 m. vasario 17 d. Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos instituto Planetariume įvyko oficialus Tarptautinių astronomijos metų 2009 Lietuvoje atidarymas, kuriame dalyvavo svečiai iš Lietuvos nacionalinės UNESCO komisijos, Švietimo ir mokslo ministerijos, kitų aukštųjų mokyklų. MAO šiemet įvyko du masiniai renginiai: „100 astronomijos valandų“ (apsilankė apie 600 žmonių) ir „Tyrėjo naktis“ (apsilankė daugiau kaip 1000 žmonių). MAO apsilankė 352 ekskursijos (7473 žm.). Planetariume moksleiviams, mokytojams ir visuomenei praveisti 656 įvairūs informaciniai seansai ir kiti renginiai, kuriuose apsilankė 28 626 lankytojai.

Mokslinė veikla

Pagrindinės instituto mokslinės veiklos kryptys (Lietuvos Respublikos Vyriausybės 2002 02 15 nutarimas Nr. 24) yra šios:

1. Efektyvių matematinės fizikos metodų plėtojimas ir taikymas daugiadalelių sistemų, jų netiesinės dinamikos ir kvantuotų laukų teoriniam tyrimui;
2. Atomų, subatominių dalelių, molekulių, jų darinių ir plazmos spektroskopijos tyrimai, jų taikymas nanofizikoje ir astrofizikoje;
3. Galaktikos, žvaigždžių ir tarpžvaigždinės medžiagos struktūros ir evoliucijos tyrimai.

Instituto darbuotojai dalyvavo vykdant 41 projektą: 14 VU TFAI tarybos patvirtintų mokslinių temų, finansuojamų iš Lietuvos biudžeto, 3 Europos 7-osios Bendrosios programos projektus, 4 COST, 8 finansuojamus LVMSF ir TPA, 3 Lietuvos vyriausybės, 2 Europos sąjungos Struktūrinių fondų remiamus projektus, 4 finansuojamus ir 3 nefinansuojamus tarptautinius projektus. Vykdant šiuos projektus, o taip pat į konferencijas, stažuotes, mokyklas ir mokslo organizaciniais reikalais į užsienį instituto darbuotojai išvykę buvo 105 kartus. Institute lankėsi 6 užsienio svečiai.

VU TFAI Tarybos patvirtintos mokslinių tyrimų temos

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Žvaigždėdaros rajonų ir dulkių debesų antrajame Galaktikos kvadrante tyrimas**” (2006 – 2009 m., vad. vyriaus.m.d. V. Straizys, vykdytojai: m.d. S. Bartašiūtė, vyr.m.d. K. Černis, vyr.m.d. A. Kazlauskas, j.m.d. V. Laugalys, tyrėjas-astronomas G. Valiauga, m.d. J. Zdanavičius, vyriaus.m.d. K. Zdanavičius). Publikuoti 6 ISI straipsniai.

Vykdant šią temą 2009 m. spektriniais stebėjimais Kitt Peak observatorijoje patvirtinta, kad 15 jaunų žvaigždžių spektruose matomos vandenilio alfa ir infraraudonosios kalcio tripleto linijos. Tai rodo jauną atrastų žvaigždžių amžių ir patvirtina, kad Žirafos tamsiuose debesyse tebevyksta žvaigždėdaros procesas. Šiaurės Amerikos ir Pelikano ūkų rajone gauti 34 žvaigždžių spektrai ir 19-je iš jų rastos emisijos linijos. Panaudojant šių žvaigždžių fotometrijos duomenis Vilniaus sistemoje ir infraraudonąją fotometriją JHKs, MSX ir Spitzerio sistemose gautos jų energijos pasiskirstymo spektre kreives nuo 0.5 iki 25 mikrometrų. Šiaurės Amerikos ūko Meksikos įlankos rajone, remiantis 2MASS, IPHAS ir MegaCam fotometrijos rezultatais, identifikuota 104 žvaigždės, priklausančios raudonųjų milžinių sancaupai. Pagal jas ištirta tarpžvaigždinė ekstinkcija iki 6 kpc nuotolio. Sukurtą metodą raudonųjų milžinių sancaupos identifikacijai bus galima taikyti ir kitoms Paukščių Tako sritims su labai didele tarpžvaigždine ekstinkcija. Remiantis 2008 metais paskelbtais 480 žvaigždžių fotometrijos ir klasifikacijos duomenimis, ištirta tarpžvaigždinė ekstinkcija atspindžio ūko NGC 7023 kryptimi Cefėjo žvaigždyne. Nustatyta, kad šia kryptimi matomi du vienas už kito esantys dulkių debesys 282 ir 715 pc nuotoliuose. Remiantis Molėtų observatorijos Maksutovo teleskopu gautais CCD stebėjimais, nustatyti 1304 žvaigždžių ryškiai ir spalvos rodikliai Vilniaus fotometriniėje sistemoje iki $V = 16.5$ mag dulkių debesies kryptimi. Daugumai šių žvaigždžių nustatyti spektrinės klasės, absoliutiniai ryškiai, spalvos ekscesai, tarpžvaigždinės ekstinkcijos ir nuotoliai. Nustatyti 2MASS fotometrines sistemos normalieji spalvos rodikliai V ir III šviesio klasių žvaigždėms. Gautos 8 naujų Galaktikos sričių padrikųjų spiečių ir žvaigždėdaros rajonų CCD nuotraukos Vilniaus ir Stromvil fotometrines sistemose JAV Naval Flagstafo observatorijos 1 m teleskopu ir Vatikano VATT teleskopu Arizonoje.

AO darbuotojai vykdė temą „**Žvaigždžių atmosferų cheminė sudėtis ir evoliucija**” (2005 – 2009 m., vad. vyriaus.m.d. G. Tautvaišienė, j.m.d. E. Puzeras, m.d. Y. Chorniy, j.m.d. Š. Mikolaitis, j.m.d. G. Barisevičius, j.m.d. E. Stonkutė, bei kolegos iš Švedijos, Italijos, Vokietijos, JAV, Šveicarijos, Kanados. Publikuoti 3 straipsniai.

Vykdant šią temą, 2009 m. nustatytos 64 Galaktikos sancaupos žvaigždžių 15 cheminių elementų gausos (nuo Na iki Ni), atlikta rezultatų statistinė analizė, gautieji

rezultatai palyginti su ankstesnėmis publikacijomis šia tema. Nustatytas anglies izotopų santykis ($^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$) ir masės 36 Galaktikos sankaupos žvaigždei. Nustatyti 26 naujai stebėtų sankaupos žvaigždžių pagrindiniai atmosferos parametrai ir geležies, kobalto, nikelio gausos ir 17 RS CVn tipo žvaigždžių pagrindiniai atmosferos parametrai ir geležies gausos. Potemyje „Cheminė Galaktikos kinematinė žvaigždžių grupių sudėtis“ nustatyta, kad tiriamųjų žvaigždžių grupė yra homogeniška ir kad pastebimas skirtumas, palyginus gautus rezultatus su Galaktikos plonojo disko žvaigždžių atmosferų chemine sudėtimi. Galima daryti išvadą, kad šios žvaigždės greičiausiai Paukščių Take atsirado iš įkritusios mažos galaktikos.

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Pozicinė neįprastųjų asteroidų ir kometų astrometrija**“ (2005 – 2009 m., vad. vyr.m.d. K. Černis, vykdytojai: m.d. J. Zdanavičius, vyriaus.m.d. K. Zdanavičius). Paskelbtos 19 publikacijų.

2009 m. vykdant šią temą, atrasti 59 nauji asteroidai, tame tarpe 2 Trojėnų grupės asteroidai, skriejantys apie Saulę Jupiterio orbitoje (apsisukimo periodas apie 12 metų) ir didesni nei 10 km skersmens. Pagal Molėtų ir Baldonės observatorijose gautus fotometrinius ir astrometrinius duomenis nustatytas (830 stebėjimų) Apolono grupės NEO asteroido 2008 OS9 spindesio kitimas (amplitudė apie 0.27 mag R juostoje), taip pat jo ašinis sukimasis (apsisukimo periodas lygus 4.215 val.), ir apskaičiuota asteroido orbita (apsisukimo periodas aplink Saulę lygus 2.03 metų) pagal 475 stebėjimus su astrometrine paklaida 0.402”. Publikuota apie 5120 pozicinių asteroidų ir kometų matavimų (padaryta daugiau nei 1243 atskirų objektų astrometrija). Stebėtos 6 kometos (vizuali ir CCD fotometrija): C/2007 N3 (Lulin), C/2008 T2 (Cardinal), C/2009 F6 (YI-SWAN), 29P (Schwassmann-Wachmann), C/2005 LB216 (LONEOS) ir C/2006 W1 (Christensen). MAO vykdyti astronominiai stebėjimai su Maksutovo teleskopu (stebėta 18 naktų, vasario-lapkričio mėn). Gauta ir apdorota 1306 geros kokybės CCD nuotraukų. Apžvelgta 350 kv. laipsnių dangaus sferos. Buvo vykdomi astronominiai stebėjimai su Baldonės Šmidto teleskopu. Gauta 304 geros kokybės CCD nuotraukų iki 21 ryškio. Buvo vykdomi astronominiai stebėjimai su 1.8 m skersmens Vatikano observatorijos teleskopu (Mount Graham, Arizon) Kentauro grupės asteroido 2009 HW77 paieškų programoje. CCD nuotraukose užfiksuoti objektai iki 23 ryškio. Buvo vykdomi astronominiai stebėjimai su 1 m Flagstafo observatorijos teleskopu (Arizona) Kentauro grupės asteroido 2009 HW77 paieškų programoje.

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Orbitinių vizualinių dvinarių žvaigždžių populiacinė priklausomybė**“. (2007 – 2009 m., vad. vyriaus.m.d. A. Bartkevičius, vykdytojas m.d. J. Sperauskas. Publikuoti 1 straipsnis ISI sąrašo žurnale.

Vykiant šią temą, 2009 m. Atlikti papildomi didelio greičio trinarės žvaigždės BD+20 5152 matavimai, nustatyti šios sistemos komponentai bei kitimo pobūdis. ($P=5.71$ d, $e = 0.00$, $a_{\text{asini}} = (3.730 \pm 0.074) 10^6$ km; $UVW=84.8, -3.8, 21.5$ km/s; $\delta(U-B)=0.16$), gauta spektroskopinė orbita ir atlikta detali sistemos analizė bei paruoštas straipsnis publikavimui. Atlikta vizualinių orbitinių dvinarių kampinių ir erdvinė atstumų tarp narių analizė. Gauta, kad kampinis didžiųjų pusašių vidurkis $a'' = 1.287$, o erdvinis didžiųjų pusašių vidurkis $a = 59.2$ AU. Stebimas nedidelis erdvinis didžiųjų pusašių mažėjimas, vėlyvėjant spektrinei klasei. Nėra a priklausomybės nuo sistemos populiacinės grupės. Gauti papildomi žvaigždės HIP 375D radialiniai greičiai ir nustatyti

šios žvaigždės spektroskopinės orbitos parametrai. Buvo tęsiami galimo padrikojo spiečiaus DoIDzim 5 žvaigždžių radialinių greičių matavimai.

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Spektrofotometrines parausvėjusių žvaigždžių klasifikacijos galimybių tyrimas**” (2006 – 2009 m., vad. vyriaus.m.d. K. Zdanavičius, vykdytojai m.d. J. Zdanavičius, m.d. R. Lazauskaitė).

