



LATVIJAS UNIVERSITĀTE
**ATOMFIZIKAS UN
SPEKTROSKOPIJAS
INSTITŪTS**

Teorētiskās fizikas laboratorijas atskaite par 2023. gadu

LU ASI seminārs

18.01.2024.

Darbinieki:

- Dr.hab.phys. **Imants Bērsons** (bāzes finansējums)
- Dr.phys. **Rita Veilande**
 - LZP projekts “Dzīvsudraba piesārņojums savvaļas putnos Latvijā: pašreizējais stāvoklis un līdzšinējo pārmaiņu rekonstrukcija” (projekta vadītājs Rita Veilande)
 - LU ASI bāzes finansējums par laboratorijas vadību
- Dr. **Teodora Kirova**
 - Latvijas, Lietuvas un Taivānas Pētniecības padomju trīspusējais grants “Atomu sistēmu koherentā optiskā kontrole” (projekta vadītājs prof. Mārcis Auziņš)
 - LZP projekts ”Jaunas kodola apvalka nano šķiedras, kas veidotas, izmantojot koaksiālu elektrisko vērpsanu fotokatalītiskiem lietojumiem” (projekta vadītājs Romans Viters)
 - LU ASI bāzes finansējums
- Viespētnieks Dr. **Hamid Hamedi**, Viļņas Universitāte, 22-26.05.2023, un 10-16.08.2023 un 25-29.11.2023

Papildus projekti

- COST akcija CA18222 (2019-2023) “Attosecond Chemistry” (AttoChem), Teodora - Latvijas valsts pārstāvis
- GENERA:”Gender Equality Network in the European Research Area”, Teodora - Latvijas valsts pārstāvis
- COST akcija CA18212 (2019-2023) “Molecular Dynamics in GAS phase” (MD-GAS), Teodora - Latvijas valsts pārstāvis
- Horizon Europe MSCA-SE projekts “Q-DYNAMO: Quantum Dynamic Control of Atomic, Molecular and Optical Process”, <https://cordis.europa.eu/project/id/101131418>, Teodora - projekta koordinatore (2024-2027)

Publikācijas (SCOPUS/WoS):

1. Tamulienė, J., Kirova, T. «Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field» *Journal of Molecular Modeling* 30(1), 11 (2024)
2. Wu, C.-E., Kirova, T., Auzins, M., Chen, Y.-H. «Rydberg-Rydberg interaction strengths and dipole blockade radii in the presence of Förster resonances» *Optics Express* 31(22), 37094–37104 (2023)
3. Asadpour, S.H., Kirova, T., Hamed, H.R., Yannopoulos, V., Paspalakis, E. «Azimuthal dependence of electromagnetically induced grating in a double V-type atomic system near a plasmonic nanostructure» *European Physical Journal Plus* 138(3), 246 (2023)
4. Kirova, T., Tamulienė, J. «Numerical Studies of the Impact of Electromagnetic Field of Radiation on Valine» *Materials* 16(5), 1814 (2023)
5. Tamulienė, J., Kirova, T., Romanova, L., Vukstich, V., Snegursky, A. «Fragmentation of tyrosine by high-energy electron impact» *European Physical Journal D* 77(1), 13 (2023)
6. I.Bersons, R.Veilande, O.Balcers «Mathematical Models of Photons» *Foundations of Physics* 53(4), 78 (2023)
7. Abola, A., Rimša, A., Strazds, M., Veilande, R., Revalde, G. «Data correlation of mercury in eggshells and eggshell membranes of wild birds» *Engineering for Rural Development* 22, 338–343 (2023)
8. Kirova, T. «The GENERA network/community of practice and its work on mental health in physics» *AIP Conference Proceedings* 3040(1), 060004 (2023)

Publikācijas (pieņemtas, iesniegtas, sagatavošanas procesā):

- “Spatial Characterization of Fraunhofer Diffraction in a Four-Level Light-Matter Coupling System”, S. H. Asadpour, T. Kirova, H. R. Hamedi, and R. Asgari, pieņemta *Phys. Rev. A*.
- “Hyperfine Interaction in the Autler-Townes Effect: Control of Two-photon Selection Rules in the Morris-Shore Basis”, A. Cinins, D. K. Efimov, M. Bruvelis, K. Miculis, T. Kirova, N. N. Bezuglov, M. Auzins, I. I. Ryabtsev and A. Ekers, arXiv:2312.02801v1, iesniegts *Phys. Rev. A*

Starptautiskās konferences (1):

