

VU TEORINĖS FIZIKOS IR ASTRONOMIJOS INSTITUTAS

(direktorė habil.dr. Gražina Tautvaišienė)

2007 m. ATASKAITA

Darbuotojai, mokslo publikacijos

2007 m. institute dirbo 102 darbuotojai, iš jų 63 mokslo darbuotojai ir kiti tyrėjai (13 habilituotų daktarų ir 37 mokslų daktarai) ir 7 doktorantai. Pagrindinėse pareigose dirbo 43 mokslininkai. Institute veikė penki moksliniai padaliniai: Astronomijos observatorija (AO, vad. G. Tautvaišienė), Atomo teorijos skyrius (ATS, vad. Z. R. Rudzikas), Branduolio teorijos sektorius (BTS, vad. S. Ališauskas), Izotopinės analizės sektorius (IAS, vad. P. Serapinas), Vyksmų ir sandarų teorijos skyrius (VSTS, vad. B. Kaulakys) ir Studijų katedra (vad. G. Merkelis). VU TFAI planetariume dirbo 16 darbuotojų, iš jų 3 mokslo darbuotojai.

Instituto darbuotojai 2007 m. paskelbė 89 VU TFAI vardu įregistruotus mokslinius straipsnius, iš jų 40 – leidiniuose, įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų bazę, bei 49 publikuotus kituose žurnaluose bei tarptautinių konferencijų darbuose. 39 mokslinės publikacijos paskelbtos Molėtų observatorijos teleskopų stebėjimo rezultatų pagrindu.

2007 m. išleisti 4 tarptautinio mokslinio žurnalo „Baltic Astronomy” numeriai (ISI žurnalas nuo 2003 metų, 48 sp. l.), du „Fizikų žinios” numeriai, kasmetinis leidinys „Lietuvos dangus 2008”, dalyvauta leidžiant „Lietuvos fizikos žurnalą” (ISI žurnalas nuo 2007 m., 4 numeriai). Kembridžo universiteto leidykla išleido Z. Rudziko monografijos „Teorinė atomų spektroskopija” antrąjį pataisytą leidimą, VPU leidykla – R. Karazijos vadovėlių „Fizikos metodologija ir filosofija”, o VU leidykla R. Kivilšienės ir E. Makariūnienės parengtą leidinuką „Akademikui Povilui Brazdžiūnui (1897-1986) –110“. 11 instituto darbuotojų buvo 8 mokslo leidinių atsakingais redaktorais ir redkolegijų nariais.

Instituto darbuotojai suorganizavo 1 tarptautinę konferenciją. Molėtų astronomijos observatorijoje įvyko Astronomijos šventė Lietuvoje „Tyrėjo naktis” (400 lankytojų), priimtos 217 ekskursijų (5716 žmonių). Planetariume moksleiviams, mokytojams ir visuomenei pravesta 792 informaciniai seansai ir kiti renginiai, kuriuose apsilankė 41061 lankytojas.

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.

Institute buvo vykdomi 15 VU TFAI tarybos patvirtintų mokslinių temų, 3 Europos 6-osios Bendrosios programos projektai, vienas Europos komisijos, 4 COST, 2 LVMSF, 3 Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros ir du Lietuvos vyriausybės remiami projektai, 10 kitų tarptautinių projektų ir 4 Europos sąjungos Struktūrinių fondų remiami projektai. Vykdam šiuos projektus, o taip pat į konferencijas, stažuotes, mokyklas ir mokslo organizacinius reikalais į užsienį 105 kartus buvo išvykę 30 instituto darbuotojų. Institute lankėsi 40 užsienio svečių.

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. V. Straizys, vykdytojai: S. Bartašiūtė, K. Černis, A. Kazlauskas, V. Laugalys, G. Valiauga, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius). Publikuoti 4 ISI straipsniai.

Vykdam šią temą 2007 m. ištirtas dulkių ir molekulinėjų debesų pasiskirstymas galaktinių ilgumų 132-158 laipsniai kryptimi (Kasiopėja, Žirafa, Persėjas) remiantis infraraudonąja žvaigždžių fotometrija iš 2MASS, IRAS ir MSX katalogų. Nustatyti debesų nuotoliai. Sudarytas naujas Cam OB1 asociacijos narių sąrašas. Remiantis kitų autorių duomenimis identifikuota 18 jaunų mažos ir vidutinės masės žvaigždžių. Žirafos debesyse naujai atrastos 142 jaunos žvaigždės (YSO), pagal mūsų pasiūlytus kriterijus atrinktos iš 2 milijonų infraraudonųjų objektų. Spektriniais stebėjimais Kitt Peak observatorijoje (su C.J. Corbally) patvirtinta, kad kai kurios iš naujai atrastų žvaigždžių savo spektruose turi vandenilio alfa ir infraraudonąsias kalcio tripleto linijas. Ištirta Galaktikos sritis padrikojo žvaigždžių spiečiaus Collinder 428 kryptimi Šiaurės Amerikos ūke. Nustatytas dulkių debesies nuotolis ir įrodyta, kad Collinder 428 žvaigždžių grupė nėra fizinis spiečius. Remiantis nauja fotometrija Vilniaus sistemoje nustatytas padrikojo spiečiaus NGC 752 nuotolis, metališkumas ir amžius, įvertinta tarpžvaigždinė ekstinkcija iki spiečiaus. Išanalizuota dvinarių žvaigždžių įtaka, nustatant pagrindinius spiečiaus parametrus. Atlikta CCD nuotraukų SA64 srityje daugiaspalvė fotometrija, patikslintos transformacijos į standartinę sistemą lygtys, atlikta pirminė žvaigždžių SA 64 ir ir Slibino-Persėjo srityse klasifikacija. Vilniaus sistemoje SA64, apie atspindžio ūką NGC 7023 ir greta jo esančiame lauke išfotometruota daugiau nei po 1200 žvaigždžių; NGC7023 ir gretutiniame lauke suklasifikuota virš 800 ir 900 žvaigždžių, atitinkamai.

AO darbuotojai vykdė temą „**Žvaigždžių atmosferų cheminė sudėtis ir evoliucija**” (2005 – 2009 m., vad. G. Tautvaišienė, vykdytojai: E. Puzeras, Y. Chorniy, Š. Mikolaitis, A. Ivanauskas, A. Kaučikas, E. Stasiukaitis, E. Stonkutė, bei kolegos iš Švedijos, Italijos, Vokietijos, JAV, Šveicarijos, Čilės, Kanados). Publikuoti 2 straipsniai tarptautiniuose žurnaluose (Springer leid.).

Vykdam šią temą, 2007 m. pagal didelės skiriamosios gebos spektrus nustatyta 65 Galaktikos sankaupos žvaigždžių cheminė sudėtis ir pagrindiniai atmosferų parametrai. Rezultatai palyginti su padrikųjų žvaigždžių spiečių sankaupos žvaigždžių tyrimais ir teoriniais modeliais. Nustatyta, kad sankaupos žvaigždės sudaro gana homogenišką rinkinį, [C/Fe], 12C/13C, C/N santykiai jose sumažinti, o Na, Al ir galbūt Si gausa jose

padidėjusi. Gauti rezultatai yra panašūs į gaunamus, tiriant padrikųjų spiečių sankaupos žvaigždes. Ištirta devyniolikos Galaktikos storojo disko nykštukių cheminė sudėtis. Didelės skiriamosios gebos spektrai gauti su Šiaurės optiniu teleskopu Kanarų salose. Patvirtintas stebėjimų rezultatas, kad Ia tipo supernovų intensyvus aplinkos turtinimas sunkiaisiais cheminiais elementais prasideda ties $[Fe/H] \sim -0.6$ dex. Pradėti RS CVn tipo žvaigždžių spektrų detalūs tyrimai. Spektrai gauti su Šiaurės optiniu teleskopu Kanarų salose. 2007 metų mokslinio darbo rezultatai: diferencialiniu tyrimo metodu nustatyti žvaigždžių atmosferų fiziniai parametrai T_{eff} (K), v_t (km/s), $\log g$ ir geležies gausa $[Fe/H]$ žvaigždėms: *33 Psc* (HD 28), *AZ Psc* (HD 217188) ir λ *And* (HD 222107). Nustatyta santykinė elementų NaI, SiI, CaI, ScI, ScII, TiI, VI, CrI, MnI, FeI, FeII, CoI, NiI, SrI, YII, ZrI, LaII, CeII, PrII, NdII, EuII gausa žvaigždės *33 Psc* (HD 28) atmosferoje. Nustatyta 27 žvaigždžių atmosferų efektinė temperatūra. Pradėti padrikos žvaigždžių spiečiaus NGC 6369 sankaupos žvaigždžių spektrų, gautų su Italijos Galileo nacionaliniu teleskopu Kanarų salose, tyrimai. Nustatyti trijų žvaigždžių pagrindiniai atmosferų parametrai, išmatuoti eilės cheminių elementų ekvivalentiniai linijų pločiai.

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Pozicinė nejprastųjų asteroidų ir kometų astrometrija**” (2005 – 2009 m., vad. K. Černis, vykdytojai: J. Zdanavičius, K. Zdanavičius). Paskelbtos 35 publikacijos.

2007 m. Vykdam šią temą, Atrasta 18 naujų asteroidų. Publikuota apie 5000 pozicinių asteroidų ir kometų matavimų (padaryta astrometrija virš 1200 atskirų objektų). Stebėtos 6 kometos (vizuali ir CCD fotometrija).

AO darbuotojai vykdė tyrimus tema „**Orbitinių vizualinių dvinarių žvaigždžių populiacinė priklausomybė**“ (2007 – 2009 m., vad. A. Bartkevičius, vykdytojai: J. Sperauskas, D. Bartkevičienė).

Vykdam šią temą, 2007 m. paruošta publikacija apie trinarės BD +39 1828 A nario spektroskopinę orbitą ir atlikta sistemos analizė. Gautas statistinis sąryšis tarp vizualinių dvinarių orbitų didžiųjų pusašių a'' ir kampinių atstumų tarp narių ρ'' : $\log a'' - \log \rho'' = 0.112$. Atlikta astrometrinių dvinarių orbitų parametrų analizė. Išmatuoti radialiniai greičiai 12-kai II populiacijos dvinarių žvaigždžių su Molėtų observatorijos 63 cm ir 1.65 m teleskopais. Apdoroti padrikųjų žvaigždžių spiečių radialinių greičių matavimai, atlikti 2007 m. spalio- gruodžio mėn. Stiuardo observatorijoje (~90 stebėjimų 6 spiečiuose). Tęsiami radialinių greičių matavimų modernizavimo darbai: instaliuojamas patobulintas spektro skanavimo mechanizmas ir įdiegta nauja prietaiso valdymo ir rezultatų apdorojimo programa.