Vykdam šią temą, 2009 m. tirta galimybė klasifikuoti žvaigždes panaudojant užterštus vidutinės dispersijos prizmės spektrus. Nustatyta, kad esant duotam GAIA spektrų užterštumui atlikti parausvėjusių žvaigždžių tikslią fotometrines klasifikaciją neįmanoma. Nutarta pradžioje išvalyti spektrus nuo užterštumo. Atlikti skaičiavimai parodė, kad visoms žvaigždėms užterštumas gali būti įskaitytas pakankamai tiksliai, padalinus žvaigždes į dvi grupes: O-K (ankstyvos) ir M (su prijungtomis vėlyvomis K). GAIA pirmosios klasifikacijos įvertinimui nufotografuotas Šiaurinis ekliptikos polius (jame pirmiausia bus atlikta gausiausia fotometrija) su Vilniaus fotometrines sistemos šviesos filtrais. Medžiaga dar apdorojama.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams: teorija ir interpretavimas**” (2005 – 2009 m., vad. vyriaus.m.d. R. Karazija, vykdytojai vyr.m.d. V. Jonauskas, vyr.m.d. S. Kučas, m.d. A. Kynienė, m.d. A. Momkauskaitė). Publikuoti 2 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. teoriškai nustatyti kvaziišsigimusių konfigūracijų $4p^5 4d^{N+1}$ ir $4p^6 4d^{N-1} 4f$ maišymosi ypatumai ir šių koreliacinių efektų įtaka emisijos ir Auger spektrams izoelektronėse ir izobranduolinėse sekose. Dėl 4f elektrono banginės funkcijos spartaus lokalizacijos kitimo tų konfigūracijų vidutinės energijos izoelektronėje sekoje susikerta du kartus, o šuolių 4f-4d linijų stipris kinta nemonotoniškai. Nustatytos labai siauros intensyviausių linijų grupės formavimosi emisijos ir fotosužadinimo spektruose sąlygos. Parodyta, kad emisijos spektro kitimas izoelektronėje sekoje atitinka tris skirtingus tipus. Paaiškintas emisijos ir fotosužadinimo spektrų panašumas. Atlikti didelės apimties Auger kaskadų ir papildomos jonizacijos dėl jono relaksacijos po elektronų smūgio skaičiavimai pirmiesiems volframo jonams. Gauti rezultatai atskleidžia abiejų procesų bei atskirų sluoksnių indėlius į jonų dvikartinę ir trikartinę jonizaciją elektronų smūgiu. Toliau tirti Kr Auger kaskadų spektrai. Išplėtus reliatyvistinių banginių funkcijų bazę ir apgaubus suskaičiuotas linijas Voigt profiliu, gauti teoriniai spektrai labai gerai derinasi su prancūzų eksperimentatorių išmatuotais.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Daugiaelektronių atomų spektrinių charakteristikų tyrimo metodų plėtra ir jų taikymas daugiakrūviams jonams, aptinkamiems termobranduolinėje ir kitų rūšių plazmoje**” (2007 – 2011, vad. vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, vykdytojai vyr.m.d. R. Karpuškienė, m.d. O. Rancova). Paskelbti 4 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. vykdam planinę temą Atomo teorijos skyriuje sukurtas dalinio matricų diagonalizavimo metodas buvo lyginamas su naujomis standartinių bibliotekų programomis, tame tarpe ir Davidsono metodu. Skaičiavimai parodė, kad mūsų naudojamas metodas atomo teorijos uždavinių atveju, kai ieškomų tikrinių verčių skaičius daug tūkstančių kartų mažesnis už matricos eilę, yra nė kiek ne prastesnis už kitus metodus. Kvazireliatyvistinių Hartrio ir Foko lygčių programos eksploatacija

parodė, kad yra daug atvejų, kai iteracinis procesas, naudojamas lygtims spręsti, yra nestabilus arba išvis nekonverguoja. Siekiant patobulinti programą buvo sukurtas naujas universalus potencialas pradinėms radialiosioms orbitalėms skaičiuoti. Jo naudojimas leidžia gauti gerą iteracinio proceso konvergenciją, esant bet kokioms atomo branduolio krūvio vertėms bei jonizacijos laipsniams. Kvazireliatyvistiniame artinyje atlikti volframo daugiakrūvių jonų (nuo W^{29+} iki W^{37+}) su besipildančiu 4d-sluoksniu spektrinių charakteristikų skaičiavimai. Palyginimas su grynai reliatyvistinių Dirako ir Foko skaičiavimų rezultatais parodė, kad ATS skyriuje sukurtas kvazireliatyvistinis artinis pakankamai tiksliai aprašo reliatyvistinius efektus netgi tokiuose labai aukšto jonizacijos laipsnio atomuose kaip W ir tolimesnis rezultatų tikslinimas yra susijęs su koreliacinių efektų taikymu. Taip pat kvazireliatyvistiniame artinyje atliktas W II jono ir Zn II jono tyrimas. Atliekant Zn II tyrimą, buvo siekiama nustatyti, kokią įtaką galutiniams rezultatams (energijos lygmenims ir jų gyvavimo trukmėms, bei šuolių charakteristikoms) turi pradinės tiriamos konfigūracijos, kuriai sprendžiamos kvazireliatyvistinės lygtys, pasirinkimas. Buvo toliau tiriamas naujai sukurtas kvazireliatyvistinio artinio efektyvumas ir jo taikymo ribos. Šiam tikslui buvo atlikti Be-sekos jonų ($Z= 6, 16, 26, 36$) spektrinių charakteristikų skaičiavimai, o taip pat O-sekos jonų (Z nuo 9 iki 34) spektrinių ir šuolių charakteristikų tyrimai. Siekiant įvertinti kvazireliatyvistinių funkcijų įtaką, visi skaičiavimai atlikti taip pat ir su nereliatyvistinėmis funkcijomis Breito ir Paulio artinyje analogiškai atsižvelgiant į koreliacinius efektus. Skaičiavimų rezultatai palyginti su eksperimentiniais duomenimis.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Elektronais sužadintų ir jonizuotų atomų spinduliuotės ir elektronų emisijos tyrimas**” (2007 – 2010, vad. vyr.m.d. A. Kupliauskienė, vykdytojai vyr.m.d. V. Tutlys, vyr.m.d. G.Merkelis, j.m.d. R.Juršėnas ir doc. K. Glemža (VU FF)). Paskelbti 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. išvesta poliarizuotos spinduliuotės rezonansinės sklaidos poliarizuotais elektronais skerspjūvio pati bendriausia išraiška. Ji panaudota surasti skerspjūvio išraiškoms, kai eksperimente registruojamas mažesnis poliarizacijų skaičius. Apskaičiuoti išsklaidytos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai $1s^{-1}n_{sp}$ rezonansams, kai sklaidoma 3,6 keV, 15 keV ir 36 keV fotonai K ($n=4$), Rb ($n=5$) ir Cs ($n=6$) atomais. Tirtas fluorescencijos po šarminių metalų atomų subvalentinių elektronų sluoksnio jonizacijos elektronais kampinis pasiskirstymas. Apskaičiuoti Dirako ir Foko artinyje cezio atomo elektronais sužadintų žemiausių autojonizacinių būsenų energijos spektrai ir sužadinimo elektronais skerspjūviai. Eksperimentinio spektro linijoms identifikuoti apskaičiuotos radiacinių šuolių į pagrindinę cezio atomo būseną tikimybės bei autojonizacijos tikimybės. Įvertintas kaskadų iš aukštesnių autojonizacinių būsenų indėlis, kuris rastas nežymus. Tenzoriškai surištų momentų pavidalu aprašytas atvirų atomo elektronų sluoksnių Rayleigh-Schrödinger teorijos antros eilės efektinis Hamiltonianas jj -ryšyje. Gautos stacionarios atomo trikdžių teorijos antros ir trečios eilės pataisos simbolinio programavimo paketu NCoperators (Mathematica kalba), kurio pagalba kiekviena pataisa atvaizduojama Goldstone'o diagramomis. Pasiūlytas matematinis metodas kaip galima parametrizuoti SU(2) neredukuotino įvaizdžio matricinį elementą vektorius, aprašomo dviejose skirtingose koordinatinių sistemose (pasuktose Euler'io kampais viena kitos atžvilgiu), koordinatėmis. Aprašytas metodas, kaip galima skaičiuoti tenzorinių operatorių matricinius elementus, kuomet tiesiogiai Wigner-Eckart'o teoremos negalima taikyti.

ATS darbuotojai vykdė temą **“Plazmos spektrų teorinis tyrimas naudojant smūginį radiacinį modelį“ (2008.11-2013.11)**. Vadovas: vyr. m. d. V.Jonauskas, vykdytojai: vyr.m.d. R.Kisielius, m.d. A.Kynienė, j.m.d. Š. Masys. Priskiriamų publikacijų skaičius: 1 straipsnis ISI sąrašo žurnale.

Vykdam šią temą, 2009 m. Dirako ir Foko artinyje suskaičiuoti magnetiniai dipoliniai šuoliai, vykstantys tarp $4d^N$ konfigūracijų lygmenų, volframo jonuose. Išnagrinėti smūgių stiprumai, gauti nereliatyvistine R_{max} , reliatyvistine DARC ir naudojant reliatyvistinių integralų analogus nereliatyvistinėje programoje. Suskaičiuoti W^{45+} jonui efektyviniai smūgių stiprumai, atitinkantys smūgių stiprumus, gautus minėtomis programomis. Teoriškai ištirta rezonansų įtaka nagrinėtuose šuoliuose. W^{45+} jonui suskaičiuoti efektyviniai smūgių stiprumai, atitinkantys smūgių stiprumus, gautus nereliatyvistine R_{max} , reliatyvistine DARC ir nereliatyvistine programa, kurioje panaudoti reliatyvistinių integralų analogai. Teoriškai ištirta rezonansų įtaka nagrinėtuose šuoliuose.

ATS darbuotojai vykdė temą **“Sunkių ir supersunkių cheminių elementų spektrinių charakteristikų tyrimas” (2009 – 2014 m.)**. Vadovas vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vykdytojai vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, inž. E.Gaidamauskas. Priskiriamų publikacijų skaičius: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. buvo tiriami urano, neptūnio, plutonio ir americio oksidų energijų spektrai. Taikomi daugiakonfigūracinis Dirako ir Foko bei reliatyvistinis konfigūracijų superpozicijos artiniai bei atsižvelgiama į aukštesnių eilių reliatyvistines ir radiacines pataisas. Gautieji rezultatai liudija aukštą taikomų metodų tikslumą ir G.Gaigalo mokslinėje grupėje 2009 metais sukurtos programinės įrangos efektyvumą. Konstatuota būtinybė visų pirma atsižvelgti į kuo didesnę urano atomą supančių jonų kiekį, o tik po to – kuo tiksliau į koreliacinius ir reliatyvistinius efektus.