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

Vykdam šią temą, 2007 m. sukaupta virš 200 energijos pasiskirstymo žvaigždžių spektruose funkcijų. Išnagrinėta literatūra, skirta energijos pasiskirstymo spektre funkcijų tarpusavio lyginimui ir iš žvaigždžių atmosferos modelių gautų energijos srautų tarpusavio, ir su realiomis žvaigždėmis, lyginimui. Parašyta programa sintetinių spalvos rodiklių bet kurioje fotometrinėje sistemoje skaičiavimui. Greta iki šiol naudojamos parausvėjusių žvaigždžių klasifikavimo metodikos, paremtos nuo tarpžvaigždinio

parausvėjimo nepriklausančiais parametrais Q (kalibruoti tinkleliai arba nuo 6 iki 10 Q_i lyginimas), sukurtas klasifikavimo metodas, naudojantis papildomus parametrus: virtualią tarpžvaigždinę masę x ir naujus nepriklausančius nuo parausvėjimo parametrus q . Naujieji q jau nebėra žvaigždės rodiklių skirtumai, dėl ko padidėja jų jautrumas žvaigždės parametrams. Parašyta FORTRAN programa x ir q parametru skaičiavimui. Atlikti pirmieji klasifikacijos bandymai panaudojant realių žvaigždžių daugiaspalvės fotometrijos duomenis.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Kaskadai sudėtinguose atomuose ir jų įtaka Rentgeno ir Ožė spektrams: teorija ir interpretavimas**” (2005 – 2009 m., vad. R. Karazija, vykdytojai V. Jonauskas, S. Kučas, A. Kynienė, A. Momkauskaitė). Publikuoti 4 straipsniai.

2007 m. gautos emisijos spektrų bendrųjų charakteristikų – vidutinės energijos, dispersijos ir asimetrijos koeficiento – išraiškos reliatyvistiniame Dirako ir Breito artutinyje, atsižvelgiant į konfigūracijų sumaišymą. Jos įgalina tiksliau aprašyti sudėtingus daugiakrūvių jonų plazmos spektrus, nes iki šiol buvo naudojamos tik apytikrės tų dydžių kvazireliatyvistinės išraiškos. Metodas realizuotas bendroje programoje ir panaudotas volframo jonų spektrams modeliuoti.

Tešiant ankstesnį darbą teoriškai nagrinėtas intensyvių ir siaurų linijų grupių susidarymas dėl stipraus konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu sumaišymo daugiakrūvių jonų fotoabsorbcijos ir emisijos spektruose, atitinkančiuose šuolius $4p^5 4d^{N+1} + 4p^6 4d^{N-1} 4f \rightarrow 4p^5 4d^{N+1}$. Skaičiavimai reliatyvistiniu artutinyje atlikti Sn^{9+} – Sn^{12+} ir Sb^{10+} – Sb^{11+} jonams, kurie yra pagrindiniai kandidatai, kuriant ultravioletinių spindulių šaltinį litografijai. Parodyta, kad ypač stiprus spektro susiaurėjimas pasireiškia alavo ir stibio jonams su pusiau užpildytu 4d elektronų sluoksniu.

Išnagrinėta Sb, Sn ir W jonų intensyvumo koncentracija, esant stipriam konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu maišymuisi. Praplėtus sąveikaujančių konfigūracijų bazę, gautas labai geras sutapimas su eksperimentu W^{30+} bangos ilgiams, atitinkančius šuolius $4p^5 4d^9 + 4p^6 4d^7 4f - 4p^6 4d^8$.

Tirtas Ožė elektronų spektras kriptone, susidarius vakansijai vidiniuose 3s, 3p ir 3d sluoksniuose ir jų pasluoksniuose. Paaiškintas fotojonų išėigos spektras, atlikus skaičiavimus su didele sąveikaujančių konfigūracijų baze reliatyvistiniame artutinyje. Išnagrinėti daugielektroniniai Ožė šuoliai, atsirandantys dėl konfigūracijų stipraus maišymosi. Ištirtas $L_{2,3}$ emisijos spektro kitimas prie 2p slenksčio geležies grupės elementuose, sužadinant atomus į atskirus lygmenis, praplėtus sąveikaujančių konfigūracijų bazę. Nustatyta, kad eksperimentatorių identifikuotos kvadrupolinės linijos iš tikrųjų atitinka dipolinius šuolius.

Tirti Rentgeno emisijos spektrai, atitinkantys silpnus $3p \rightarrow 2p$ elektrinius kvadrupolinius šuolius. Jų intensyvumų santykis atžvilgiu elektrinių dipolinių $3s \rightarrow 2p$ šuolių gavosi visa eile didesnis nei teorinis intensyvumų santykis, apskaičiuotas vienkonfigūraciniame Hartree ir Foko artutinyje, naudojantis laisvojo atomo modeliu. Nagrinėjant, ar ši anomaliją lemia kietojo kūno efektai, spektrai buvo registruoti, esant įvairiam apsupimui, bet intensyvumų santykis beveik nesikeitė. Atlikti tyrimai įgalina paneigti hipotezę, kad skirtumas tarp eksperimente stebimų ir teoriškai gautų geležies grupės elementų elektrinių dipolinių ir elektrinių kvadrupolinių šuolių intensyvumų santykių yra nulemtas koreliacinių ar reliatyvistinių efektų, aprašomų laisvojo atomo

modeliu. Kvadrupolinių šuolių srityje atsiranda ir dipoliniai šuoliai, kurie stebint spektrus yra įskaičiuojami į kvadrupolinius šuolius.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Daugiaelektronų atomų spektrinių charakteristikų tyrimo metodų plėtra ir jų taikymas daugiakrūviams jonams, aptinkamiems termobranduolinėje ir kitų rūšių plazmoje**” (2007 – 2011, vad. P. Bogdanovičius, vykdytojai R. Karpuškienė, O. Rancova). Paskelbti 5 straipsniai.

2007 m. vykdant tolimesnę kvazireliatyvistinio artinio plėtrą, į kvazireliatyvistinę lygtį radialiosioms orbitalėms gauti buvo įtraukti nariai, aprašantys kontaktinę sąveiką p -elektronų atveju. Šiems elektronams kontaktinėje sąveikoje atsirado narys, pagal savo fizikinę prigimtį kylantis iš elektronų sukinio-orbitos sąveikos. Tai visiškai nauji ir originalūs rezultatai. Be to buvo parodyta, kad skaičiuojant sukinio-orbitos sąveikos viendalelę sąveikos dalį reikia atsižvelgti į papildomą vardiklį su tiesioginiu potencialu, atsirandantį kvazireliatyvistiniame artinyje. Didelis darbas buvo atliktas kuriant naujas programas, leidžiančias atlikti atomų ir jonų spektrinių charakteristikų tyrimus konfigūracijų superpozicijos metodu kvazireliatyvistiniame artinyje. Tai leido atlikti ne tik energijos spektrų, bet ir pirmus šuolių charakteristikų skaičiavimus.

Atlikti Osciliatorių stiprių ir šuolių tikimybių skaičiavimai Cr XVII jonui. Gauti duomenys šuoliams tarp konfigūracijų, turinčių 31-elektronus, anksčiau neiširtų nei teoriškai, nei eksperimentiškai. Apskaičiuoti $W^{29+} - W^{34+}$ jonų energijos spektrai. Pirmą kartą buvo gauta teorinė informacija apie sužadintas konfigūracijas, kurių lygiškumas sutampa su pagrindinės konfigūracijos lygiškumu, ir parodyta, kad tos konfigūracijų grupės energijos lygmenys labai susimaišo. Ilgos berilio izoelektroninės sekos ($4 < Z < 29$) 2–2 leistinių elektrinių dipolinių šuolių fizikinių charakteristikų skaičiavimo rezultatai, gauti konfigūracijų superpozicijos metodu, buvo palyginti su duomenimis, gaunamais trikdžių teorijos metodais. Gautas geras abiejų teorinių rezultatų sutapimas. Parodyta, kad kai kurios osciliatorių stiprių vertės, pateiktos NIST (JAV) spektrinių duomenų bazėje, yra nepakankamai tikslios ir turi būti koreguotos.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Elektronais sužadintų ir jonizuotų atomų spinduliuotės ir elektronų emisijos tyrimas**” (2007 – 2010, vad. A. Kupliauskienė, vykdytojai V. Tutlys ir K. Glemža (VU FF)). Paskelbti 3 straipsniai.

2007 m. naudojantis atomų teorijoje išplėtotais metodais, išvesta poliarizuotų atomų sužadinimo poliarizuotais elektronais skerspjūvio bendroji išraiška, aprašanti sužadintų atomų poliarizaciją bei išsklaidytų elektronų poliarizaciją ir kampinį pasiskirstymą. Paprastesnės formulės, aprašančios nepoliarizuotais atomais išsklaidytų nepoliarizuotų elektronų kampinį pasiskirstymą, sužadintų atomų rikiavimą, o taip pat atomų sužadinimo elektronais magnetinį dichroizmą, išvestos kaip atskiri bendrosios formulės atvejai. Sutrikdytų bangų artinyje apskaičiuoti Na ir K atomų sužadinimo į $2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$ ir $3p^5 4s^2 \ ^2P_{3/2}$ būsenas skerspjūviai ir rikiavimo parametrai. Teoriniai rikiavimo parametrai K atomo atveju gerai dera su išmatuotais.

Tirti Užgorodo mokslininkų užregistruotame Na atomo sužadinimo į $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2,3/2}$ būsenas skerspjūvyje ties 32–33 ir 36,5–40 eV žadinančio elektrono energijomis pastebėti maksimumai, kurių negalima paaiškinti $2p^5 3s 3p$ LSJ rezonansų susidarymu. Norint išsiaiškinti jų priežastį, atlikti labai tikslūs $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2,3/2}$ ir $2p^5 3s 3p$ LSJ būsenų energijos spektrų ir radiacinių šuolių tarp jų tikimybių skaičiavimai. Sužadinimo į $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2,3/2}$ dėl kaskadų iš $2p^5 3s 3p$ LSJ įvertinti taip pat apskaičiuotos $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2,3/2}$ ir

$2p^5 3s 3p$ LSJ būsenų autojonizacijos tikimybės, fluorescencijos našumai ir sužadavimo skerspjūviai. Padaryta išvada, kad kaskadų priedas per mažas maksimumams eksperimentiniame spektre paaiškinti. Taip pat tirti Užgorodo mokslininkų pirmą kartą pastebėti didelio intensyvumo rezonansai stroncio atomo sužadavimo į $4p^5 4d^5 s^2 {}^3P_{0,1,2}$ ir ${}^3F_{2,3,4}$ autojonizacines būsenas skerspjūvyje. Jiems paaiškinti atlikti tikimybių ir sužadavimo skerspjūvių skaičiavimai bei įvertintas kaskadų iš aukštesnių atomo ir neigiamo jono autojonizacinių būsenų indėlis.

ATS darbuotojai vykdė temą „**Šiuolaikinis atomo teorijos uždavinių modeliavimas remiantis įprastu ir simboliu programavimu**“ (2003 – 2007, vad. G. Gaigalas, vykdytojas E. Gaidamauskas ir 3 užsienio mokslininkai). Paskelbti 3 straipsniai.

Vykdam šią temą, 2007 m. buvo kuriama nauja programinė įranga, skirta atomų lygmenų hipersmulkiajam sandarai bei labai sunkių atomų ir jonų energijos spetrams tirti. Taip pat apskaičiuotas BiSI klasterio energijos lygmenų spektras. Paskelbtas spaudoje daug metų kurtas programų paketas, skirtas daugiakonfigūraciniams atomų struktūros parametrų skaičiavimams

BTS darbuotojai vykdė temą „**Subatominių sistemų bei jų dinamikos tyrimas grupių teorijos ir topologiniais metodais**“ (2006 – 2010 m., vadovai S. Ališauskas ir E. Norvaiša, vykdytojai A. Acus, V. Šimonis, D. Jurčiukonis, V. Regelskis, O. Katkevičius, K. Tamošiūnas). Paskelbti 2 straipsniai.

2007 m. racionalaus atvaizdžio artinyje buvo tiriami topologiniai solitonai, kurių barioninis krūvis 4 ir 16. He branduoliui sukonstruoti sprendiniai kaip topologiškai skirtingų solitonų superpozicija. Apskaičiuoti šio branduolio elektriniai formos faktoriai palyginti su eksperimentų duomenimis. Racionalaus atvaizdžio artutumas išplėstas ir SU(3) Skyrme'o modelio nekanoniškai įdėtam SO(3) solitonui. Gautos inercijos momentų, Lagrange'o ir Hamilton'o operatorių išraiškos. Callan'o ir Klebanov'o surištų būsenų modelyje gautos energijos funkcionalo išraiškos hiperonams, kuriose esminiai įskaitytas kanoninis pioninių laisvės laipsnių kvantavimas. Pasiruošta skaičiuoti dalelių spektrą. Įvairiuose MIT maišų modelio variantuose buvo tęsiami barionų pagrindinių būsenų magnetinių momentų skaičiavimai. Buvo tęsiami Lie ir kvantinių grupių įvaizdžių, Clebsch'o ir Gordano koeficientų ir susijusių specialiųjų funkcijų tyrimai bei fizikinių taikymų paieškos, kartotinių įvaizdžių išskyrimo bei klasifikavimo problemos. Bendradarbiaujant su prof. Jurij Tambergs (Latvija) buvo tęsiami skaičiavimai apie branduolių ($A \leq 40$) izosukinio multipletų energetinių būsenų ir šuolio tikimybių bei magnetinių dipolinių momentų tyrimus stipriai apribotos dinamikos modelio pagalba. Vykdyti tiriamieji darbai fliktuacijoms, atsirandančioms dėl kvantinės elektronų koreliacijos, įvertinti.

BTS darbuotojai vykdė temą „**Atomo branduolių savybės ir sąveika su leptonais**“ (2006 – 2008 m., vadovas ir vykdytojas Lietuvoje – A. Juodagalvis, bendradarbiai užsienyje: K. Langanke, J. M. Sampaio, W. R. Hix).

2007 m. buvo tirama atomo branduolių savybės ir sąveika su leptonais (neutrinalais ir elektronais), neelastinė neutrinių sąveika su branduoliais ir jos įtaka supernovų dinamikai. Anksčiau apskaičiuoti neutrinių sąveikos su branduoliais neutraliaja srove greičiai buvo pataisyti, atsižvelgiant į detalaus balanso taisyklę, ir panaudoti

modeliuojant kolapsuojančios žvaigždės evoliuciją. Parašytas straipsnis apie neelastinės neutrinų sąveikos su branduoliais įtaką supernovų dinamikai, supernovų išspinduliuotų neutrinų spektrui ir neutrinų detekcijai egzistuojančiais eksperimentiniais įrenginiais. Straipsnis 2008 m. jau išspausdintas žurnale „Physical Review Letters“. Detalesnis tyrimas parodė, kad žvaigždės medžiagos sąlygoms suvidurkintas elektronų pagavimo greitis yra nepakankamai tiksliai įvertintas dėl santykinai nedidelio įskaitytų branduolių skaičiaus (buvo suskaičiuota apie 250 branduolių). Buvo nuspręsta branduolių skaičių padidinti, vietoje sluoksnių modelio Monte-Carlo duomenų panaudojant schematinį dalinio sluoksnių užpildymo aprašymą Fermi–Diraco formule. Buvo apskaičiuoti elektronų pagavimo greičiai 2800 branduolių. Ruošiamos lentelės elektronų pagavimo greičių duomenų vartotojams.

IAS darbuotojai vykdė temą „**Jonizacijos dujų plazmoje su kondensuotomis dalelėmis tyrimas masių spektrometrijos metodu**“ (2004 – 2008, vad. P. Serapinas, vykdytojai Ž. Ežerinskis, J. Šalkauskas, V. Juzikienė (PFI)). Paskelbti 2 straipsniai.

2007 m. atlikti pusiausvyrosios jonizacijos skaičiavimai leido parinkti efektyvius vidinius etalonus monoizotopinių medžiagų matavimams. Arsenui vidiniu etalonu naudojant seleną atliktų matavimų tikslumas nenusileidžia izotopų skiedimo metodui, kuris izotopų neturintiems elementams iš principo negali būti naudojamas.

VSTS darbuotojai vykdė temą „**Šaltų atomų ir kondensuotų darinių optinių savybių teorijos plėtra**“ (2005 – 2009 m., vad. G. Juzeliūnas, vykdytojai J. Ruseckas, VU studentai ir užsienio mokslininkai). Paskelbti 3 straipsniai.

Vykdamą temą 2007 m. buvo nagrinėtas lėtos šviesos, turinčios orbitinį judesio kiekio momentą, sklidimas judančių atomų aplinkoje. Išvesta bendra judėjimo lygtis ir pritaikyta lėtos šviesos sklidimui besisukančioje aplinkoje, tokioje kaip sukurių gardelė Bozė ir Einšteino kondensate. Parodyta, kad lėtos šviesos orbitinis judesio kiekio momentas pasireiškia poliarizuotos šviesos poliarizacijos plokštumos sukimu. Norint išskirti sukimosi sukeltą fazės poslinkį pasiūlyta matuoti poliarizacijos plokštumos pasukimo kampo skirtumą dviem šviesos pluoštam su priešingu orbitiniu judesio kiekio momentu. Gautas kampas yra proporcingas aplinkos sukimosi kampiniam greičiui bei šviesos sukurių topologiniam krūviui ir atvirkščiai proporcingas šviesos grupiniam greičiui. Pasiūlytas naujas būdas solitonams sukurti pailguose Bozė ir Einšteino kondensatuose. Solitonai sukuriami braukiant trimis lazerių pluoštais per kondensatą. Jei vienas iš pluoštų aprašomas pirmos eilės Ermito ir Gauso moda, elektrinio lauko amplitudė pluošto centre turi skersinį fazės šuolį, kuris gali būti perkeltas atomams, sukuriant solitoną. Naudojant pasiūlytą būdą galima išvengti difrakcijos apribojimo fazės šuoliui, pasireiškiančio įprastiniame solitonų sukūrimo metode. Pasiūlytas metodas leidžia sukurti daugiakomponenčius solitonus. Be to, galima kontroliuojamai sukurti du ar daugiau lėtai judančius solitonus, esančius arti vienas kito, ir taip tirti jų susidūrimus. Atlikti kvantcheminiai krūvininkų transportą aprašančio parametro – vidinės reorganizacijos energijos skaičiavimai karbazolo medžiagose turinčiose trinitrofluorenono priemaišos. Buvo optimizuotos karbazolo ir trinitrofluorenono molekulių geometrijos neutralioje, katijoninėje (karbazolui) ir anijoninėje (trinitrofluorenui) formose.

VSTS darbuotojai vykdė temą „**Laipsniniai skirstiniai ir $1/f$ fliktuacijos dinaminėse chaotinėse ir stochastinėse sistemose**“ (2005 – 2009 m., vad. B. Kaulakys, vykdytojai V. Gontis, M. Alaburda, T. Meškauskas). Paskelbti 4 straipsniai.

Vykdant šią temą, 2007 m. buvo tęsiami fraktalinių, aprašomų laipsniniais skirstiniais signalų modeliavimo, analizės, modelių taikymo darbai. Sukurtas monofraktalinių signalų generavimo tiesine stochastine diferencialine lygtimi su fliktuojančia relaksacijos sparta modelis. Gautas analizinės tokio signalo su laipsniniu relaksacijos spartos skirstiniu tikimybės tankio ir galingumo spektro išraiškos. Sukurtos tokių signalų generavimo ir pritaikytos jų analizės kompiuterinės programos. Pademonstruotas skaitinių rezultatų sutapimas su analiziniais. Būdinga, kad tokių signalų skirstiniai yra ne Gauso, bet laipsniniai. Išanalizuotos įvairaus netiesiškumo stipriai netiesinės stochastinės diferencialinės lygtys, generuojančios $1/f^\beta$ pobūdžio spektrinio tankio su laipsniniais intensyvumo skirstiniais signalus. Ištirta, kokio netiesiškumo laipsniams galima gauti monofraktalinius signalus, aprašomus laipsniniais skirstiniais. Parodyta, kad fraktalinį stochastinį procesą galima aprašyti ir kaip multiplikatyvia stochastine diferencialine lygtimi moduluojamą Puasono procesą. Toks matematinis aprašymas leidžia atkurti finansų rinkų prekybos aktyvumo empiriškai nustatytas savybes, įskaitant laipsninį tikimybės tankio pasiskirstymą ir ilgalaikes autokoreliacijas. Įvairias rinkas pavyksta aprašyti universaliais lygtimi su keičiamu masteliu. Toliau kuriamos ir tobulintos kompiuterinės programos, skirtos generuoti netiesinius taškinis ir tolygius stochastinius procesus, skaičiuoti įvairias procesų charakteristikas – pasiskirstymus, koreliacines funkcijas, spektrinius tankius, multifraktališkumą ir t.t.

VSTS darbuotojai vykdė temą „**Daugiaatomių junginių elektroninių spektrų ir cheminio reakcingumo teorijos plėtra**“ (2005 – 2009 m., vad. V. Gineitytė, vykdytojai G. Vektaris, A. Vektarienė, J. Narušis). Paskelbti 6 straipsniai.

2007 m. pasinaudojant seniau pasiūlytu tiesioginiu perturbaciniu molekulinės sistemos viendalelinės tankio matricos radimo metodu, ištirtas topologinių faktorių pasireiškimas periciklinėse organinėse reakcijose. Tęsiant anksčiau pradėtus heterolitinių organinių reakcijų teorinius tyrimus, išnagrinėta karbonilo junginių bimolekulinio nukleofilinio prijungimo reakcija. Tęsti alternantinių konjuguotųjų angliavandenilių (AKA) elektroninės sandaros ypatybių algebriniai tyrimai. Nustatyta, kad donorinio ir akceptorinio tipo fragmentų netiesioginės sąveikos per AKA dydis ir ženklas priklauso nuo ryšio eilės dydžio ir ženklo tarp tų AKA anglies atomų, prie kurių yra sąveikaujantys išoriniai fragmentai. Netiesioginė krūvio pernaša tarp donorinės ir akceptorinės posistemų per AKA proporcinga minėtos netiesioginės sąveikos kvadratui. Atlikta pirmą kartą išmatuotų TlInSe_2 ir SbSeI kristalų parafazės Rentgeno fotoelektroninio spektro (FES) valentinės juostos formų analizė. Jos teoriškai apskaičiuotos, aproksimuotos ir gerai dera su eksperimentiškai išmatuotomis FES formomis. Nustatyta, kokios elektroninės sandaros būsenos lemia FES juostų formas. Pateiktas paprastas „šukų“ būdas būsenų indėliams valentinės juostos formoms įvertinti.