BTS darbuotojai vykdė temą **„Subatominių sistemų bei jų dinamikos tyrimas grupių teorijos ir topologiniais metodais“ (2006 – 2010 m., vyriaus.m.d. S.Ališauskas, vyresn.m.d. E.Norvaišas, vykdytojai: vyr.m.d. A.Juodagalvis, m.d. A.Acus, m.d. V.Šimonis, m.d. K.Tamošiūnas, j.m.d. D.Jurčiukonis, doktorantai V.Regelskis ir T.Sabonis**. Priskiriamų publikacijų skaičius: 5 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. buvo nagrinėjamos specialiosios funkcijos susietos su kartotinių įvaizdžių išskyrimo bei bazinių funkcijų klasifikavimo problemomis iškylančiomis nekanoninės redukcijos grandinėlės $SU(6) \rightarrow SU(3) \times SU(2)$ Clebsch'o ir Gordano koeficientuose. Atlikus Skyrme'os modelio dvimatėje erdvėje kanoninį kvantavimą parodyta, kad stabilūs sprendiniai egzistuoja ir be papildomo simetriją pažeidžiančio nario. Šie darbai buvo atlikti bendradarbiaujant su Dublino universiteto profesoriumi Y. Shnir. Toliau buvo tęsiami darbai susieti su $SU(3)$ Skyrme'o modelio C.G.Callan'o ir I.Klebanovo pasiūlytu artutiniu, kuriame pioniniai modelio laisvės laipsniai traktuojami kaip grynai kvantiniai laisvės laipsniai, o laisvės laipsniai susieti su K mezonais traktuojami kvaziklasiškai. Šiame artutinyje pasirinkus įvairius $SU(3)$ grupės įvaizdžius apskaičiuoti hiperonų ir kai kurių kitų sunkiųjų barionų spektrai. Pradėta modifikuoti šį artutinumą. Kvantavimui pasirenkami ne trys susieti su $SU(2)$ grupe laisvės laipsniai, bet šeši su $SU(2) \times SU(2)$ grupe susieti laisvės laipsniai, kas leidžia sukonstruoti solitoną su skirtingais sukiniu ir izosukiniu. Buvo ruošiami branduolinės

fizikos duomenys supernovų modeliavimui. Praeitais metais skaičiuoti elektronų pagavimo branduoliais greičiai šimet buvo patikrinti. Apskaičiavus suvidurkintus elektronų pagavimo greičius ir susidariusių neutrinių spektrus maždaug keturiems tūkstančiams žvaigždinės medžiagos sąlygų, aprašomų medžiagos tankiu, temperatūra, bei leptonų ir barionų kiekių santykiu, buvo parengta rezultatų lentelė. Vidurkinimas vykdytas atsižvelgiant į dviejų tūkstančių septynių šimtų branduolių koncentraciją medžiagoje. Skaičiavimai atlikti pasinaudojant „BalticGrid“ infrastruktūra. Buvo tęsiami barionų magnetinių momentų skaičiavimai naudojant įvairias MIT maišų modelio modifikacijas. Geriausias sutapimas su eksperimentu gautas modelyje, kuriame atsižvelgiama į masių centro judėjimo pataisas ir dar papildomai pridedamas su vakuomo fliktuacijomis susijęs (Kazimiro energijos) narys.

VSTS darbuotojai vykdė temą **„Šaltų atomų ir kondensuotų darinių optinių savybių teorijos plėtra”** (2005 – 2009 m., vad. Vyriaus.m.d. G. Juzeliūnas, vykdytojai vyr.m.d. J. Ruseckas, VU studentai ir užsienio mokslininkai). Paskelbti 2 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Vykdamas temą 2009 m. pasiūlytas ir išnagrinėtas dirbtinio magnetinio lauko stacionariesiems poliaritonams sukūrimo metodas, panaudojant dvigubą Lambda atomo lygmenų konfigūraciją. Parodyta, kad toks efektyvusis magnetinis laukas gali būti pakankamai stiprus, kad susikurtų Landau lygmens išsigimimas, įgalinantis susidaryti trupmeniniam Holo efektui sąveikaujantiems stacionariesiems poliaritonams.

VSTS darbuotojai vykdė temą **„Laipsniniai skirstiniai ir 1/f fliktuacijos dinaminėse chaotinėse ir stochastinėse sistemose”** (2005 – 2009 m., vadovas vyriaus.m.d. B. Kaulakys, vykdytojai: vyriaus.m.d. V. Gontis, M. m.d. Alaburda, vyr.m.d. J.Ruseckas). Paskelbti 4 straipsniai ISI sąrašo žurnaluose.

Vykdamas šią temą, 2009 m. buvo išanalizuotos netiesinėmis stochastinėmis diferencialinėmis lygtimis generuojamų signalų statistinės savybės: laipsniniai skirstiniai, $1/f^{\beta}$ triukšmas, laipsninės autokoreliacijos ir antros eilės struktūrinės impulsų dydžio koreliacijos. Gautos artutinės analizinės išraiškos ir pateiktas jų palyginimas su skaitmeniniais rezultatais. Skaitmeniniais skaičiavimais pademonstruotas ryšys tarp siūlomo modelio ir kitų modelių, kur stebimas laipsninis signalo impulsų dydžių, laiko intervalų tarp impulsų ir impulsų pločių pasiskirstymas, panašiai kaip savaimė kylančių krizinių reiškinių sistemose. Matematinis modelis gali būti naudingas tyrinėjant įvairias laipsnines statistikas pasižyminčias sistemas. Pasiūlyta netiesinė stochastinė diferencialinė lygtis (SDL) kuri imituoja finansų rinkų grąžos skirstinį ir absoliutinės grąžos galios spektrinį tankį. SDL gauta, panaudojant analogiją su anksčiau pasiūlytu prekybos aktyvumo finansų rinkose stochastiniu modeliu, bei apibendrinta, naudojant neadityviosios statistinės mechanikos principus. Pasiūlytas stochastinis modelis leidžia skaitmeniškai generuoti grąžos laiko sekas, sėkminga atgaminančias dvi empiriškai Niujorko biržoje stebimas statistines savybes: tikimybės tankio skirstinį ir galios spektrinį tankį.

VSTS darbuotojai vykdė temą **„Daugiaatomių junginių elektroninių spektrų ir cheminio reakcingumo teorijos plėtra”** (2005 – 2009 m., vadovas vyriaus.m.d. V. Gineitytė, vykdytojai vyr.m.d. G. Vektaris, m.d. A. Vektarienė). Paskelbti 5 straipsniai

ISI sąrašo žurnaluose.

2009 m. toliau nagrinėtos anksčiau gautos nekanoninių molekulių orbitalių algebrinės išraiškos. Detaliai ištirta sąsaja tarp krūvio persiskirstymo dėl sąveikos molekulėse ir molekulinėse sistemose bei atitinkamų nekanoninių molekulių orbitalių papildomos delokalizacijos pobūdžio. Tam tikslui definuotos vadinamos delokalizacijos matricos ir nustatytas jų algebrinis ryšys su atitinkamos vienelektroninės tankio matricos blokais, atspindinčiais krūvio persiskirstymą sistemoje. Parodyta, kad atskiri šio pagrindinio sąryšio atvejai duoda sąsajas tarp bazinių funkcijų užpildymo skaičių ir pilnų atitinkamų molekulių orbitalių delokalizacijos koeficientų, o taip pat tarp parcialinių krūvio pernešimų tarp konkrečių bazinių funkcijų porų ir atitinkamų parcialinių delokalizacijos koeficientų. Šie rezultatai įgalino susieti pilną reaguojančios sistemos energiją su jos nekanoninių molekulių orbitalių delokalizacijos pobūdžiu, o tuo pačiu nagrinėti chemines reakcijas pasitelkiant šių orbitalių delokalizacines savybes bei jų formos pokyčius. Gautieji rezultatai pailustruoti konkrečiais pavyzdžiais. Buvo tęsiami ir alternantinių konjuguotųjų angliavandenilių bei jų darinių elektroninės sandaros dėsnų tyrimai. Šiais metais buvo lyginami dariniai su heteroatomais ir angliavandeniliai veikiami reagento (elektrofilo) substitucijos reakcijų metu. Gautos algebrinės išraiškos šių sistemų efektyviniams hamiltonianams užimtų motininio angliavandenilio nekanoninių orbitalių bazėje. Darbo rezultatai įgalino (a) pagrįsti klasikinį Koulsono modelį elektrofilinės aromatinės substitucijos reakcijoms, (b) pateikti naują atomo poliarizuojamumo interpretaciją per molekulinės orbitalės lokalizaciją ir (c) paaiškinti nagrinėjamųjų reakcijų mechanizmo bendrumą įvairaus dydžio sistemoms.

Kvantinės chemijos metodais, buvo tiriamas sulfenhalogenidų elektrofilinio prisijungimo prie nesočių darinių π ryšio regioselektyvumas, šio vyksmo metu susidarantių sandarų santykinis stabilumas, bei reakingumas. Šiais metais buvo detalizuojamas sulfenhalogenidų prisijungimo prie nesočių eteno darinių procesas. Teoriniam tyrimui buvo pasirinktas metilsulfenchlorido prisijungimo prie eteno π ryšio modelis. Skaičiavimai buvo atliekami *ab-initio* metodu naudojant 6-31G* bazę. Tuo tikslu, reakcijos potencinės energijos paviršiuje buvo nustatyti stacionarūs taškai, taip pat buvo apskaičiuota vidinė reakcijos koordinatė IRC (intrinsic reaction coordinate). Nustatyta kad, metilsulfenchlorido prisijungimo prie eteno π ryšio reakcijos eiga vyksta etapais: sieros atomui artėjant prie dvigubos jungties susidaro pereinama būseną - pirmos eilės balno taškas. Reakcijos eigoje ji transformuojasi iki episulfonio katijono intermedianto, tai yra lokalaus minimumo potencinės energijos paviršiuje. Tolesnį, regioselektyvų chlorido jono jungimąsi prie vieno iš episulfonio jono anglies atomų sąlygoja naujų pereinamų būsenų susidarymas. Gautos teorinės išvados pagrindžia eksperimentiškai gautus rezultatus.

Europos sąjungos 7 Bendrosios programos projektai

AO, ATS, BTS ir VSTS darbuotojai vykdė "Baltic Grid" FP6 projektą (2005.11.01-2009.04.30), "Baltic Grid II" FP7 projektą (2009.05.01-2010.04.30), vad. A. Edlund (Švedija), VU TFAI veiklų koordinatore vyriaus.m.d. G. Tautvaišienė.

2009 m. Astronomijos observatorijos spektroskopijos grupė toliau tobulino gridifikuotą spektrinės analizės programinį paketą SYNTSPEC bei jo vartotojo interfeisą

GRIDCOM aplinkoje. SYNTSPEC programinis paketas toliau adaptuojamas prie Gaia kosminės observatorijos duomenų formato. Nauja programinė įranga GRID aplinkoje buvo naudojama Galaktikos raudonosios sankaupos žvaigždėms tirti. SYNTSPEC tobulinimo rezultatai buvo pristatyti trijose tarptautinėse astronomijos bei skaičiuojamųjų tinklų mokslinėse konferencijose. 2009 metais buvo palaikomas BalticGrid-II projekto tinklapis, skelbiama nauja informacija bei kuriami vasaros mokyklos registracijos papildiniai. Per 2009 metus buvo užsiimama ir GRID švietimo veikla. Tarptautinių astronomijos metų proga buvo rengiamos paskaitos visoje šalyje, kurių viena skaityta bent penkis kartus, pristatė Grid pasiekimus Lietuvoje bei pasaulyje. 2009 gegužės 6 dieną buvo publikuotas straipsnis „Lietuvos astronomai išnaudoja GRID resursus“ mosklo ir technologijų portaluose Elektronika.lt ir Technologijos.lt bei naujienų portaluose Balsas.lt bei Globenews24.com.

TFAI klasteryje „Fobas“ įdiegtos visos programos, reikalingos atomų bei jonų spektrinėms charakteristikoms skaičiuoti Breito ir Paulio bei kvazireliatyvistiniame artinyje. Šio klasterio naudojimas leido žymiai išplėsti skaičiavimuose naudojamų funkcijų bazes. Dabar vienas skaičiavimas gali trukti dešimt ir daugiau dienų. Gridifikuota kompiuterinė programa atomų jonizacijos skerspjūviams Borno artinyje, atplėštųjų elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos, jono rikiavimo ir elektronais jonizuotų atomų fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrų skaičiuoti. Baigti Co_n ir Co_6O_m ($n=6,8,10,12,14, 16,18$, o $m= 1-9,12$) dalelių geometrinės ir elektroninės struktūros tyrimai. Nustatytos magnetinės ir optinės šių dalelių savybės. Su grido aplinkoje įdiegta VMAS programa atlikti didelės apimties reliatyvistinių banginių funkcijų bazių konfigūracijų tarpusavio sąveikos įvertinimai.