Naudojant molekulinio klasterio modelį buvo ištirta BiSI kristalo elektroninė sandara. Išaiškinta, kad atomų virpesiai daro įtaką fotoelektroniniams spektrams. Karbazolo medžiagai, turinčiai trinitrofluorenono priemaišų, kvantinės chemijos metodais buvo apskaičiuotas krūvininkų pernašą aprašantis parametras: vidinės

reorganizacijos energija. Tuo tikslu buvo optimizuotos karbazolo ir trinitrofluorenono molekulių geometrijos neutralioje, katijoninėje (karbazolui) ir anijoninėje (trinitrofluorenonui) formose. Gautos molekulių geometrijos buvo naudojamos skaičiuoti jų energijoms neutraliose ir joninėse formose. Skylutės transportą karbazole aprašančios vidinės reorganizacijos energijos skaičiavimui buvo naudojamas Nelsen'o metodas. Elektrono šuoliui nuo karbazolo ant trinitrofluorenono ir atgal aprašyti buvo naudojamas Marcus'o sąryšis. Šiai krūvininko pernašos reakcijai taip pat suskaičiuota ir reakcijos laisvoji energija.

Europos sąjungos 6 bendrosios programos projektai

AO, ATS, BTS ir VSTS darbuotojai vykdė BP 6 „**Baltic Grid**” (BalticGrid) projektą (2005.11.01 – 2008.04.30, koordinatorė G. Tautvaišienė).

2007 m. Astronomijos observatorijos spektroskopistai patobulino ir gridifikavo žvaigždžių spektrų modeliavimo programinės įrangos paketą SYNTSPEC. Didesniam darbo su šiuo paketu patogumui buvo sukurta migruojančio darbalaukio valdymo versija. SYNTSPEC buvo pritaikytas Galaktikos raudonojo telkinio žvaigždžių cheminės sudėties tyrimui ir nykštukinės netaisyklingosios Vietinės Grupės galaktikos IC 1613 viršmilžinių tyrimams. Atomo teorijos skyriaus darbuotojai pritaikė skaičiavimams tinkluose visą eilę originalių programų. Atomo vidinės vakansijos suirimas yra sudėtingas daugiapakopis procesas, kurio metu susidaro Rentgeno ir Ožė spinduliuotė. Susidariusiems spektrams apskaičiuoti institute sukurta programa VMAS buvo pritaikyta dideliems skaičiavimams atlikti BalticGrid kompiuterių tinkle. Skaičiavimams kompiuterių tinkluose taip pat buvo pritaikyta FAC reliatyvistinė programa, skirta energijos lygmenų, radiacinių spartų ir sužadavimo elektronais skerspjūvių modeliavimui. Branduolio teorijos sektoriuje buvo plėtotą kompiuterinė programa VPSM, taikanti lygiagretaus ir paskirstytos atminties skaičiavimo algoritmus. Ji skirta atomo branduolio sandaros modeliavimui ir leidžia apskaičiuoti žemų energijų sužadavimo spektrą ir Gamov-Teller rezonanso pasiskirstymą. Buvo ruošiamas instituto klasterių ATOMAS ir SPEKTRAS valdymo ir administravimo dokumentacija, konsultuojami vartotojai, atnaujinama programinė įranga.

ATS toliau vykdė „**Programuojama dirbtinių ląstelių evoliucija**” (PACE) projektą (2004.04.01 – 2008.03.31, koordinatorius A. Tamulis).

Kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų koreliacijų metodais, skaičiuojant mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu tinklu, buvo gautas dirbtinių ląstelių savi-susidarymas iš nebrangių bioorganinių molekulių ir suskaičiuoti tų ląstelių fotosintezės spektrai. Kvantmechaniniais metodais iširta, koku būdu dirbtinės ląstelės auga ir dauginasi.

ATS vykdė „**Baltijos šalių tinklas „Moterys fizikoje ir aukštosiose technologijose**” (BASNET) projektą (2006.01.01 – 2007.12.31, koordinatorė A. Kupliauskienė).

2007 m. buvo plėtojama BASNET duomenų bazė ir interneto svetainės skiltis apie Lietuvos klasterio veiklą. Buvo sukviesta 11 Lietuvos klasterio posėdžių, kuriuose aptarti visi su projekto vykdymu susiję darbai. Posėdžiuose svarstyti partnerių VU, KTU,

TFAI ir LRŠMM 2007 m. darbo planai, sociologinių tyrimų galutinė ataskaita, mokslininkų karjeros galimybių pagerinimo strategijos kūrimo eiga ir strategijos projektai, BASNET Naujienų laikraščio turiniai ir leidimas, pasiruošimas seminarui, kuriame aptarti Lietuvos, Latvijos ir Estijos šalių strategijų projektai, Rygoje ir baigiamajai BASNET projekto konferencijai Vilniuje, antrųjų projekto vykdymo metų ir baigiamosios ataskaitos, BASNET projekte pradėtų darbų ateitis. 2007 m. spalio 22-23 d. Vilniuje vyko BASNET baigiamoji konferencija, kurią organizavo A.Kupliauskienė, O.Rancova, joms padėjo R.Kivilšienė ir R.Karpuškienė. Projekto tikslai pilnai įvykdyti – sukurta Baltijos šalių moterų mokslininkų duomenų bazė ir monitoringo sistema bei strategija moterų padėčiai moksle pagerinti.

COST projektai

ATS darbuotojai dalyvavo vykdant COST D27 programą „**Prebiotinė chemija ir ankstyvoji evoliucija**” (Prebiotic Chemistry and Early Evolution), (2002 – 2007, koordinatorius A. Tamulis). Joje dalyvauja mokslininkai iš 20 šalių.

Naudojantis šiame projekte naujai atrastomis magnetiškai aktyviomis molekulėmis, 2007 m. buvo sumodeliuotos minimalios dirbtinės gyvos ląstelės, absorbuojančios išorinio magnetinio lauko energiją fotosintezės proceso metu. Buvo parašyta sukinio tankio pernašos vizualizacijos programa, kuri sprendė atvirų sluoksnių kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomų elektronų korelacių lygtis mūsų mokslinės grupės AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu tinklu.

ATS darbuotojai vykdė COST D35 programą „**Nuo molekulės iki molekulinio prietaisų**” (2005–2010, koordinatorius A. Tamulis). Šis projektas taip pat gavo paramą iš Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros finansuotame projekte „**Programuojamų dirbtinų gyvų ląstelių ir jų pagrindu sukurtų nano biorobotų, susidedančių iš maždaug 500 atomų, kvantmechanis modeliavimas**”, atsakingas asmuo Arvydas Tamulis ir vykdytojas Vyktintas Tamulis, vykdymo trukmė: 2007 metai.

2007 m. kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų korelacių metodais buvo sumodeliuoti keli nano biorobotai, naudojantis šiame projekte naujai atrastais molekuliniais loginiais vartais. Kvantiniai mechaniniai tyrimo rezultatai parodė realią galimybę iš nebrangių bioorganinių molekulių gauti nano biorobatus ir kontroliuoti jų augimą bei dauginimąsi. Turint galvoje didelį Lietuvos užterštumą ir žmonių sergamumą įvairiomis molekulinėmis ligomis, šiame projekte sumodeliuoti nano biorobotai gali naikinti įvairias ekologiškai žalingas molekules ir kenksmingas žmogaus organizmui molekules. Šiame darbe naujai sumodeliuotus nanometriniu dydžio logiškai valdomus fotoelementus galima būtų naudoti ne tik dirbtinių programuojamų gyvių sintezei, bet ir plačiai panaudoti kaip fotoelektronų šaltinius skaitmeninėje fotografijoje, kuriant naujo tipo kompaktines skaitmenines kameras, nanoprietaisuose ir molekulinuose kompiuteriuose. Nano biorobotų modeliavimas buvo atliktas naudojantis kvantinės mechanikos nuo laiko priklausomais elektronų korelacių metodais ir skaičiuojant su AMD serverių 64 bitų 9 nodų klasterio ir 8 nodų 32 bitų klasterio heterogeniniu tinklu.

VSTS darbuotojai vykdė COST P10 programą „**Rizikos fizika**” (2004.05 – 2007.07, koordinatorius V. Gontis). 2007 m. ši programa gavo paramą iš Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros.

2007 m. išanalizuota 26 akcijų, prekių Niujorko biržoje nuo 2005 m. sausio, sandorių sekos. Remiantis bedimensine lygčių analize, pasiūlyta tokia procesą moduluojančios stochastinės diferencialinės lygties forma, kuri aprašo įvairių akcijų prekybos aktyvumo skirstinius ir galios spektrinius tankius, naudojant vieningą modelio parametrų rinkinį. Naudojant supaprastintą modelio variantą, ištirtas J. Londono romanų rinkinys, analizuojant paprastų daiktavardžių pasikartojimo dažnumą tekste. Parodyta, kad tokių žodžių kaip “eye” pasikartojimas tekste turi panašias statistines savybes kaip sandoriai finansų rinkose. Sukurti fraktaliniai stochastiniai modeliai ir jų matematinis aprašymas sudaro puikias prielaidas modeliuoti ir pačius svarbiausius finansų rinkų dydžius: kainas, grąžą ir jų kintamumą. Tolimesnė finansų rinkų duomenų analizė remiantis pasiūlytais stochastiniais modeliais yra pagrindas rizikos valdymo uždaviniams finansų rinkose spręsti.

VSTS darbuotojai pradėjo vykdyti COST D37 projektą “**Grid skaičiavimai chemijoje**” (Grid Computing in Chemistry) (GRIDCHEM) (2006.05.31 – 2010.07.31, koordinatore A. Vektariene. Vadovas prof. Hans Peter Lüthi (Šveicarija). 2007 metais VU TFAI gavo Tarptautinių mokslo ir technologijų plėtros programų agentūros (TMTPA) paramą mokslo tyrimams, vykdomiems pagal COST D37 programą. Vadovė Aušra Vektariene.

Vykdam šį projektą, 2007 m. buvo teoriškai tiriama benzokondensuotų tieno[3,2-b]furanų reakingumas kvantinės chemijos metodais. Teoriniais tyrimais buvo siekiama suprasti izomerinių benzokondensuotų tieno[3,2-b]furanų sąveikos su elektrofiliis prigimtį, surasti teoriškai apskaičiuojamus cheminio reakingumo parametrus, kurie paaiškintų eksperimentinius rezultatus ir ateityje padėtų prognozuoti naujų šios klasės junginių reakingumą kvantinės chemijos metodais. Buvo optimizuota tieno[3,2-b]furanų geometrija, apskaičiuoti ir įvertinti cheminio reakingumo parametrai: cheminis potencialas, jonizacijos energija, molekulinis kietumas, elektrofiliškumas, ribinių molekulinų orbitalių energijos skirtumas ir erdvinis užimtumas bei Fukui funkcijos. Apskaičiuoti cheminio reakingumo parametrai leido paaiškinti eksperimente stebimą regioelektyvumą, bei padaryti išvadą, kad heterociklinė sistema tieno[2,3-b]benzofurane yra stabilesnė nei izomeriniame heterocikle. Šis rezultatas papildė turimas eksperimentines žinias naujais teoriniais rezultatais, pagrindžiančiais molekulių reakingumą. Siekiant tiksliau išsiaiškinti izomerinių tieno[3,2-b]furanų skirtingo reakingumo priežastis ir elektroninės struktūros skirtumus, buvo atlikta abiejų izomerų ryšio eilių analizė, bei lokalsios jonizacijos energijos paviršiaus ir elektrostatinio potencialo paviršiaus skaičiavimai. Šie skaičiavimai parodė, kad benzotieno[3,2-b]furanas yra struktūriškai analogiškas vinil pavaduotam benzotiofeniui. Tuo tarpu tieno[3,2-b]benzofuranui buvo gauta π -elektronų delokalizacija, kuri yra būdinga stabiliai aromatinei sistemai, susidedančiai iš benzeno ir tiofeno žiedų. Gauti rezultatai leido paaiškinti, kodėl elektrofiliinio pavadavimo reakcija benzotieno[3,2-b]furane vyksta 2-padėtyje pagal prisijungimo-eliminavimo reakcijos mechanizmą, būdingą olefinams. Tuo tarpu tieno[2,3-b]benzofuranui, reprezentuojančiam stabilią aromatinę sistemą, labiausiai

tikėtina aromatiniams junginiams būdinga elektrofilinio pavadavimo reakcijos mechanizmo eiga.

Tarptautinių fondų ir organizacijų finansuojami projektai

AO darbuotojai vykdė Lietuvos-Prancūzijos integruotos veiklos programos „Žiliberas“ projektą **“Geresnės žvaigždžių-milžinių fizikinės sampratos link: 3D atmosferų modelių palyginimas su vėlyvų spektrinių klasių milžinių stebėjimais”**. Projekto koordinatorius: Arūnas Kučinskas, VU TFAI, dalyviai: P.H. Hauschildt (Hamburger Sternwarte, Hamburg, Germany), A. Ivanauskas (VU TFAI), T. Tanabe (Tokyo University, Tokyo, Japan), V. Vansevičius, D. Semionov, R. Stonkutė (visi FI, Vilnius). Vykdyto trukmė: 2007-2008 m.

2007 m. Teorinės fizikos ir astronomijos instituto kompiuteriuose bei Vilniaus universiteto Matematikos ir informatikos fakulteto superkompiuteryje Silicon Graphic Altix 4700 sėkmingai įdiegtas ir pradėtas naudoti hidrodinaminis kodas CO5BOLD. Pradėti skaičiuoti pirmieji 3D raudonųjų milžinių atmosferų modeliai (3), vieno šių modelių skaičiavimas baigtas. Šie modeliai sudarys teorinio šių žvaigždžių atmosferų, spektrų ir fotometrinių spalvų tinklo dalį; Ištirta Saulės metalingumo raudonosios milžinės modelio ($T_{\text{eff}} = 3700 \text{ K}$, $\log g = 1.0$) vidinė struktūra bei savybės, įvertintas konvekcijos pobūdis bei jos efektyvumas šios žvaigždės atmosferoje, kvantifikuotas maišymosi ilgio parametras.

VSTS darbuotojai toliau vykdė Alexander'o von Humboldt'o fondo remiamą projektą **„Orbitinį judesio kiekio momentą turinčios lėtos šviesos sąveika su atomų dujomis”** (2004.07 – 2007.07, vad. G. Juzeliūnas).

2007 m. išplėtotą šviesos sklaidimo magnetodielektrinėse aplinkose mikroskopinė teorija, kurioje atsižvelgiama į lokalinio lauko efektus. Parodyta, kad esant pakankamam medžiagos tankiui, tokioje aplinkoje sklindanti šviesa gali tapti kairine.

ATS darbuotojai vykdė darbus pagal Europos Komisijos asociacijos kontraktą tarp **EURATOM ir LEI** (Nr. FU06-2006-0043) ir sutartis tarp LEI ir VU TFAI, atsakinga vykdytoja A. Kupliauskienė, dalyvauja 12 skyriaus darbuotojų).

Atlikti volframo jonų emisijos spektrų kvazitolydinės juostos srityje skaičiavimai konfigūracijų sumaišymo metodu reliatyvistiniame artutinyje, naudojantis didele konfigūracijų baze. Parodyta, kad intensyvių linijų grupę pagrindinai apsprendžia tik konfigūracijų su simetrišku simetrijos pasikeitimu maišymasis. Interpretuota satelitinė linijų grupė ir numatytas kitos, eksperimentiškai dar nestebėtos, linijų grupės egzistavimas. Naudojantis gautomis emisijos spektrų bendrųjų charakteristikų išraiškomis reliatyvistiniame artutinyje bei sudaryta jų skaičiavimo programa, atlikti volframo jonų spektrų, atitinkančių $4f \rightarrow 4d$ šuolius, gaubiamųjų skaičiavimai ir, lyginant su detalių skaičiavimų rezultatais, įvertinta galimybė tuo metodu apytikriai aprašyti sudėtingus spektrus. Pagal sudarytą planą buvo paruošta ir ištirta reliatyvistinių banginių funkcijų bazė W^{45+} jonams, suskaičiuoti energijos lygmenys. Pradėti sužadavimo iš pagrindinės būsenos skaičiavimai, naudojant reliatyvistinį R-matricos programos variantą DARC.

ATS toliau vykdė Taivano, Latvijos ir Lietuvos vyriausybės remiamą projektą **„Taivano ir Baltijos atomų spektroskopijos ir jų elgesio stipriuose lazerio laukuose teoriniai tyrimai”** (2006.08.01 – 2007.04.01, vad. Z. Rudzikas, atsakinga vykdytoja A. Kupliauskienė).

2007 m. kartu su Taivano mokslininku prof. Keh-Ning Huang pradėti nagrinėti dviejų stadijų procesai, kai fluorescencijos fotonai ar Auger elektronai išspinduliuojami po poliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuotais elektronais. Surastos patį bendriausią visų dalelių poliarizacijos atvejį aprašančios išraiškos. Jos panaudotos išvesti paprastesnėms formulėms, tinkamoms surasti parametrus, matuojamus įvairiuose eksperimentuose. Taip pat atlikti berilio izoelektroninės sekos jonų spektrinių charakteristikų skaičiavimai trikdžių teorijos ir plataus masto konfigūracijų superpozicijos metodais. Abiem metodais surastų rezultatų palyginimas leido padaryti išvadas apie abiejų metodų taikymo ribas bei pateikti rekomendacijas, kada vieną ar kitą metodą reikėtų naudoti. G. Merkelis paruošė paskaitų kursą iš trikdžių teorijos dydžių kampinių dalių suradimo metodų, kurį numato perskaityti studentams 2008 metų vizito Taivanyje metu. TFAI Atomo teorijos skyriaus vyr.m.d. dr. Vladas Tutlys parašė kompiuterinę programą Auger elektronų tikimybės ir submatriciniams elementams apskaičiuoti. Ji bus naudojama tolimesniuose bendruose darbuose. Kartu su prof. Hsiang-Shun Chou atliktas apskaičiuotų dviem metodais elektronų šuolių Be tipo atomuose dydžių palyginamasis tyrimas.

ATS darbuotojai vykdė projektą pagal Švedijos Karališkosios MA grantą Lundo universiteto ir VU TFAI bendradarbiavimui paremti **„Sudėtingų jonų spektroskopija ir jos taikymai astrofizikoje ir termobranduolinės plazmos fizikoje“** (2007 01 02-2008 12 30, vadovas Z. Rudzikas).

Gautos reikalingos skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos ir elektrinio dipolinio momento operatorių teorinės formos. Jų pagrindu parašyta programa, kuri leidžia rasti skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos operatoriaus matricinio elemento ir elektrinio dipolinio momento operatoriaus matricinio elemento vertes. Atlikti su VPU Bendrosios fizikos katedros spiečiumi hipersmulkiosios struktūros konstantų (dviem žemiausiems lygmenims) ir skaliarinės – pseudoskaliarinės sąveikos konstantos skaičiavimai cezio atomui.

Kiti tarptautiniai projektai

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

Vykdant šį projektą, 2007 m. buvo sukurtas metodas Gaia BP/RP spektrų išgryninimui. Sudarytas daugiau kaip 500 pekuliariųjų žvaigždžių katalogas (R, N, S, Ba, Ch, Ap, Am, sdOB, BHB, RHB tipų žvaigždės). antžeminiams energijos pasiskirstymo spektruose stebejimams. Paruoštas raportas GaiaWiki portalui. Paruošti reikalavimai anglingųjų ir Ap/Am žvaigždžių sintetinių spektrų skaičiavimui. Panaudojant Bazelio žvaigždžių atmosferų modelių energijos pasiskirstymo funkcijas, perdirbtas į GAIA

spektrus, tyrinėtos jų klasifikacijos galimybės.

AO skyrius dalyvavo vykdant tarptautinį projektą „**Visos Žemės Teleskopas**” (WET) (nuo 1986 m., koordinatorė J. Provencal (Delavaro astrofizinio tyrimų centras, JAV). Projekte dalyvauja 21 pasaulio observatorija, tame tarpe ir Molėtų AO. Projekte dirba 2 AO darbuotojai (R. Janulis ir E. Pakštienė), 2007 m. paskelbti 4 ISI straipsniai, vienas jų “Nature” žurnale.

Vykdant šį projektą, 2007 m. buvo atrasta planeta prie karštos žvaigždės – subnykštukės V391 Pegasi, atlikta planetinių ūkų Abell 43 ir NGC 7094 centrinių žvaigždžių pulsacijų spektrų analizė, išanalizuoti labai karštos žvaigždės PG 1159-035 pulsacijų periodai. 2007 m. gegužės 21, 23 ir 24 d. atlikti ZZ Ceti žvaigždės PG1541+650 stebėjimai Molėtų observatorijoje su 165 cm teleskopu ir CCD kamera. Atlikta stebėjimų fotometrija ir gauti pulsacijų FT spektrai. 2007 m. rugpjūčio mėn. Molėtų observatorijoje su 165 cm teleskopu buvo atliekami V391 Pegasi stebėjimai.

AO skyrius dalyvavo vykdant tarptautinį projektą „**Vietinės grupės galaktikos IC 1613 cheminės evoliucijos tyrimas**” (nuo 2006 m.). Atsakingas asmuo G. Tautvaišienė; vykdytojai: G. Wallerstein, V. Smith ir D. Bizyaev (JAV), D. Geisler ir J. Borissova (Čilė), C. Charbonnel (Šveicarija).