Institutas šiuo metu valdo tris skaičiavimų klasterius (dangus.itpa.lt, atomas.itpa.lt ir spektras.itpa.lt), kurių pajėgumai siekia iki 100 procesorių kartu sudėjus. Klasteriai yra atviri visiems Lietuvos mokslininkais, tačiau dažniausiai jais naudojasi VU TFAI darbuotojai naudodami savo sričių programinę įrangą (davinci, gauss, gaussian, syntspec, geant4 ir kt.). Vienu metu juose dirba apie 100 darbų, kai kurie net mėnesių trukmės. Atsiradus laisvų skaičiavimo pajėgumų, juos užpildo nuolat ateinantys darbai iš CERN CMS ir LHCb modeliavimo programų. Šiuo metu klasteriuose instaliuota 20 GB programinės įrangos. Šiuo metu kiekviename iš DANGAUS klasterio kompiuterių yra po 128 GB operatyviosios atminties, kas leidžia naudoti sudėtingas ir komplikuotas fizikinių skaičiavimų programas. Tokio klasterio analogo Lietuvos mokslo institucijose šiuo metu nėra. 2009 06 29 – 07 03 VU TFAI organizuota BalticGrid-II vasaros mokykla VU TFAI Molėtų astronomijos observatorijoje Kulionių kaime Molėtų rajone, paruošta lankstinukų ir plakatų.

ATS darbuotojai vykdė **FP7 EURATOM** projektą **ITER** tyrimams pagal Europos Komisijos asociacijų kontraktą tarp EUROATOM ir LEI (Nr. FU07-CT-2007-00063) ir sutartį tarp LEI ir VU TFAI, atsakinga vykdytoja vyr.m.d. A.Kupliauskienė, dalyvo 11 skyriaus darbuotojų.

2009 m. toliau buvo generuojami atominiai parametrai, svarbūs plazmos diagnostikai. Naujas kvazireliatyvistinis artinys taikytas volframo daugiakrūviams jonams nuo W^{+29} iki W^{+37} su atviru 4d elektronų sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje tirti. Įvertintas kaskadų ir relaksacijos efektų vaidmuo po vakansijos sukūrimo elektronų smūgiu W^+ , W^{3+} ir W^{5+} jonuose. Apskaičiuoti sužadinių stipriai W^{45+} jonams, naudojant reliatyvistinį R-matricos metodą bei magnetinių dipolinių šuolių charakteristikos Dirako ir

Foko artinyje volframo daugiakrūviams jonams nuo W^{+29} iki W^{+37} . Taip pat kvazireliatyvistinis artinys taikytas W II energijos spektrui ir šuolių charakteristikoms skaičiuoti. Taikant kvazireliatyvistinį artinį atlikti pradiniai W II jono tyrimai, kurie parodė, teoriniai rezultatai savo apimtimi žymiai viršija esamus eksperimentinius duomenis. Atlikti skaičiavimai rodo, kad tikėtiniausių elektrinių dipolinių šuolių bangų ilgiai yra intervale, kuriame atliktų naujausių eksperimentų metu spinduliuotė neregistruojama.

AO darbuotojai vykdė **FP7 projektą “Tyrėjo naktis Lietuvoje 2009” (ReNiLit 2009)**. (2009.05.01-2009.10.31), koordinatorius V. Mildažienė (Vytauto Didžiojo universitetas), VU TFAI koordinatorius vyr.m.d. A. Kazlauskas.

Vykdamas šį projektą, kartu su partneriais (Vytauto Didžiojo universitetas, Vilniaus universitetas, Šiaulių universitetas, Klaipėdos universitetas, Lietuvos žemės ūkio universitetas, Lietuvos veterinarijos akademijos Gyvulininkystės institutas, I. I. „Expertus Vilnensis“, UAB „Fermentas“) 2009 m. rugsėjo 26 d. organizuotas renginys visuomenei, pristatant VU TFAI mokslininkus ir jų darbą.

COST projektai

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant COST P19 „**Medžiagų daugiapakopis modeliavimas**“ projektą. Projekto koordinatorė: vyr.m.d. J. Tamulienė, vykdymo trukmė: 2009 m.

Nustatyta, kad kobalto oksido dalelių magnetinės savybės priklauso nuo to, kiek dalelėje yra Co-Co jungčių sudarytų iš ardančių orbitalių ir Co atomų oksidacijos laipsnio. Be to yra svarbu, koks yra dalelės dipolinis momentas, t.y. kokia yra elektronų krūvio lokalizacija. Rasta, kad kobalto oksido dalelė bus paramagnetikas, kai joje bus nesukompensuotas silpnai sąveikaujančių elektronų, esančių ant ardančios orbitalės, sukiny, ir kurio nekompensuoja jono sukiny. Co_6 nanodalelė bus labiau ardoma tuo atveju, jei ji pateks tarp dendrimero šakų. Remiantis tyrimų rezultatais, galima prielaida, kad tiriant PPI dendrimerus į kuriuos yra įterptos Co nanodalelės, dalelės spektro linijos bus stebimos tik IR srityje ir mikrobangų diapazone, o UV ir Vis srityje bus stebimas tik dendrimero spektras. Atlikti tyrimai parodė, kad Co nanodalelės vandenyje turėtų būti išardomos, o susidarę Co jonai deprotonuos vandens molekulės ko pasekoje susidaro koordinaciniai kobalto junginiai. Tikėtina, kad 310 ir 340 K temperatūroje deprotonacijos procesas vyks sparčiau. Be to, kas sudarys Co koordinacinius junginius (kas bus šio komplekso ligandai) priklauso nuo to, koks yra vandens ir Co atomų santykis.

ATS darbuotojai vykdė COST D35 programą „**Nuo molekulės iki molekulinio prietaiso**“ (2005–2010). Atsakingas vykdytojas vyr.m.d. A. Tamulis, vykdytojas VU FF magistrantas Mantas Grigalavičius.

2009 m. atlikti dirbtinių besidauginančių ląstelių, susidedančių iš squarino ir $Ru(bpy)_3^{2+}$ sensibilizatorių bei riebalinių rūgščių, prekursorių (maisto) bei vandens molekulių (apie 2000 atomų), tikslūs tankio funkcionalo teorijos kvantmechaniai savi-susidarymo modeliavimai, naudojant nekanoninį nukleotidą 8-oxo-guaniną, kuris efektingai relaksuoja fotosintetinę sistemą po sužadavimo šviesa. Dar vienas svarbus šių

metų darbas, suprantant, kaip atsirado ir evoliucionavo pirminė gyvybė, buvo atliktas instaliuojant kelių rūšių nukleotidų molekules ir jų sekas, kurios leidžia evoliuciškai išlikti pirminėms ląstelėms su tam tikra genetinė nukleotidų seka, o tai savo ruožtu nulėmė genomo atsiradimą pirmųjų baltymų siteizei.

VSTS darbuotojai vykdė Europos mokslo fondo COST MP0801 projektą „**Konkurencijos ir konfliktų fizika veikla**“. Atsakingas vyriaus.m.d. V. Gontis, dalyvauja vyriaus.m.d. B. Kaulakys, m.d. M. Alaburda, vyr.m.d. J. Ruseckas, inž. A. Kononovičius.

2009 metais toliau tiriant signalų, generuojamų netiesine stochastine diferencialine lygtimi (NSDL), savybes gautos jų autokoreliacinės funkcijos ir antros eilės struktūros funkcijos analizinės išraiškos ir pademonstruota, kad jos puikiai atitinka skaitmeninių skaičiavimų rezultatus. Lygčių skaitmeniniu tyrimu parodyta, kad signalui būdingi staigūs sužadainimai, pasireiškiantys dideliais nukrypimais nuo vidutinių signalo verčių, o sužadainimų amplitudė yra proporcinga sužadainimo trukmės kvadratui. Kita vertus, šis stochastinis modelis yra ne tik vienas iš daugelio $1/f$ triukšmo atsiradimo mechanizmų, bet apibendrina daugelį jo atsiradimo scenarijų: savaiminius kritinius procesus, Puasono proceso klasterizaciją, defektų ir priemaišų difuziją puslaidininkuose, $1/f$ triukšmo atsiradimą nano kanaluose ir joninių kanalų srovėse. Parodyta, kad Puasono procesas su lėtai stochastiniu būdu kintančia vidutine trukme tarp impulsų gali būti vaizduojamas kaip superstatistikos atvejis su $1/f$ triukšmu. Puasono tipo trukmės tarp impulsų skirstinys tokiam procese gali būti išreikštas q-Gauso eksponente, atsirandančia neadityviosios statistinės mechanikos interpretacijoje. Pasiūlyta nauja stochastinės diferencialinės lygties forma, kuri leidžia atgaminti svarbiausias finansų rinkose stebimos gražos statistines savybes. Visi lygties parametrai yra nustatomi iš empirinių duomenų ir yra atsakingi už specifines finansų rinkos savybes.

VSTS darbuotojai vykdė Europos mokslo fondo programą ir Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros (TPA) projektą COST D37 „**Grid skaičiavimai chemijoje: GRIDCHEM**“. Pradžia 2009 lapkričio 16 d., vadovė m.d. A. Vektarienė.

2009 metais tankio funkcionalo metodu naudojant B3LYP funkcionalą ir 6-311G* bazę buvo tiriamas π -konjuguotų heterociklų aminopakeistų 1,5-benzodiazepinonų ir glutakonato heterociklizacijos procesas. Siekiant paaiškinti cikloprisijungimo reakcijos krypties regioselektyvumo priežastis bei suprasti piridino žiedo formavimosi prigimtį nagrinėjamoje reakcijoje, buvo atliktas pradinių junginių pusiausvirų geometrijų optimizavimas ir konformacinė analizė, bei lokalaus jonizacijos potencialo skaičiavimai molekulės elektroninio tankio izopaviršiuje. Atlikti skaičiavimai parodė, kad ciklizacijos reakcijos krypties regioselektyvumą gerai paaiškina lokalaus jonizacijos potencialo charakteristikos. Gauti skaičiavimo rezultatai rodo atitikimą su eksperimentu.

Tarptautinių fondų ir organizacijų finansuojami projektai

ATS toliau vykdė Taivano, Latvijos ir Lietuvos vyriausybių remiamą projektą

„Taivano ir Baltijos atomų spektroskopijos ir jų elgesio stipriuose lazerio laukuose teoriniai tyrimai” (2007.08.01 – 2009.07.31, vad. vyriaus.m.d. Z. Rudzikas, atsakinga vykdytoja vyr.m.d. A. Kupliauskienė, vykdytojai vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Tutlys, vyr.m.d. G.Merkelis, O.Rancova, j.m.d. R.Juršėnas, vyr.m.d. V.Jonauskas, vyr.m.d. S.Kučas, vyriaus.m.d. R.Karazija, vyr.m.d. R.Karpuškienė.

2009 m. Toliau tęsti poliarizuotos spinduliuotės rezonansinės sklaidos tyrimai, parašyta ataskaita anglų kalba už 2008.08.01 – 2009.07.31 laikotarpį, taip pat ataskaitos lietuvių kalba TPA už 2006.08.01-2009.07.31 ir 2008.08.01 – 2009.07.31 laikotarpius.

ATS vykdė tarptautinį projektą **„Supersunkių atomų ir jonų su atominiu numeriu $Z = 122$ spektrinių charakteristikų teorinis tyrimas”** (Theoretical studies of spectroscopic properties of superheavy atoms and ions with atomic number $Z=122$, Service Contract No 211828-11-2008 KAR LT). Vadovas vyriaus.m.d. G.Gaigalas, vykdytojai: vyriaus.m.d. Z.Rudzikas, inž. E.Gaidamauskas, 2009 m.

Vilniuje sukurtos metodikos buvo išbandytos patiems sunkiausiems cheminiams elementams teoriškai nagrinėti. Rezultatai liudija apie aukštą išplėtotų metodų ir parašytų kompiuterinių programų efektyvumą ir tinkamumą tirti tokius atomus. Daugiakonfiguracionio Hartrio ir Foko metodu teoriškai išnagrinėtas $Z=122$ elemento spektras.

ATS pradėjo vykdyti Pasaulinės mokslininkų sąjungos (World Federation of Scientists) remiamą projektą **„Energijos pataisų skaičiavimas su algebrine programa Mathematica”**. Vadovas vyr.m.d. G. Merkelis, vykdytojas j.m.d. R.Juršėnas. Pradėtas 2009 kovo mėn., trukmė vieni metai.

Gautos stacionarios atomo trikdžių teorijos antros ir trečios eilės pataisos simbolinio programavimo paketu *NCoperators* (*Mathematica* kalba), kurio pagalba kiekviena pataisa atvaizduojama Goldstone'o diagramomis bei analizinėmis išraiškėmis. Generuojant pirmos ir antros eilės banginės funkcijos operatorius, buvo atsižvelgta į veidrodinio atspindžio vertikaliąją ir horizontaliąją simetrijas bei vertikalios ir horizontalios simetrijų kompoziciją. Pradėtos generuoti trečios eilės efektyvio Hamiltoniano pataisos.

AO pradėjo vykdyti Pasaulinės mokslininkų sąjungos (World Federation of Scientists) remiamą projektą **„Artimų Žemei objektų astrometrija ir fotometrija“** (nuo 2009.12.01); vadovas vyr.m.d. K. Černis, vykdytoja j.m.d. E. Stonkutė.

Kiti tarptautiniai projektai

AO skyrius dalyvavo vykdant projektą **„ESA orbitinės observatorijos “Gaia” instrumentinės bazės optimizavimas”**, 1995 – 2011 m., projekto mokslinis vadovas F. Jansen (ESA-ESTEC), kuriame dalyvauja 8 AO darbuotojai: vyriaus.m.d. V. Straižys, vyriaus.m.d. G. Tautvaišienė, vyr.m.d. A. Kazlauskas, vyr.m.d. A. Kučinskas, m.d. K. Zdanavičius, m.d. R. Lazauskaitė, j.m.d. V. Laugalys, tyrėjas-astronomas G. Valiauga. Vyriaus.m.d. V. Straižys vadovavo 8-sios komisijos “Astrofizikiniai parametrai” darbo grupei “Anomalios cheminės sudėties žvaigždės” (2006 – 2010).

2009 m. toliau nagrinėtos galimybės, kaip klasifikuoti žvaigždes iš jų supermažos dispersijos Gaia BP/RP spektrų. Pasiūlytas naujas metodas fotometrinei spektrų klasifikacijai.

AO skyrius dalyvavo vykdant tarptautinį projektą “**Visos Žemės Teleskopas**” (WET) (nuo 1986 m., koordinatorius: Delavaro astrofizinio tyrimų centras (DARC), JAV, direktorė: dr. Judi Provencal, dalyvauja 29 pasaulio observatorijos, tame tarpe ir Molėtų AO. Projekte dirba AO darbuotojai vyr.m.d. R. Janulis ir m.d. E. Pakštienė).

Vykdamas šį projektą, 2009 m. panaudojus WET 2006 m. nepertraukiamą 436 val. greitos fotometrijos stebėjimus, išanalizuotas baltosios nykštukės GD358 pulsacijų spektras, Fourier transformacijų metodu nustatyti 27 nepriklausomi pulsacijų dažniai. Analizei taip pat panaudoti ir ankstesnių 24 metų stebėjimai. Pradėti analizuoti baltosios nykštukės EC14012-1446 300 valandų stebėjimų preliminarūs rezultatai. MAO su 165 cm teleskopu atlikti WET kampanijos XCOV27 stebėjimai. Dalyvauta egzoplanetų paieškos programoje 2009 m. rugpjūčio mėn. Toliau tęsiami DAV žvaigždės PG2303+243 stebėjimų analizė, patikslintas galutinis pulsacijų pagrindinių dažnių sąrašas. Pagal 2004 m. rugsėjo mėn. ir 2005 m. rugsėjo mėn. žvaigždės PG2303+243 stebėjimų sesijų rezultatus detaliam išanalizuotas šios žvaigždės pulsacijų spektras. Iš nustatytų 69 dažnių sudarytas 26 nepriklausomų dažnių sąrašas, kuris gali būti panaudotas žvaigždės modeliavimui. Apdoroti keturių delta Scuti kintamų žvaigždžių CCD vaizdai, gauti 2008 m. spalio 3-19 d. stebėjimų metu Teidės observatorijoje su 1.5 m infraraudonųjų spindulių teleskopu (TCS, Telescopio Carlos Sanchez). Nustatyta, kad viena iš stebėtų žvaigždžių (2MASS J01361570+5414070) yra kintama daugiaperiodinė žvaigždė, tačiau detali pulsacijų spektro analizė dar neatlikta. Kitų trijų žvaigždžių (HD 10502, HIP 2923 and HIP 15000) kintamumas dar nėra ištirtas.

VSTS darbuotojai vykdė B.Visby projektą moksliniam bendradarbiavimui su Prof. I. Zozulenko mokslinėje grupėje Linkopingo universitete, Švedijoje “**Electronic, Transport and Electromagnetic Properties of Graphene Layers and Nanoribbons**”, 2009-2011. Vadovai vyriaus.m.d. G. Juzeliūnas ir I. Zozoulenko (Linkopingo Universitetas), vykdytojai Lietuvoje vyr.m.d. J. Ruseckas, stažuot. A. Mekys, stažuot. V. Kudriašovas ir stud. T. Andrijauskas.

Projektas pradėtas vykdyti 2009 metų pabaigoje. Pradėtos tirti grafeno elektrinės ir optinės savybės.

Lietuvos valstybinio mokslo ir studijų ir Tarptautinių programų fondų projektai

AO darbuotojai dalyvavo LVMSF finansuojamame projekte “**Didžiojo Magelano debesies cheminės raidos istorija**“ (2009 m.), Projekto koordinatorius: vyr.m.d. Arūnas Kučinskas, VU TFAI AO projekto dalyviai: m.d. R. Lazauskaitė (VPU), m.d. J. Sperauskas, j.m.d. A. Ivanauskas, inž. A. Černiauskas.

Vykdamas šį projektą, 2009 m. buvo sukurtas Didžiojo Magelano debesies žvaigždžių spiečių fotometrinių *JHK_s* stebėjimų katalogas (viso 1717 spiečių). Spiečių

žvaigždžių fotometrinių stebėjimų duomenys atrinkti iš SIRIUS JHK_s katalogo, atsižvelgiant į kiekvieno spiečiaus struktūrinius parametrus, kurie taip pat buvo nustatyti šiame darbe. Kiekvieno spiečiaus spalvos – ryškio diagrama statistiškai išvalyta nuo lauko žvaigždžių. Sukurta spiečių fotometrinių metalingumų analizės metodika ir ją realizuojanti programinė įranga. Ištirtos Magelano debesų žvaigždžių spiečių raudonosios milžinių sekos fotometrinių savybių sąsajos su spiečiaus metalingumu. Gauti nauji sąryšiai, siejantys šių spiečių raudonosios milžinių sekos vidutines fotometrines spalvas su spiečiaus metalingumu prie absoliutinių ryškių $M_{K_s} = -5.5, -5.0$. Panaudojant Didžiojo Magelano debesies spiečių fotometrinius stebėjimus ir spiečiaus raudonosios milžinių sekos posvyrio – metalingumo sąryšį gauti patikimi fotometriniai metalingumo įverčiai 56 vidutinio amžiaus Didžiojo Magelano debesies žvaigždžių spiečiams. Pasitelkus naujai gautus spiečių metalingumų duomenimis atlikti Didžiojo Magelano debesies cheminės raidos tyrimai. Nors didesnėje galaktikos dalyje cheminės evoliucijos istorija greičiausiai yra vienoda, atskirose vietose (pvz., šiaurinėje Didžiojo Magelano debesies disko dalyje) spiečių metalingumo pasiskirstymas skiriasi nuo stebimo kitose šios galaktikos vietose. Pastebėta didžiausio metalingumo spiečių koncentracija galaktikos centrinėje dalyje. Nors spiečių metalingumų erdvinis pasiskirstymas panašus į šios galaktikos lauko žvaigždžių metalingumų pasiskirstymą, egzistuoja skirtumai, kurie rodo, jog spiečių cheminės raidos istorija Didžiajame Magelano debesyje skiriasi nuo lauko žvaigždžių populiacijų cheminės raidos.

AO ir ATS darbuotojai dalyvavo LVMSF finansuojamam projekte „**Taikomųjų uždavinių tyrimai ir realizavimas naudojant grid technologijas**“ (GridTechno), Projekto koordinatorė vyr.m.d. J.Tamulienė, dalyvavo šie ATS darbuotojai: vyr.m.d. V.Jonaskas, vyriaus.m.d. P. Bogdanovičius, vyr.m.d. R. Karpuškienė, vyr.m.d. R. Kisielius, vyr.m.d. S. Kučas, vyr.m.d. A. Kupliauskienė, m.d. O.Rancova. Vykdomo trukmė: 2009 m. liepos mėn. – 2009 m. gruodžio mėn.

2009 m., vykdant šį projektą, atnaujinti atomas.itpa.lt, spektras.itpa.lt, dangus.itpa.lt ir fobas.itpa.lt host sertifikatai. Kaip ir 2008 m., serveriuose buvo atnaujinama gLite programinė įranga, kai tik atnaujinimai būdavo išleidžiami, ir patvirtinama, kad jie sėkmingai buvo įdiegti kituose klasteriuose. Klasterių SAM testų rezultatai peržiūrimi kiekvieną dieną. Kas savaitę daromos pilnos CE ir SE elementų atsarginės kopijos. Serverių patalpoje įvesta vėdinimo sistema, kuri užtikrina stabilų visų klasterių darbą vasaros laikotarpiu.

Naudojant SYNTSPEC programinę įrangą optiniame žvaigždžių spektro diapazone buvo sumodeliuota virš 800 linijų, kurios buvo palygintos su linijomis esančiomis eksperimentiniame Saulės spektre. Iš visų optiniame diapazone matomų linijų buvo atrinktos tik tos, kurios gerai matomos Saulės atmosferos spektre. Iš šių linijų sudarytas kobalto linijų duomenų rinkinys cheminės gausos nustatymui. Pastebėta, kad nustatyti Co atominiai parametrai gerina prieš tai naudotus nustatant cheminę gausą per 0.15 – 0.1 dex. Preliminariai galima teigti VU TFAI nustatyti Co parametrai yra geresni už pateikiamus VALD ir NIST bazėse. Tiksliesni rezultatai gaunami 70% linijų matomų optiniame ruože, 10% linijų rezultatų tikslumas nepakito.

Kaip ir praeitais metais, taip ir šiais buvo atliekami intensyvūs skaičiavimai naudojant programas įdiegtas grid aplinkoje. Šias metais papildomai buvo gridifikuota ir pradėta naudoti kvantinės chemijos programa Demon. Vykdamas darbus susijusius su gridu

aplinkos panaudojimu atominiais skaičiavimams, buvo sukurta metodika, leidžianti efektyviai įvertinti konfigūracijų maišymosi stiprumus ir atrinkti konfigūracijas, turinčias didžiausią įtaką rezultatų tikslinimui.

Paruoštos Mechanikos ir optikos laboratorinių darbų atmintinės VPU studentams yra įdiegtos SIG aplinkoje. Šis portalas sėkmingai naudojamas mokymo procese. Be to, su VU pagalba, SIG aplinkos portalo teikiamos paslaugos buvo panaudotos Tarptautinės NDTCS konferencijos darbe. Buvo sukurta šios konferencijos tinklalapis, vykdoma dalyvių registracija, bendravimas su jais. Šio portalo paslaugomis iki šiol naudojami minėtos konferencijos organizacinis komitetas ruošiant konferencijos darbų leidinį. Tarpininkauta, kad Lietuvos fizikų draugijos tinklalapis būtų perkeltas į grid'ą.