2007 m. šioje galaktikoje ištirti trijų viršmilžinių didelės skiriamosios gebos spektrai, gauti su VLT (Very Large Teleskope) teleskopu Pietų Europos observatorijoje Čilėje. Pirmą kartą šiai galaktikai gautas metalingumo nustatymas iš didelės skiriamosios gebos spektrų ($[Fe/H] = -0.67 \pm 0.09$). Taip pat nustatytas žvaigždžių amžius (10–12 Myr) bei detali 14 cheminių elementų sudėtis. Įvertintas iki šiol egzistavusių galaktikos IC 1613 žvaigždėdaros modelių tinkamumas.

AO darbuotojai kartu su Švedijos karališkosios mokslų akademija vykdė projektą „**Mažų vietinės grupės galaktikų evoliucijos istorija: žvaigždžių metalingumo ir amžiaus fotometrinių tyrimas**”. Projekto koordinatoriai: Arūnas Kučinskas (Lietuva; VU TFAI), L. Lindegren (Švedija; Lund university observatory, Lund, Sweden), dalyviai: S. Feltzing (Lund university observatory, Lund, Sweden), H.-G. Ludwig (Observatoire Paris-Meudon, France), T. Tanabe (Tokyo University, Tokyo, Japan), P.H. Hauschildt (Hamburger Sternwarte, Hamburg, Germany). Vykdomo trukmė: 2007 m.

Atlikti paruošiamieji darbai tiesioginiams 3D modeliavimo bei raudonųjų milžinių stebėjimų palyginimams: sukurtos programinės priemonės, skirtos CO5BOLD skaičiavimų palyginimui su fotometrinių stebėjimų rezultatais; gautos lygtys, leidžiančios transformuoti fotometrinius stebėjimus tarp SIRIUS ir 2MASS fotometrinių sistemų ir tokiu būdu homogenizuoti fotometrinių stebėjimų duomenis, perskaičiuojant juos į vieną standartinę sistemą; gautos naujos kalibracijos, leidžiančios įvertinti Magelano debesų populiacijų metalingumus, pasitelkiant fotometrinius raudonosios milžinių sekos žvaigždžių stebėjimus infraraudonoje srityje; šios kalibracijos leis tiksliau kvantifikuoti Magelano debesų spiečių metalingumus atliekant šių spiečių žvaigždžių stebimų savybių palyginimą su teorinių skaičiavimų rezultatais.

AO darbuotojai dalyvavo tarptautiniame projekte „**Kepler’io asterozeisminio mokslo konsorciumas**” (Kepler Asteroseismic Science Consortium, KASC) – nuo 2007

m. spalio mėnesio. Koordinatorius: H. Kjeldsen, Aarhus universitetas, Danija; kontaktinis asmuo Lietuvoje – Erika Pakštienė, dalyvauja G. Tautvaišienė ir R. Janulis.

Numatoma dalyvauti parengiamuosiuose darbuose, vykdant antžeminius stebėjimus ir atliekant stebėjimų duomenų analizei skirtos programinės įrangos tikrinimą. 2007 spalio 29-31 d.d. E. Pakštienė dalyvavo pirmoje KASC konferencijoje Paryžiuje.

AO darbuotojai tarptautiniame projekte „**Galaktikos struktūros tyrimas**“, koordinatorius V. Straižys, vykdomas kartu su JAV Naval observatorijos ir Vatikano observatorijos astronomais.

2007 m. gautos 15 Galaktikos sričių su žvaigždžių spiečiais CCD nuotraukos Vilniaus ir Stromvil fotometrines sistemose JAV Naval Flagstafo observatorijos 1 m teleskopu ir Vatikano VATT teleskopu Arizonoje. Lygiagrečiai vykdomos nuotraukų redukcijos ir žvaigždžių katalogų sudarymas iki 17-18 ryškio.

BTS dalyvavo tarptautiniame projekte „**Neelastinė neutrinių sąveika su branduoliais ir jos įtaka supernovų dinamikai**“. Projekto vadovas – K. Langanke (GSI, Darmštatas, Vokietija), atstovas Lietuvoje A. Juodagalvis, kiti vykdytojai: G. Martínez-Pinedo (GSI), B. Müller (Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garcingas, Vokietija), H.-Th. Janka (Max-Planck-Institut), A. Marek (Max-Planck-Institut), W.R. Hix (ORNL, Oak Ridžas, Tenesio valstija, JAV), J.M. Sampaio (Lisabonos Universitetas, Portugalija).

2007 m. projekte dalyvaujantis A. Juodagalvis toliau tyrė neelastinę neutrinių sąveiką su branduoliais ir jos įtaką supernovų dinamikai. Buvo skaičiuojami branduolinės fizikos duomenys kolapsuojančių žvaigždžių modeliavimui bei branduolių sąveikos su leptonais greičiai hibridiniame modelyje.

Lietuvos valstybinio mokslo ir studijų fondo projektai

AO ir ATS darbuotojai dalyvavo LVMSF finansuojamam projekte „**Taikomųjų uždavinių tyrimai ir realizavimas naudojant grid technologijas**“ (**GridTechno**), 2007-2008, (VU TFAI koord. J. Tamulienė).

2007 m. buvo testuota ir pritaikyta sintetinių žvaigždžių spektrų skaičiavimo programų paketas SYNTSPEC kobalto kiekio žvaigždėse tyrimams. Nustatyta Co kiekis 43-jose Galaktikos disko milžinėse ir trijose nykštukinės galaktikos IC 1613 viršmilžinėse. Sudaryti algoritmai ir programinė įranga, veikianti grid aplinkoje ir skirta optimalioms kobalto junginių reliatyvistinėms banginėms funkcijoms generuoti atsižvelgiant į labiausiai besimaišančias konfigūracijas. Programinė įranga jau yra sukurta, baigiami diegimo darbai. Sumodeliuotos skirtingos simetrijos įvairių struktūrų Co_{16} , Co_{18} , Co_{30} ir Co_{36} nanodalelės. Šiuo metu atliekamas šių nanodalelių tyrimas GAMESS programų paketu. Atlikti Co_2O_n darinių magnetinių savybių tyrimai.

AO darbuotojai dalyvavo vykdant LVMSF finansuojamą projektą „**Žvaigždžių milžinių vidinės struktūros sampratos link: 3D atmosferų modeliai ir vėlyvųjų milžinių stebėjimai**“. Projekto koordinatorius: Arūnas Kučinskas, VU TFAI, projekto dalyviai: R. Lazauskaitė (VPU/VU TFAI), G. Valiauga (VU TFAI), D. Semionov, R. Stonkutė, D. Narbutis (visi FI, Vilnius). Vykdomo trukmė: 2007 m.

2007 m. pradėti Saulės metalingumo raudonosios milžinės modelio ($T_{\text{eff}} = 3700 \text{ K}$, $\log g = 1.0$) stebimų savybių tyrimai: suskaičiuotas modelio spektras bei fotometrinių spalvos, ištirtos atskirų spektrinių linijų savybės bei jų pokyčiai, sąlygojami konvekcinės pernašos žvaigždės atmosferoje, ištirti ryškio kitimo ypatumai. Sukurtas Magelano debesų raudonųjų milžinių fotometrinių stebėjimų bankas, apjungiantis mūsų gautus SIRIUS stebėjimus bei kitų autorių gautus fotometrinius Magelano debesų stebėjimus infraraudonojoje bei optinėje srityse.

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 koordinatore 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.

2007 m. buvo atlikta virtualių organizacijų, esančių kituose GRID'uose, analizė, įvertintos instituto taikomiesiems uždaviniams tinkamos virtualios organizacijos. Rengiamoms dalyvavimo europiniuose GRID paraiškoms pateikti duomenys ir siūlymai apie VU TFAI GRID infrastruktūros panaudojimo galimybes. Buvo modernizuoti ir palaikomi pastovaus darbo režime instituto klasteriai. Dalyvauta LitGrid Pagalbos tarnybos veikloje (support@litgrid.lt), LitGrid seminaruose, dalyvauta specializuotame seminare, parengtas teikiamų GRID paslaugų lankstinukas, parengta informacija internetiniam portalui. Turimi klasteriai įjungti į LitGrid tinklą, įvertintas jų tinkamumas, rengiama dokumentacija administratoriui ir naudotojui, klasteriuose įdiegtos reikalingos ir tinkamos virtualios organizacijos, taikomųjų uždavinių programos. Papildytos paruoštos rekomendacijos vadovams ir administratoriams. Litgrid projekto veikla pristatyta TPA informacinėje dienoje. Atlikta tinkamų virtualių organizacijų, esančių kituose grid'uose analizė. Šalia „atomas.itpa.lt“ klasterio įdiegtas ir sukonfiguruotas „spektras.itpa.lt“ klasteris, kuris įsiliejo į europinius Grid tinklus. „spektras.itpa.lt“ klasteryje įdiegtos paralelinio skaičiavimo (MPI) bibliotekos ir jas naudojanti GAMESS aplikacija.

AO, ATS ir BTS darbuotojai dalyvavo Lietuvos vyriausybės remiamoje programoje „Bendradarbiavimas su CERN“.

2007 m. CERN CMS detektoriaus duomenų priėmimui VU TFAI yra rengiami du kompiuterių klasteriai ATOMAS ir SPEKTRAS. 2007 m. klasteris ATOMAS veikė pastovių skaičiavimų režimu, jame buvo periodiškai atnaujinama sertifikuota programinė įranga, kelis kartus per dieną vykdomi patikimumo testai. Klasteris SPEKTRAS buvo suinstaliuotas ir paleistas 2007 m. bėgyje. Taip pat buvo sukurtas fobas.itpa.lt duomenų saugojimo elementas. SPEKTRAS ir FOBAS realizuoti kaip virtualios mašinos tame pačiame fiziniame serveryje. Kaip skaičiavimo elementus SPEKTRAS naudoja 20 iš CERN'o 2006 m. gruodžio mėnesį gautų kompiuterių, kuriuose 2007 m. buvo suinstaliuota Scientific Linux (CERNe modifikuota operacinė sistema) ir gLite programinė įranga. Klasteris SPEKTRAS kol kas yra skirtas uždavinių testavimams.

Testavimo programoms parašyti buvo sudarytos autorinės sutartys su J. Tamuliene, A. Acumi ir V. Laugaliu. Klasterio SPEKTRAS galingumo padidinimui 2007 m. gruodžio mėnesio pabaigoje iš CERN buvo papildomai įsigyti 27 panašūs kompiuteriai. Instituto mokslininkai dalyvavo tarptautinėse konferencijose CERN tyrimų tematika, o jaunesnieji kolegos mokėsi kursuose.

Europos sąjungos remiami struktūrinių fondų projektai

„Lietuvos mokslininkų gebėjimų ugdymas Lietuvai integruojantis į Europos Sąjungos infrastruktūrą“. Projekto vadovė J. Ačaitė, valdymo grupės pirmininkė G. Tautvaišienė, VU TFAI veiklų koordinatorius A. Kazlauskas, vykdymo trukmė 2006.06 – 2008.05.