Šiais metais aplankyta keletas vidurinių mokyklų, kuriose moksleiviams buvo papasakota apie LitGrid ir jo vystymo perspektyvas. Kartu su KTU paruošė informatikos mokytojų mokymo programą, kurios tikslas IT mokytojams suteikti žinių: apie GRID'ą, jo panaudojimo galimybes, kaip susikurti ir naudotis virtualiomis mašinomis (VM); apie Unix OS, reikalingų darbui GRID tinkle; apie virtualias organizacijas bei jų privalumus mokymosi procese. Šiuo metu ši programa yra ruošiamą akreditacijai.

ATS darbuotojai vykdė Lietuvos valstybinio Mokslo ir studijų fondo ir Tarptautinių technologijų plėtros agentūros remtą projektą „**Elektronais sužadintų sudėtingų atomų ir molekulių eksperimentinis ir teorinis tyrimas**”. Vadovė vyr.m.d. A.Kupliauskienė, vykdytojai vyr.m.d. J.Tamulienė, vyriaus.m.d. P.Bogdanovičius, vyr.m.d. V.Jonauskas, m.d. O.Rancova, j.m.d. R.Juršėnas. Sutarties terminai 2009 m. kovo – gruodžio mėn.

Cezio atomo autojonizacinių energijos lygmenų vertės ir radiacinių šuolių tikimybės apskaičiuotos dviem metodais: kvazireliatyvistiniu ir reliatyvistiniu Dirako ir Foko. Skaičiavimo rezultatai panaudoti pirmą kartą išmatuoto cezio $5p^6$ elektronų sluoksnio autojonizacijos skerspjūvio nuo 12,3 iki 16,6 eV energijų intervale ypatingumams paaiškinti. Autojonizacijos skerspjūvis turi ryškų rezonansą, kurio maksimumas yra ties 14,7 eV ir lygus $4.8 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Įvertintas jo indėlis pilnutiniame cezio jonizacijos elektronais skerspjūvyje. Ištirtas dalinio matricų diagonalizavimo metodo, realizuoto VU TFAI kompiuterinėje programoje, efektyvumas. Palyginus diagonalizavimo trukmes ir diagonalizuojamų matricų eiles su analogiškoms PAPAC ir PRIMME bibliotekų proramomis nustatyta, kad projekto dalyvių naudojama programa yra efektyvesnė. Išvestos atomo antros eilės efektinio hamiltoniano bendrosios išraiškos atsviriems elektronų sluoksniams jį ryšyje. Ištirtos trys galimos POPOP molekulės struktūros ir įvertinti jų sklaidos skerspjūviai vykstant sekančiai reakcijai: $e + \text{POPOP} = \text{POPO}^-$ (neigiamas jonas). Nustatyti Vis-UV ir vibraciniai spektrai. Apskaičiuota vienos iš struktūrų įvairių fragmentų energijos ir nustatyta, kokios fragmentacijos reakcijos galėtų vykti kai ši molekulė sąveikauja su elektronu. Nustatyta uracilo geometrinė struktūra. Įvertintas sklaidos skerspjūvis bei Vis-UV ir vibraciniai spektrai.

VSTS darbuotojai vykdė VMS fondo mokslinės stažuotės projektą S-10/2009 „**Šviesos pluoštų sklaidimas ir išsaugojimas atomų dujose**”, 2008.04.04 – 2010.04.04. Vadovas vyriaus.m.d. Gediminas Juzeliūnas, vykdytojas: stažuotojas Algirdas Mekys, vyr.m.d. J.Ruseckas.

2009 metais projekte buvo išplėtotas poliaritoninis modelis šviesos sąveikos su atomų, apibudinamų tripodo konfigūracijos energijos lygmenimis, terpėmis. Pasitelkiant polaritonų formalizmą, atomų sąveiką su šviesa aprašančios judėjimo lygtys buvo transformuotos į dvi sąveikaujančių poliaritonų lygtis, kurias sieja efektyvieji vektoriniai ir skaliariniai potencialai. Esant tam tikroms sąlygoms šias dvi lygtis galima atskirti ir spręsti kiekvieną jų atskirai. Šio metodo privalumas yra atgaminamo elektrinio šviesos lauko ir tamsiojo poliaritono sąryšio paprastumas.

VSTS darbuotojai vykdė VMS fondo mokslinės stažuotės projektą S-23/2009 **“Lėtų ir stacionarių poliaritonų dinamika ir jos valdymas”**, 2009.03 – 2011.04. Vadovas vyriaus. m. d. Gediminas Juzeliūnas, vykdytojas stažuotojas Viačeslavas Kudriašovas. Tema vykdoma bendradarbiaujant su VSTS vyr.m.d. Juliumi Rusecku.

2009 buvo teoriškai nagrinėjamos lėtųjų ir stacionariųjų poliaritonų savybės, kai atomų energijos lygmenys apibudinami dvigubo tripodo konfigūracija, kurią sudaro trys pagrindinės bei dvi sužadintos elektroninės būsenos. Buvo tiriamas dviejų zonduojančių šviesos laukų sklidimas sistemoje, veikiamoje keturiais didesnio intensyvumo kontroliniais lazerio pluoštais. Parodyta, kad tuomet susidaro dvikomponentiniai lėtieji poliaritonai pasižymintys neutrino tipo osciliacijos tarp zonduojančių laukų. Esant dvifotoniam išderinimui tarp atomo lygmenų, gali susidaryti stacionarieji poliaritonai, aprašomi Dirako tipo lygtis reliatyvistinei dalelei su baigtine mase.

VSTS darbuotojai vykdė LMT podoktorantūrinės stažuotės projektą Nr. 32 **“Daugiakomponenčiai lėtieji poliaritonai šaltųjų atomų dujose”**, 2009.10 – 2011.10. Vadovas: vyriaus. m. d. Gediminas Juzeliūnas, vykdytojas mokslininkas-stažuotojas Julius Ruseckas.

VSTS darbuotojai vykdė VMS ir TPA fondų remtą dvišalio bendradarbiavimo mokslinių tyrimų ir eksperimentinės plėtros srityse Lietuvos-Prancūzijos integruotos veiklos programos «Žiliberas» projektą **“Šviesos sukurti kalibruotiniai potencialai labai šaltųjų atomų dujose”**, 2009 – 2010. Vadovas: vyriaus. m. d. Gediminas Juzeliūnas, vykdytojai: vyr.m.d. J. Ruseckas, stažuotojas A. Mekys, stažuotojas V. Kudriašovas. Tema vykdoma bendradarbiaujant su Prof. J. Dalbard'o moksline grupe Paryžiuje, CNRS.

Parodyta, kad šaltiesiems atomams galima sukurti neabelinius kalibruotinius potencialus, atitinkančius Rashba-Dresselhaus'o sukinių ir orbitos sąveiką su sukinių vertėmis didesnėmis už $\frac{1}{2}$. Tokie potencialai gali būti sukurti naudojant šaltuosius atomus turinčius tris ir daugiau vidines tamsias būsenas ir todėl pasižyminčius kvazisukiniu, lygiu vienetui arba didesniu. Vienetinio kvazisukinio atveju atomų masės centro judėjimo energijos spektre gaunamos trys cilindriškai simetriškos dispresijos šakos. Dvi iš šių dispresijos šakų yra panašios į Rashba hamiltoniano su sukiniu $\frac{1}{2}$ dispresijos šakas. Todėl atomo judėjimas, esant mažiems banginiams vektoriams, pasižymi kvazireliatyvistiniu pobūdžiu. Be to, susiformuoja dar viena papildoma dispresijos šaka, kuri gali sukelti daugelį įdomių reiškinių, pvz., atomų idealų neigiamą lūžį ties potencialo barjeru.

AO darbuotojai vykdė VMS ir TPA fondų remtą dvišalio „**Lengvųjų cheminių elementų ir neutronų pagavimo reakcijų metu sintezuojamų cheminių elementų gausa kamuolinių spiečių žvaigždžių milžinių atmosferose kaip žvaigždžių ir spiečių raidos indikatorius**“ (2009-2010 m.), projekto koordinatorius: vyr.m.d. Arūnas Kučinskas, VU TFAI, AO projekto dalyviai: m.d. R. Lazauskaitė, m.d. J. Sperauskas, j.m.d. A. Ivanauskas, inž. A. Černiauskas.

Vykdamas šį projektą, 2009 m. panaudojant 3D hidrodinaminį žvaigždės atmosferos modelį apskaičiuotas raudonosios milžinės spektras plačiame bangų ilgių intervale (0.3–40 μm), ištirtos globalios spektro savybės ir skirtumai nuo 1D klasikinio atmosferos modelio spektro. Tai – kol kas pirmasis tokio pobūdžio darbas, kuriame raudonosios milžinės spektras apskaičiuotas, pasitelkiant pilno 3D spinduliuotės pernašos uždavinio sprendimo metodiką. Ištirti įvairių cheminių elementų spektro linijų formavimosi raudonųjų milžinių atmosferose ypatumai, nustatytos 3D–1D gausų pataisos įvairiems cheminiams elementams (neutraliems ir jonizuotiems atomams, molekulėms) esant skirtingiems spektro linijų bangų ilgiams ir sužadavimo potencialams. Pradėti šių pataisų priklausomybės nuo žvaigždės atmosferą charakterizuojančio metalingumo tyrimai. Nustatytos natrio, magnio ir bario 1D NLTE gausos keturiose Galaktikos kamuolinių spiečių M10 ir M71 žvaigždėse. Gauti rezultatai rodo, jog vidutinis [Na/Fe] santykis (+0.30dex) tirtose raudonosiose milžinėse yra gerokai didesnis nei Galaktikos halo žvaigždėse. Magnio–geležies santykiai taip pat teigiami (+0.15 ... +0.28 dex), tačiau magnio perteklius šiuo atveju yra mažesnis nei stebimas halo žvaigždėse. Bario–geležies santykis artimas šių elementų gausų santykiui Saulės fotosferoje, [Ba/Fe] = –0.14 ... +0.09. Gauti rezultatai rodo, jog šių elementų (išskyrus natrio) gausas didžiąja dalimi apsprendžia maišymosi procesų šių žvaigždžių atmosferose pobūdis ir gerokai mažiau įtakoja pradiniai spiečiaus cheminės sudėties skirtumai. Įvertintos 3D–1D gausų pataisos natrio, magnio ir bario spektro linijoms spiečiaus M71 žvaigždei N30. Įdomu pažymėti, jog šios konkrečios žvaigždės atveju visiems elementams 3D–1D gausų pataisos yra mažos, <0.02 dex, tačiau jos itin stipriai priklauso nuo mikroturbulencijos greičio vertės, kuri naudojama skaičiuojant 1D stacionarius atmosferų modelius.

Lietuvos vyriausybės remiamos programos

AO, ATS, BTS ir VSTS darbuotojai dalyvavo Lietuvos Vyriausybės finansuojamoje „**Lietuvos GRID – lygiagrečių ir paskirstytų skaičiavimų tinklas**“ (LitGrid) programoje (nuo 2005 m., VU TFAI koordinatorė vyr.m.d. J. Tamulienė). Šios programos tikslas – vystyti, palaikyti ir testuoti Lietuvoje esančią kompiuterinių klasterių ir jų tinklų infrastruktūrą bei apmokyti naujus vartotojus. Projektas vykdomas kartu su 10 kitų Lietuvos mokslo ir studijų institucijų.