Vykdamas šį projektą, 2007 kovo 26-30 d. institute surengtas paskaitų ciklas „Tarptautinis termobranduolinis eksperimentinis reaktorius ITER – energetikos perspektyva“. Renginį organizavo ATS ir AO darbuotojai. Paskaitas skaitė užsienio mokslininkai H.Summers (Didžioji Britanija), N.R.Baddnel (Didžioji Britanija), L.Csernai (Švedija), D.Naujoks (Vokietija), B.E.J.Pagel (Didžioji Britanija), Lietuvos mokslininkai S.Rimkevičius (Kaunas), E.Urbonavičius (Kaunas), L.Pranevičius (Kaunas) ir instituto darbuotojai A.Kupliauskienė, P.Serapinas, R.Kisielius.

2007 m. gegužės 21-25 d. Molėtų astronomijos observatorijoje organizuota vasaros mokykla „Astronominių duomenų analizės programinė įranga“, kurioje skaitė paskaitas ir praktinius užsiėmimus vedė užsienio mokslininkai R. Janusz (Lenkija), I. Ilyin (Vokietija), o taip pat Lietuvos mokslininkai Š. Raudys, G. Stepanauskas ir M. Radavičius. Mokykloje dalyvavo 30 klausytojų iš VU TFAI, VU AO, VPU.

2007 m. spalio 15-26 d. Molėtų astronomijos observatorijoje vyko vasaros mokykla „Virtualios observatorijos“, kurioje paskaitas skaitė ir vedė praktinius užsiėmimus 11 lektorių iš įvairių Europos šalių. Paskaitas skaitė ir praktinius užsiėmimus vedė mokslininkai J. Salgado ir A. Stebe (Ispanija), F. Genova, S. Derriere, I. Chilingarian, M. Spite (Prancūzija), L. Dobos (Vengrija), R. Smareglia (Italija), E. Chatziminaoglou (Vokietija), O. Malkov (Rusija), J. K. Davies (D. Britanija). Mokykloje dalyvavo 27 klausytojai iš VU TFAI, VU AO, VPU. Prie renginio organizavimo prisidėjo A. Kazlauskas, G. Tautvaišienė, Š. Mikolaitis, E. Stonkutė, V. Laugalys, MAO ir kitas administracinis ir aptarnaujantis personalas.

2007 m. lapkričio 5-9 d. įvyko paskaitų ciklas „Sinchrotroninė spinduliuotė – instrumentas ateičiai keisti“, kuriame paskaitas skaitė užsienio lektoriai A. Wagner ir J. Schneider (Vokietija), J. Purans (Latvija) ir Lietuvos lektoriai Z. Rudzikas, J. Vaitkus, S. Mickevičius, V. Šablinskas ir J. Čeponkus. Paskaitas išklusė 57 VU TFAI, VU, VPU ir FI mokslininkai. Prie renginio organizavimo prisidėjo AO ir ATS darbuotojai.

„Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė“. Projekto vadovas V. Daniūnas, vykdymo trukmė 2006.06 – 2008.05. Dalyvauja AO, ATS, BTS, VSTS ir Planetariumo darbuotojai.

Vykdamas šį projektą, 2007 m. buvo toliau tobulinama ir palaikoma interneto svetainė „Astronomija“, ruošama medžiaga, parengta medžiaga leidiniui „Lietuvos Dangus 2008“, organizuoti du renginiai visuomenei Molėtų observatorijoje 2007 m. liepos 31 d. ir rugsėjo 28 d. Astronomijos naujienų puslapyje patalpinta kelios dešimtys žinučių apie

aktualias astronomijos ir kosmonautikos naujienas. Vykdomas terminijos vystymo darbas. Parengta medžiaga portalui „Mokslas plus“ apie Nobelio fizikos premijas: A.Nobelio veikla, premijos įsteigimas, jos teikimas, laureatai, jų ir premijų pasiskirstymas įvairiais požiūriais, šių metų premija. Parengta ir perskaityta VU TFAI planetariume paskaita: „Nobelio fizikos premijos – nuo Rentgeno iki šių metų laureatų“. Parengti kelių fizikos dėsnius iliustruojančių žaislų aprašymai portalui, sudarytas moksleivių fizikos žinyno puslapis. Sistemingai atnaujinamas mokslo naujienų skyrius. Surinkta didžioji planuojamų virtualių eksperimentų dalis bei sukurta pagalbos sistema. Toliau kuriama „Interneto svetainė “Rizikos fizika“. Parengtas populiarus dinaminio chaoso supratimo aprašymas. Sukurtas fraktalinių paviršių generatorius – aprašymas ir WebMathematica programa. Sukurtas Mandelbroto aibės ir Feigenbaumo medžio generatorius – JAVA programa. Sukurtas Niutono Rafsono netiesinių lygčių sprendimo algoritmo aprašymas ir generatorius – WebMathematica programa. Sukurtas Elementariųjų ląstelinių automatų aprašymas ir Ląstelinis automatas – JAVA programa. Sukurtas Gyvenimo žaidimo aprašymas ir demonstracija – JAVA programa. Sukurtas signalų galios spektrinio tankio sąvokos aprašymas ir neatsitiktinio signalo spektrinio tankio demonstracijos – WebMathematica programos. Sukurtos stochastinių signalų galios spektrinio tankio demonstracijos – WebMathematica programos. Sukurtos taškinių procesų galios spektrinio tankio demonstracijos – WebMathematica programos. Sukurti 1/f triukšmo modeliai kaip įvairaus ilgio stochastinių impulsų sekos. Remiantis atviro kodo paketu NetLogo ir jo pagrindu sukurta „Bandos jausmo“ (Herding) modelio viena iš galimų versijų, parengta lietuviška šio modelio vizualizacija ir ji publikuota svetainėje „Rizikos fizika“. Išversti į lietuvių kalbą ir adaptuoti „Rizikos fizikos“ svetainei ŽIV plitimo bei grobuonio ir aukos ekosistemos demonstraciniai modeliai. WebMathematica programinio paketo pagalba sukurta originalus grobuonio ir aukos ekosistemos demonstracinis modelis, paremtas Lotka-Voltera lygtimis. Populiariai pristatytos kai kurios grafų teorijos sąvokos. NetLogo programinio paketo pagalba pateikta lietuviška tinklų modelio *Didžioji komponentė* versija. Taip pat WebMathematica pagalba sukurta Bedimensionio tinklų modelio grafinė demonstracija. JAVA programavimo kalba sukurta Mažumos žaidimo (Minority Game) demonstracija. Planetariume surengta 10 periodinių projekto žiniasklaidos renginių visuomenei ir spaudos atstovams “Planetariumas rodo visiems “. Juose apsilankė 857 lankytojų.. Paskaitas skaitė instituto mokslo darbuotojai G. Tautvaišienė, R. Karazija, R. Lazauskaitė, S. Bartašiūtė.

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

2007 m. institutas priėmė 12 studentų mokslinei praktikai. Jiems vadovavo 10 AO, ATS ir VSTS darbuotojų: G. Tautvaišienė, A. Kučinskas, K. Zdanavičius, J. Zdanavičius, G. Gaigalas, J. Tamulienė, V. Lazauskas, B. Kaulakys, G. Juzeliūnas, G. Gontis.

Mokslinės kompetencijos ir tęstinio mokymo plėtra saugioms ir ekologiškoms maisto žaliavoms gaminti (MOKOTEM) (Įgyvendinant 2004-2006 metų Bendrojo programavimo dokumento 2.4 priemonę „Mokymosi visą gyvenimą sąlygų plėtojimas“, registracijos Nr. ESF/2004/2.4.0-K-01-090/SUT-240, kartu su LŽŪU ir KPKC, projekto vadovas V. Pranckietis (LŽŪU), 2005-2008. P. Serapinas (koordinadorius ir vykdytojas), J. Šalkauskas (vykdytojas).

2007 m. buvo tęsiamos LŽŪU specialistų konsultacijos. Parengtas straipsnis rinkiniui „Saugių ir ekologiškų maisto medžiagų technologijos“.

Pedagoginė veikla

2007 m. pabaigoje (gruodžio mėn.) fizikos krypties doktorantūroje buvo 7 doktorantai: O. Rancova, V. Nelkinas, V. Regelskis, E. Puzeras, R. Juršėnas, Š. Mikolaitis, Ž. Ežerinskis. 2007 m. lapkričio 1 d. doktorantūrą sėkmingai baigė D. Jurčiukonis. Jo disertacijos gynimas numatomas 2008 m. pirmą pusmetį. 2007m. į doktorantūrą priimti 2 doktorantai. D. Jurčiukonis, V. Regelskis ir E. Puzeras 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 – 3 darbuotojai, VPU – 10 darbuotojų, VDU – 1 darbuotojas. Mokslininkai vadovavo 5 VU, 10 VPU ir 1 Latvijos universiteto studentų darbams. VU TFAI Molėtų observatorijoje vyko VPU ir VU studentų praktikos bei kiti renginiai. V. Lazauskas buvo VPU, B. Kaulakys – VU valstybinių egzaminų ir diplominių darbų gynimo komisijos nariais. R. Karazija išleido bendrąją vadovėlį aukštajai mokyklai „Fizikos metodologija ir filosofija“. G. Gaigalas ir J. Tamulienė su bendraautorais išleido knygą „Šiuolaikinio eksperimento laboratoriniai darbai“ VPU studentams.

Institutas aktyviai dalyvavo organzuojant ir pravedant studentų praktiką pagal Lietuvos mokslo tarybos vykdomą ES Struktūrinių fondų projektą. 10 darbuotojų vadovavo 12 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 komandos vadovė Tarptautinėje astronomijos olimpiadoje. J. Tamulienė išleido mokomąją knygą pradinių klasių mokytojams ir moksleiviams „Kasdieniai stebuklai“. VU TFAI Molėtų observatorijoje vyko Lietuvos mokinių informavimo ir techninės kūrybos centro organizuota moksleivių stovykla bei nacionalinės astronomijos olimpiados stebėjimų turas.

Leidyba

2007 m. išleisti keturi tarptautinio žurnalo **“Baltic Astronomy”** 16 tomo numeriai (vyr. redaktorius V. Straižys, redkolegijos narės G. Tautvaišienė ir S.Bartašiūtė), **“Fizikų žinios”** 32 ir 33 numeriai (ats. red. E. Makariūnienė ir red. pav. R. Kivilšienė) ir kasmetinis leidinys **“Lietuvos dangus 2008”** (ats. red. G. Tautvaišienė).

R. Karazija išleido bendrąją vadovėlį aukštajai mokyklai „Fizikos metodologija ir filosofija“, V., VPU leidykla, 2007.

Cambridge University Press išleido Z. Rudziko monografijos „Theoretical Atomic Spectroscopy“ antrąją laidą.

R. Kivilšienė ir E. Makariūnienė (FI) parengė knygelę „Akademikui Povilui Brazdžiūnui (1897-1986) – 110“, V., VU leidykla, 2007.