Vykdamas šį projektą, 2009 m. VU TFAI astronomai, kartu su atominės fizikos specialistai parengė atnaujintą kobalto atominių parametų duomenų bazę. Šiam tikslui COWAN programa yra sumodeliuoti įvairių galimų šuolių osciliatorių stipriai. Naudojant COWAN skaičiavimo paketą, yra atlikti $3d^7 4s^2 - 3d^7 4s 4p$, $3d^8 4s - 3d^8 4p$, $3d^7 4s^2 - 3d^6 4s^2 4p$, $3d^8 4s - 3d^7 4s 4p$, $3d^9 - 3d^8 4p$ šuolių tyrimai (suskaiciuota apie 4000 linijų). Linijų bangų ilgių kalibracija atlikta pasitelkiant VALD ir NIST duomenų bases. Naudojant SYNTSPEC programinę įrangą optiniame žvaigždžių spektro diapazone buvo sumodeliuota virš 800 linijų, kurios buvo palygintos su linijomis esančiomis

eksperimentiniame Saulės spektre. Iš visų optiniame diapazone matomų linijų buvo atrinktos tik tos, kurios gerai matomos Saulės atmosferos spektre. Iš šių linijų sudarytas kobalto linijų duomenų rinkinys cheminės gausos nustatymui. Pastebėta, kad nustatyti Co atominiai parametrai gerina prieš tai naudotus nustatant cheminę gausą per 0.15 – 0.1 dex. Preliminariai galima teigti VU TFAI nustatyti Co parametrai yra geresni už pateikiamus VALD ir NIST bazėse. Tiksliesni rezultatai gaunami 70% linijų matomų optiniame ruože, 10% linijų rezultatų tikslumas nepakito.

BTS darbuotojai dalyvavo Lietuvos vyriausybės remiamoje programoje **„Bendradarbiavimas su CERN“**. Dalyvavo: vyr.m.d. E. Norvaišas, vyr.m.d. A. Juodagalvis, m.d. A. Acus, m.d. K. Tamošiūnas, j.m.d. D. určiukonis.

2009 m. sausio-vasario mėnesiais vyr.m.d. A. Juodagalvis dalyvavo CMS duomenų analizės programinės įrangos naudojimo mokymuose „Using Physics Analysis Toolkit (PAT) in your analysis“ (CMSSW_2_2_3, PAT v.1). Atnaujintą kursą (CMSSW_2_2_13, PAT v.2) iš dalies pakartojo birželio mėnesį. Šio vizito metu A. Juodagalvis dalyvavo ir pradiniuose „CMS Week“ renginiuose. Pagal susitarimą su Floridos Universiteto (Gainesville, Florida) mokslininkais A. Juodagalvis rugpjūčio-spalio mėnesiais stažavosi CERN'e. Vienas iš svarbiausių ir įdomiausių uždavinių CERN'o eksperimente yra hipotetinio Higgs'o bozono aptikimas. Čia svarbų vaidmenį atlieka vienalaikis dviejų Z bozonų skilimas į keturis leptonus (elektroną, pozitroną ir miuoną, antimiuoną arba du elektronus ir du pozitronus arba du miuonus ir du antimiuonus). Eksperimento pradžioje bus nustatomas šios reakcijos greitis, o vėliau ši informacija bus panaudojama ieškant Higgs'o bozono skilimo į du Z bozonus pėdsakų. Vizito metu A. Juodagalvis rašė dviejų Z bozonų skilimo į keturis leptonus duomenų analizės paketą, dalyvavo CMS sambūrio „OctoberXose, apie veiklą ir gautus rezultatus buvo informuota silpnosios sąveikos (Electroweak) duomenų analizės grupė bei CMS sambūris, taip pat sukurtas tinklalapis.

VSTS darbuotojai pagal sutartį su Fizikos institutu vykdė projektą **„Plutonio izotopų santykio matavimo metodikos parengimas** (2009, vadovas vyriaus.m.d. P. Serapinas.

2009 m. parengta izotopų Pu²³⁹ ir Pu²⁴⁰ santykio matavimo metodika.

Europos sąjungos remiami struktūrinių fondų projektai

Lietuvos mokslo tarybos ir Lietuvos švietimo ir mokslo ministerijos projektas **„Studentų mokslinė praktika“**, kuris yra remiamas ES struktūrinių fondo lėšų.

2009 m. institutas priėmė 4 studentus mokslinei praktikai. Jiems vadovavo AO, ATS ir VSTS darbuotojai: vyriaus.m.d. G. Gaigalas, vyr.m.d. V. Jonauskas, vyriaus.m.d. G. Juzeliūnas, vyr.m.d. A. Kučinskas.

VSTS ir AO darbuotojai nuo 2009 11 02 kartu su partneriais pradėjo vykdyti struktūrinių fondų projektą *„Mokslas verslui ir visuomenei“ NR. VP2-1.4-ŪM-03-K-01-01*. Vadovas V. Daniūnas, vykdytojai: vyriaus.m.d. V. Gontis, tyrėjas-astronomas G. Valiauga, inž. A. Kononovičius.

2009 m. atlikti parengiamieji darbai, kuriant projekto interneto svetainę.

Pedagoginė veikla

2009 m. pabaigoje (gruodžio mėn.) fizikos krypties doktorantūroje buvo 11 doktorantų: V. Nelkinas, V. Regelskis, E. Puzeras, R. Juršėnas, Š. Mikolaitis, Ž. Ežerinskis, T. Sabonis, E. Stonkutė, G. Barisevičius, M. Maskoliūnas, Š. Masys. 2009 m. sausio 8 d. disertaciją sėkmingai apgynė O. Rancova (ATS), o gruodžio 29 d. – V. Laugalys (AO). 2009m. į doktorantūrą priimtas vienas doktorantas Š. Masys. V. Regelskis ir T. Sabonis buvo išvykę į kvalifikacijos kėlimo mokyklą užsienyje. Instituto darbuotojai buvo disertacijų gynimo komitetų nariai, disertacijų ir studentų baigiamųjų darbų oponentais bei komitetų nariais.

Instituto darbuotojai skaitė paskaitas ir vedė pratybas universitetuose: VU – 2 darbuotojas, VPU – 6 darbuotojai, ŠU – 1 darbuotojas. Mokslininkai vadovavo 10 VU, 11 VPU ir 1 ŠU studentų darbams. VU TFAI Molėtų observatorijoje vyko VPU studentų praktikos bei kiti renginiai. V. Gontis ir G. Juzeliūnas buvo VU bakalaurų ir magistrų darbų gynimo komisijų pirminkai.

Institutas dalyvavo organizuojant ir pravedant studentų praktiką pagal Lietuvos mokslo tarybos vykdomą ES Struktūrinių fondų projektą. 4 darbuotojai vadovavo 4 studentų mokslinei praktikai.

P. Bogdanovičius rengė moksleivius ir vadovavo Lietuvos komandai tarptautinėje fizikų olimpiadoje, dirbo rengiant ir pravedant Lietuvos jaunųjų fizikų olimpiadą ir čempionatą. R. Lazauskaitė buvo Lietuvos astronomijos olimpiados vertinimo komisijos pirmininkė, rengė užduotis Lietuvos moksleivių astronomijos olimpiadai, ruošė kandidatus į tarptautines astronomijos olimpiadas, buvo Lietuvos komandos vadovė Tarptautinėje astronomijos olimpiadoje. G. Valiauga ir K. Černis buvo moksleivių astronomijos olimpiados vertinimo komisijos nariais, rengė moksleivius, vykstančius į tarptautines astronomijos olimpiadas Irane ir Kinijoje.

Leidyba

2009 m. išleisti keturi tarptautinio žurnalo **“Baltic Astronomy”** 18 tomo numeriai (vyr. redaktorius V. Straizys, redkolegijos narės G. Tautvaišienė ir S. Bartašiūtė), **“Fizikų žinios”** 34 ir 35 numeriai (ats. red. V. Žalkauskas ir red. pav. R. Kivilšienė) ir kasmetinis leidinys **“Lietuvos dangus 2010”** (ats. red. G. Tautvaišienė).

Organizuoti moksliniai renginiai ir seminarai

2009 m. rugsėjo 11 d. surengti eiliniai prof. A. Jucio skaitymai, o spalio 30 d. VU TFAI Molėtų astronomijos observatorijoje vyko antroji dalis tarptautinės konferencijos **„Astronominis ugdymas Lietuvoje: naujos tendencijos ir iššūkiai“**, kurią Tarptautinių astronomijos metų programoje organizavo Vilniaus pedagoginis universitetas. VU TFAI darbuotojai buvo šios konferencijos organizacinio komiteto nariai. 2009 m. gruodžio 12 d. VU TFAI Molėtų astronomijos observatorijoje įvyko Nacionalinė astronomijos konferencija, kurią organizavo VU TFAI, Vilniaus universiteto observatorija ir Lietuvos astronomų sąjunga. VU TFAI darbuotojai buvo šios konferencijos organizacinio komiteto

nariai. Birželio 29 – liepos 3 dienomis VU TFAI organizuota BalticGrid-II vasaros mokykla VU TFAI Molėtų astronomijos observatorijoje Kulionių kaime Molėtų rajone. Liepos mėn. organizuota tarptautinė 13-oji NDTCS konferencija.

Mokslo žiniasklaida

Instituto darbuotojai aktyviai dirbo mokslinės žiniasklaidos srityje. 2009 m. institute parengti ir išleisti „Fizikų žinių“ – „Lithuanian Journal of Physics“ mokslo populiarinimo priedo – 36 ir 37 numeriai, parengtas tęstinio mokslo populiarinimo leidinio „Lietuvos dangus 2010“ numeris. Visuomenei ir moksleiviams mokslas populiarintas radijo ir televizijos laidų metu (6 pasisakymai), laikraščiuose, žurnaluose ir elektroninėje spaudoje paskelbtos 19 straipsnių, perskaityta 48 paskaitos moksleiviams, studentams ir visuomenei. A. Acus, V. Daniūnas ir G. Valiauga gavo 2009 m. Lietuvos Respublikos Švietimo ir mokslo ministerijos premiją (1 vieta) mokslo ir technologijų populiarinimo darbų konkurse už mokslo populiarinimo portalą „Mokslasplus.lt Virtualieji eksperimentai“.

Pažymėdami Tarptautinius astronomijos metus 2009 (TAM2009) ypač aktyviai mokslinės žiniasklaidos srityje dirbo AO darbuotojai. 2009 m. vasario 17 d. Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos instituto Planetariume įvyko oficialus Tarptautinių astronomijos metų 2009 Lietuvoje atidarymas, kuriame dalyvavo svečiai iš Lietuvos nacionalinės UNESCO komisijos, Švietimo ir mokslo ministerijos, kitų aukštųjų mokyklų, pranešimą apie Lietuvoje organizuojamas veiklas padarė A. Kazlauskas.

Vykdam Tarptautinių astronomijos metų programą, daugelis AO darbuotojų ir O.Rancova su paskaitomis vyko į įvairius Lietuvos miestus, miestelius ir kaimus. Paskaitas skaitė: G. Barisevičius Panevėžio raj. Velžio gimnazijoje, Kauno Jėzuitų gimnazijoje, Akmenės gimnazijoje, Verslo ir laisvalaikio klube Belmonte, Vilniuje, A. Kazlauskas Šakių raj. Siesartėnų pagrindinėje mokykloje; A. Kučinskas Molėtų astronomijos observatorijoje Lietuvos astronomijos olimpiados dalyviams, VU bibliotekoje, VU TFAI planetariume, R. Lazauskaitė Vilniaus Simono Daukanto gimnazijoje, Vilniaus Žvėryno gimnazijoje, Jonavos Jeronimo Ralio vidurinėje mokykloje, Vilniaus Gerosios Vilties vidurinėje mokykloje, Švenčionių Zigmo Žemaičio gimnazijoje; S. Lovčikas respublikinėje jaunimo etnokultūros stovykloje „Kukutyne“ Lazdijų rajone ir Vilniaus Žvėryno gimnazijoje; S. Lovčikas, Š. Mikolaitis ir E. Stonkutė Telšių raj. Upynos pagrindinėje mokykloje, Šilalės raj. Upynos vidurinėje mokykloje, Šiaulių raj. Kurtuvėnų dvare; E. Pakštienė ir E. Stonkutė Zarasų raj. Gražutės regioninio parko lankytojų centre Salake, konferencijoje „Pažink savo Visatą“; O.Rancova mokslo populiarinimo festivalyje „Erdvėlavis – Žemė“, Lietuvos energetikos muziejuje, Akmenės gimnazijoje, Vilniaus Sofijos Kovalevskajos vidurinėje mokykloje, Upynos bendruomenėse Šilalės ir Telšių rajonuose, Kurtuvėnų dvare (Šiaulų raj.).

Molėtų Astronomijos observatorijoje 2009 m. įvyko du masiniai renginiai. Pirmasis iš jų „100 astronomijos valandų“ vyko balandžio 3-4 d.d. kaip dalis pasaulinio Tarptautinių astronomijos metų projekto. Šioje astronomijos šventėje per dvi dienas apsilankė apie 600 žmonių. Paskaitas čia skaitė AO darbuotojai A. Bartkevičius, K. Černis, A. Kazlauskas, E. Pakštienė, R. Lazauskaitė, G. Barisevičius, A. Ivanauskas, Š. Mikolaitis, E. Stonkutė, G. Valiauga, S. Lovčikas. Prie trijų MAO teleskopų lankytojus priėmė R.

Janulis ir V. Laugalys, J. Sperauskas ir A. Ivanauskas, K. Zdanavičius, J. Zdanavičius ir M. Maskoliūnas. Antrasis masinis renginys, kartu su Lietuvos etnokosmologijos muziejumi (LEM) buvo surengtas rugsėjo 26 d. Molėtų Astronomijos Observatorijoje kaip dalis visoje Europoje vykusio Europos komisijos dalinai finansuojamo renginio „Tyrejo naktis“. Paruošiant ir vykdant šį renginį dalyvavo visi AO darbuotojai, MAO ir LEM apsilankė daugiau kaip 1000 žmonių. Paskaitas taip pat skaitė O.Rancova, J.Tamulienė, R.Karazija. Be šių renginių Molėtų AO buvo priimtos 352 ekskursijos (7473 žm.), kaip ir kasmet, pavasarį ir rudenį įvyko du „Lygiadienio muzikos“ vakarai, vyko kultūriniai renginiai: knygos „Žiūroniuko Nuotykių“ iliustracijų konkurso darbų paroda, dailininkės Virginijos Juciūnaitės paroda „Žvaigždžių šventovė“. Molėtų AO priimta VPU Fizikos ir technologijos fakulteto III kurso studentų praktika (2 grupės rugpjūčio mėn.), vyko jaunųjų astronomų sąskrydžio stovykla (birželio mėn.), organizuota Lietuvos mokinių informavimo ir techninės kūrybos centro darbuotojų. S. Lovčikas organizavo seminarą apie dangaus reiškinius ir jų stebėjimus Jaunimo psichologinės pagalbos linijos savanoriams, teikė konsultacijas gyventojams, atsakinėjo į MAO gaunamus klausimus, davė interviu interneto portalui „Delfi“. Naktinio dangaus objektų ir Saulės protuberantų demonstravimui įsigyti MEADE ir Solascope teleskopai.

2009 m. VU TFAI planetariume Vilniuje surengti 656 renginiai, kuriuose dalyvavo 28626 lankytojai. Daugiausia – 333 mokomosios paskaitos surengtos Vilniaus miesto mokyklų mokiniams, priimtos 258 įvairių lankytojų grupės iš kitų miestų ir vietovių, organizuotos 65 viešos paskaitos ir proginiai renginiai visuomenei. Pastarąsias sudarė 4 paskaitų ciklai: „Vilnius – Europos kultūros sostinė“ (2 paskaitos), „Tarptautiniai astronomijos metai 2009“ (16 paskaitų), „Vakaras Planetariume „Visata – Žemė – Žmogus“ (remtas Švietimo ir mokslo ministerijos Mokslo ir technologijų departamento, 13 paskaitų), „Pagal įmonių ir asmeninius užsakymus“ (25 paskaitos) ir „Pagal bendrąjį renginių grafiką“ (9 paskaitos). Juose paskaitas skaitė Planetariumo lektorės D. Sperauskienė, D. Matulytė ir I. Šablevičiūtė bei kitų institucijų darbuotojai dr. L. Klimka, dr. J. Sūdžius, dr. A. Kučinskas, prof. P. Bogdanovičius, prof. R. Karazija, dr. A. Kazlauskas, dr. J. Taminskas, dr. A. Gudaitis. Vykdytos trys interneto transliacijos iš mokslo centrų ir didžiųjų pasaulio observatorių. Paruošta ir atnaujinta paskaitų: D. Matulytė paruošė 4, D. Sperauskienė – 5. Paskaitoms pagaminta gausi vaizdinė medžiaga: 42 viso-kupolo panoramos, 2 Zeis panoramos, 400 skaidrių ir 16 DVD video siužetų. Išleistas plakatas ir skrajutė „Vakaras Planetariume „Visata – Žemė – Žmogus“, lauko stendas „Planetariume „Žemė ir Visata“. Visos paskaitos ir renginiai buvo skelbiami Planetariumo interneto svetainėje ir vestibulio stenduose. Tęsimas bendradarbiavimas ir vykdomi kai kurie bendri renginiai su Lietuvos Astronomų sąjunga, VU FF Astronomijos observatorija, FI Žvaigždžių sistemų fizikos skyriumi, Lietuvos mokinių informavimo ir techninės kūrybos centru. Palaikomi ryšiai su šiomis tarptautinėmis organizacijomis: International Planetarium Society, Greenville, U.S.A.; The Planetary Society, Pasadena, U.S.A.; Hubble /ESA Information Centre, Munchen, Germany; Carl Zeiss, Oberkochen, Germany. Gaunama iš jų vaizdinė – informacinė medžiaga: žurnalai „The Planetary report“, „Planetarian“, „Inovation“, nuotraukos, plakatai, CD, DVD. Lektorė Daina Matulytė tęsė veiklą 3 tarptautinėse organizacijose: IFAV – Tarptautinis gyvūnų gerovės fondas, AVAAZ - „balsas“ globalinių klausimų sprendimui, OCEANA – jūrų ir vandenynų išteklių išsaugojimas. Ji dalyvavo jų ir dar kitų tarptautinių organizacijų: National Wildlife Federation, World Wildlife Fund, Earth

Day network rengiamose ekologinio švietimo ir socialinio aktyvumo akcijose.

Išvykos į užsienį ir užsienio mokslininkų vizitai

2009 m. instituto mokslininkai į užsienį buvo išvykę 105 kartus dalyvauti konferencijose, mokyklose, projektų vykdymo klausimais, Europos komisijos kvietimu (20 kartų), trumpalaikėms ir ilgalaikėms stažuotėms ir kt. Institute lankėsi 8 užsienio mokslininkai.

Organizacinė, techninė ir ūkinė veikla

2009 m. už Lietuvos ir tarptautinių projektų lėšas įsigyta 12 naujų personalinių kompiuterių, 1 serveris, penkių 2 x Intel 5530 CPU darbinių stočių klasteris, 4 lazeriniai spausdintuvai ir kitokios įrangos esamų kompiuterių klasterių bei personalinių kompiuterių galimybių išplėtimui ar sugedusių dalių pakeitimui. Įsigyta ir programinės įrangos: Web MATHEMATIKA, Crystal 06, Intel FORTRAN, Crystal Maker, Origin 8.1, antivirusinių programų ar jų licencijų.

Molėtų observatorijos 165 cm teleskopui įdiegta teleskopo gidavimo sistema, jai sukurta programinė įranga, atnaujintos 1.65m ir Maksutov teleskopų valdymo programos, parengtos duomenų apdorojimo programų „qfitsview“ ir „lce“ naujos versijos. Iš žiniasklaidos lėšų naktinio dangaus objektų ir Saulės protuberantų demonstravimui įsigyti MEADE ir Solascope teleskopai.

2009 m. instituto pastate A. Goštauto gatvėje už gautos iš LR švietimo ir mokslo ministerijos ir nuosavas lėšas atliktas vandentiekio vamzdynų renovavimas, sutvarkyta elektros instaliacija, padarytas 11 darbo kabinetų sienų, lubų ir grindų remontas, nudažytos 2 vestibulų ir prie jų esančių laiptinių sienos. Atlikus remonto darbus iš esmės pagerėjo vestibulų ir laiptinių estetinis vaizdas. Kompiuterių klasterių kambaryje sumontuotas galingas oro kondicionierius, dėl ko žymiai pagerėjo serverinės darbas, pasiektas ilgai lauktas įrengimų veikimo efektas.

Instituto finansavimas

Instituto 2009 m. finansinės ataskaitos, 2009m. sąmatos ir valstybinį finansavimą grindžiantys strateginiai veiklos planai pagal galiojančius teisės aktus teikiami LR Finansų ministerijai ir kitoms institucijoms atskirai nuo šios ataskaitos arba kaip priedai, todėl tik trumpai paminėsime, kad 2009 metais VU TFAI kartu su Planetariumu gavo 5188,7 t. litų asignavimų, iš kurių 3541,7 t. Lt sudarė tiesioginiai biudžeto asignavimai, 226 t. Lt – tikslinės biudžeto lėšos, 396,2 t. Lt – LVMS fondo lėšos, 187,9 t. Lt – užsienio lėšos mokslo programoms vykdyti, 100,2 t. Lt – Tarptautinių mokslo ir technologijų programų plėtros agentūros lėšos. Specialiosios mokslo plėtojimo programos ir nuompinigių lėšos sudarė 736,7 t. Lt.

Instituto 2009 m. strateginio plano įvykdymas

Esminiai 2009 m. instituto strateginiame plane numatyti rodikliai įvykdyti.

Pagal "Tarptautinio lygio mokslo potencialo palaikymo ir tyrimų plėtojimo" programą:

- 1 Pagal LRV patvirtintas pagrindines instituto mokslinės veiklos kryptis tyrimai vykdyti 14-oje mokslinių temų (planuota 14);
- 2 Mokslo darbų skaičius, tenkantis vienam mokslininkui yra 1,92 (planuota 1,3);
- 3 Vidutinis vienam mokslininkui per metus tenkantis publikacijų skaičius leidiniuose, įtrauktuose ISI sąrašą, yra 0.86 (planuota pasiekti 1,0);
- 4 Apgintos 2 daktaro disertacijos (planuota apginti 1);
- 5 Organizuoti du tarptautiniai renginiai (planuoti du).

Vykdam "Specialiąją mokslo plėtojimo" programą:

1. Vykdytos 3 tarpvalstybinės mokslo ir studijų programos (planuotos 3);
2. Pravesta 1062 paskaitų, ekskursijų ir informacinių seansų moksleiviams ir visuomenei (planuota 1100).

2009 m. apginta dvigubai daugiau daktaro disertacijų, gerokai didesnis mokslo darbų, tenkančių vienam mokslininkui, skaičius, bet mažiau negu planuota paskelbta straipsnių ISI sąrašo leidiniuose ir mažiau pravesta paskaitų, ekskursijų ir informacinių seansų moksleiviams ir visuomenei. Tikslas, kad kiekvienam mokslininkui tektų po vieną straipsnį ISI sąrašo žurnaluose, pasiekiamas ne kiekvienais metais. Praėjusiais metais buvo 1,3 straipsnio. Paskaitų, ekskursijų ir informacinių seansų moksleiviams ir visuomenei skaičius šiais metais sumažėjo, nes kasmet pastebimai mažėja mokinių, aplankančių Planetariumo renginius.

Ataskaitai pritarta 2010 m. balandžio 14 d.
VU TFAI tarybos posėdyje, nutarimas Nr. 4