Parengta ir išleista nauja Molėtų AO lankstinukų laida, LitGrid lankstinukas, penkios BalticGrid projekto veiklų brošiūros, struktūrinių fondų remiamų projektų lankstinukai.

Organizuoti moksliniai renginiai

Vilniuje 2007 m. spalio 22–23 d.d. Vilniuje organizuota BASNET projekto Baigiamoji konferencija. Ji buvo skirta moterų mokslininkų padėties pagerinimo strategijos aptarimui. Renginyje dalyvavo 44 dalyviai iš Lietuvos, Latvijos, Estijos, Lenkijos, Rumunijos, Belgijos, Rusijos ir Suomijos. 2007 m. organizuoti BDP 2 priorieto „Žmogiškųjų išteklių plėtra“ 2.5. priemonės „Žmogiškųjų išteklių kokybės gerinimas mokslinių tyrimų ir inovacijų srityje“ projekto „Lietuvos mokslininkų gebėjimų ugdymas Lietuvai integruojantis į Europos Sąjungos infrastruktūrą“ (SFMIS Nr. BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0038) projekto 4 paskaitų ciklai.

Mokslo žiniasklaida

Instituto darbuotojai aktyviai dirbo mokslinės žiniasklaidos srityje. 2007 m. institute parengti „Fizikų žinių“ – „Lithuanian Journal of Physics“ mokslo populiarinimo priedo – 32 ir 33 numeriai. Parengtas ir išleistas tęstinio mokslo populiarinimo leidinio „Lietuvos dangus 2008“ numeris. Visuomenei ir moksleiviams mokslas populiarintas radijo ir televizijos laidų metu (10 pasisakymų), laikraščiuose, žurnaluose ir elektroninėje spaudoje paskelbtos 39 publikacijos, perskaityta 1030 paskaitų.

2007 m. **Molėtų observatorijoje** buvo priimta 217 ekskursijų (5716 žm.). Molėtų AO organizuota visa eilė renginių visuomenei: kovo 24 d. ir rugsėjo 22 d. vyko Lygiadienio muzikos vakarai (S. Lovčikas). 2007 m. gegužės 12 d. MAO buvo organizuotas astronomijos mėgėjų renginys „Žvaigždėtos naktys“. Nuo gegužės 5 d. iki spalio 27 d. MAO centriniam pastate veikė dailininko Virginijaus Kašinsko darbų paroda „Kosminiai sodai“, organizuotas susitikimas su dailininku, vyko parodos atidarymo ir uždarymo renginiai.

Liepos 31 d. – rugpjūčio 1 d. Molėtų observatorijoje lankėsi žinomi samių kultūros tyrinėtojai Ánte Mikkel Gaup‘as bei Øistein Hanssen‘as iš Norvegijos, kurie atsivežė kilnojamą planetariumą buvo ir surengė kelis seansus visuomenei „Samių dangaus medžioklė“.

Didžiausias metų renginys MAO buvo rugsėjo 28 d. organizuota „Tyrėjo naktis“, kurioje apsilankė virš 400 žmonių iš visos respublikos. Renginyje paskaitas skaitė AO darbuotojai S. Bartašiūtė, A. Bartkevičius, A. Ivanauskas, E. Pakštienė, J. Tamulienė ir A. Juodagalvis, teleskopas ir astronominę aparatūrą lankytojams demonstravo K. Černis, R. Janulis, J. Sperauskas, J. Zdanavičius, K. Zdanavičius, su observatorijos svečiais bendravo G. Tautvaišienė, A. Kazlauskas, S. Lovčikas, Y. Chorniy, E. Puzeras, E. Stonkutė ir kt. observatorijos darbuotojai.

S. Lovčikas skaitė paskaitas Molėtų pagrindinėje mokykloje, Nidos vidurinėje mokykloje, Juodkrantės pagrindinėje mokykloje, Biržų Saulės gimnazijoje, Molėtų gimnazijoje, respublikinėje jaunimo etnokultūros stovykloje Palūšėje, respublikinėje moksleivių fizikos olimpiadoje Vilniuje. P. Bogdanovičius perskaitė 2 paskaitas fizikos

mokytojams. G. Tautvaišienė dalyvavo LRT-2 televizijos laidoje „Kuluarai“, radijo laidoje „Ryto garsai“ (2007.07.23). G. Valiauga ir V. Jonauskas dalyvavo mokslo populiarinimo žurnalo „Scientific American“ vertimo darbe.

2007 m. VU TFAI planetariume Vilniuje surengti 792 renginiai, kuriuose dalyvavo 41 061 lankytojai. Daugiausia – 382 mokomųjų paskaitų surengta Vilniaus miesto mokyklų mokiniams, priimtos 357 įvairių lankytojų grupės iš kitų miestų ir vietovių, organizuotos 43 viešos paskaitos ir proginiai renginiai visuomenei, 10 renginių pagal projektą „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė“. Šio projekto paskaitas planetariume skaitė ir instituto darbuotojai: R.Lazauskaitė, S.Bartašiūtė, G.Tautvaišienė, R.Karazija. Ypač didelio lankytojų dėmesio sulaukė šie renginiai: „5-ojo Tarptautinio animacinių filmų festivalio „Tindirindis“ uždarymas“, „Meksikiečių kompozitoriaus Fernando Corona ir jo disko „Cosmos“ pristatymas; „50 m. nuo Pirmojo dirbtinio Žemės palydovo paleidimo“ (kartu su Rusijos Federacijos ambasada Lietuvoje), „Atmintinų dienų savaitė – Planetariumui 45 m“. Paruoštos 6 naujos paskaitos (D. Matulytė paruošė 3, D. Sperauskienė – 3). Paskaitoms pagaminta gausi vaizdinė medžiaga: 68 viso-kupolo panoramos, viena Zeis panorama, 600 skaidrių ir 18 DVD video siužetų. Paruoštas ir išleistas reklaminis paskaitų ir seansų tematikos 2007/2008 m. sezonui lankstinukas, atnaujinta plakatų ir fotovaizdų ekspozicija „Visatos vitrina“. Eksponuotos 3 naujos foto parodos. Buvo teikiama metodinė ir vaizdinė parama Vilniaus m. Žirmūnų gimnazijai, Veliučionių ir Vilniaus spec. globos namams. Siekiant populiarinti Planetariumo veiklą, platinami paskaitų tematikos lankstinukai, atskirų paskaitų plakatai ir skrajutės. Visos paskaitos ir renginiai anonsuojami interneto puslapyje ir vestibulyje esančių 2 kompiuterių ekranuose. 8 darbuotojai dalyvavo projekto „Mokslas. Mokslininkai. Visuomenė“ veiklose. Lektorė Ieva Šablevičiūtė baigė doktorantūros studijas ir apgynė mokslų daktaro disertaciją tema „Žvaigždžių spiečiai Andromedos galaktikoje“.

Organizacinė, techninė ir ūkinė veikla

2007 m. už lėšas, gautas už sėkmingą dalyvavimą ES BP mokslinių tyrimų, technologinės plėtros ir demonstracinės veiklos projektuose, nupirkta naujas 64 GB operatyviosios atminties 16 procesorių kompiuterių klasteris (DANGUS), naujų personalinių kompiuterių, programinės ir kitokios įrangos. Institutas įsigijo teleskopų valdymo komplektuojančių dalių, stacionarių ir nešiojamų kompiuterių, vaizdo projektorių ir kitos biuro technikos. Įsigytas 27 dviprocessorinių kompiuterių klasteris iš Europos branduolinių tyrimų centro (CERN, Šveicarija) bus panaudotas klasterio SPEKTRAS modernizavimui

Molėtų observatorijos 165 cm teleskopui iš investicinių lėšų buvo sukonstruota ir pagaminta moderni automatinė gidavimo sistema. Buvo toliau kuriamos ir tobulinamos MAO teleskopų valdymo ir duomenų perdavimo programos. Ekskursijų aptarnavimui įsigytas modernus mobilusis teleskopas. Molėtų AO taip pat įsigyta naujos konferencijų įrangos (ekranas, garso įranga).

Šias metais savo lėšomis suremontuota keletas darbo kambarių ir pagalbinių patalpų pastate A. Goštauto gatvėje bei Molėtų observatorijoje. Kadangi administracinį pastatą A. Goštauto gatvėje patikėjimo teise administruoja 8 bendraturčiai, institutui jam priklausančią pastato dalį tinkamai administruoti buvo sunku. Reikia remontuoti laiptinę

ir daugumą kabinetų. 2007 m. suremontuoti 350, 444 ir 431 darbo kambarai. Taip pat buvo suremontuota instituto naudojama MII salė, aprūpinta baldais ir nauja demonstracine technika.

2007 m. balandžio 11 d. pasirašyta Instituto kolektyvinė sutartis.

Instituto finansavimas

Instituto 2007 m. finansinės ataskaitos, 2007 m. 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 2007 metais VU TFAI kartu su Planetariumu gavo 4950 t. litų asignavimų, iš kurių 2825,4 t. Lt sudarė tiesioginiai biudžeto asignavimai, 472,4 t. Lt – tikslinės biudžeto lėšos, 123 t. Lt – LVMS fondo lėšos, 822,5 t. Lt – užsienio lėšos mokslo programoms vykdyti, 61 t. Lt – Tarptautinių mokslo ir technologijų programų plėtros agentūros lėšos COST projektams vykdyti. Specialiosios mokslo plėtojimo programos ir nuompinigių lėšos sudarė 645,7 t. Lt.

Instituto 2007 m. strateginio plano įvykdymas ir tikslai 2008 metams

Esminiai 2007 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 15-oje mokslinių temų (planuotos 14);
2. Vidutinis vienam mokslininkui per metus tenkantis publikacijų skaičius leidiniuose, įtrauktuose ISI sąrašą, yra 0,8 (planuota pasiekti 1,0);
3. Neapginta nei viena daktaro disertacija (planuota apginti tris);
4. Organizuota viena tarptautinė konferencija (planuotos dvi).

Vykdam “Specialiąją mokslo plėtojimo” programą:

1. Vykdytos trys tarpvalstybinės mokslo ir studijų programos (planuotos trys);
2. Pravesta 1030 paskaitų, ekskursijų ir informacinių seansų moksleiviams ir visuomenei (planuota 1100).

2008 m. svarbiausi strateginiai tikslai yra šie:

1. Integracija į bendrąją Europos mokslinių tyrimų erdvę, plėtojant instituto dalyvavimą tarptautiniuose projektuose;
2. Aukščiausios kvalifikacijos specialistų ir ekspertų rengimo ir visuomenės švietimo plėtra;
3. Aukščiausios kokybės mokslinės produkcijos rengimo efektyvumo didinimas – vidutiniškai po vieną ISI sąrašo publikaciją kiekvienam mokslininkui per metus;
4. Instituto vykdomų fundamentinių tyrimų taikymo Lietuvos reikmėms sričių paieškos intensyvinimas.

Ataskaitai pritarta 2008 m. vasario 00 d.
VU TFAI tarybos posėdyje, nutarimas Nr. 1