- 1. LU 81.konference** Atomfizikas, kosmiskās tehnoloģijas un medicīniskās fizikas sekcija 16.-17.02.2023:
 1. I.Bērsons, R.Veilande “Difrakcijas problēma fotona kvantu modelī”
 2. T. Kirova and J. Tamuliene “Numerical studies of the impact of the electromagnetic field of radiation on valine”,
 3. T. Kirova, A. Gulans, and R. Viter “Structural and optical properties of wurtzite ZnO from first principles”
- 2. EGAS54** (European Group on Atomic Systems), 18.-22.06.2023, Strastbūra, Francija:
 1. I.Bersons, R. Veilande, and O. Balcers “3D quantum model of the photon”, C.33.
 2. R. Veilande, A. Abola, A. Rimša, A. Skudra “Determination of mercury in wild bird samples by Zeeman atomic absorption spectrometry”, E.7.
 3. T. Kirova and J. Tamuliene “Numerical studies of the impact of the electromagnetic field of radiation on valine”, E.8.
 4. S. H. Asadpour, T. Kirova, H. R. Hamedi, V. Yannopapas, and E. Paspalakis “Azimuthal Dependence of Electromagnetically Induced Grating in a Double V-type Atomic System near Plasmonic Nanostructure”, B.9.

Starptautiskās konferences (2):

3. “Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field”, J. Tamuliene and T. Kirova, stenda referāts, **45th Lithuanian National Physics Conference**, 25-17. oktobris, 2023, Viļņa, Lietuva
4. “Fragmentation of tyrosine by high-energy electron impact”, J. Tamuliene, T. Kirova, L. Romanova, V. Vukstich, A. Snegursky, stenda referāts, 1st Training School of the **COST action CA21101 COSY** "Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications”, 19-22. septembris 2023, Belgrada, Serbija
5. “Azimuthal Dependence of Electromagnetically Induced Grating in a Double V-type Atomic System near Plasmonic Nanostructure” T. Kirova, S. H. Asadpour, H. R. Hamedi, V. Yannopapas, and E. Paspalakis, **Humboldt Kolleg**, 2-6. jūlijs 2023, Viļņa, Lietuva
6. “Mercury contamination in wild birds in Latvia. Are the beaver ponds to blame?” A. Rimša, M. Strazds, A. Abola, R. Veilande, European Ornithologists’ Union Congress (**EOU 2023**), 21-25. augusts 2023, Lunda, Zviedrija
7. “Data correlation of mercury in eggshells and eggshell membranes of wild birds” A. Abola, A. Rimša, M. Strazds, R. Veilande, G. Revalde, **Engineering for Rural Development**, 24-26. maijs 2023, Jelgava, Latvija
8. «Dzīvsudraba piesārņojums melnajos stārķos Latvijā» A. Skudra, R. Veilande, G. Rēvalde, A. Ābola, M. Strazds, Z. Briķe, A. Rimša, **Pasaules latviešu zinātnieku kongress**, 27-29. jūnijs 2023, Rīga, Latvija
9. «Zeeman AAS – a means to assess mercury pollution in the environment through artefacts of wild birds» A. Abola, A. Rimša, Z. Briķe, R. Veilande, G. Revalde, International Conference on Phenomena in Ionized Gases (**ICPIG**), 9-14. jūlijs 2023, Egmond aan Zee, Nīderlande

Starptautiski semināri (3):

- “MSCA Staff Exchange project Q-DYNAMO: bridging scientists in quantum optics across the globe”, T. Kirova, uzaicināts referāts, vebinars “MSCA Staff Exchange projects involving partners from Japan”, 29 Novembri 2023, organizē EURAXESS JAPAN
- “Azimuthal Dependence of Electromagnetically Induced Grating in a Double V-type Atomic System near Plasmonic Nanostructure”, uzaicināts referāts, S. H. Asadpour, T. Kirova, H. R. Hamedi, V. Yannopapas, and E. Paspalakis, 2nd TLL Meeting “Coherent Optical Control of Atomic Systems”, 6-9 jūlijā 2023, Viļņa, Lietuva.
- ”Complex Molecules in Space”, T. Kirova, uzaicināts referāts, Marts 2023, Università degli Studi di Pisa, Piza, Itālija

Iesniegtie projekti:

1. HORIZON-MSCA_SE-2021 “C-DYNAMO”, projekta koordinators T.Kirova, saņēma finansējumu
2. LZP projekts “Nanodimantu pielietojumi medicīnā: kvantu ķīmijas pētījumi”, projekta vadītājs T.Kirova, nesaņēma finansējumu
3. LZP projekts “Development and study of Arsenic and Selenium high-frequency electrodeless lamps for Zeeman absorption spectroscopy”, projekta vadītājs R.Veilande, nesaņēma finansējumu
4. COST akcija “PolyTopo: Topological textures in Condensed Matter”, T.Kirova valsts pārstāvis Latvija, nesaņēma finansējumu

Citas aktivitātes:

- **Rita Veilande:**
 - LU ASI Zinātniskās padomes sekretāre
 - LU Senators ar dalībām Finanšu un budžeta komisijā un Akadēmiskajā komisijā
 - Dalība Zinātnieku Naktī, studentu seminārā par laboratoriju
- **Imants Bērsons:**
 - LZA korespondētājloceklis
 - Dalība studentu seminārā par laboratoriju
- **Teodora Velcheva Kirova:**
 - Aktīvi darbojas starptautiskā zinātniskā laukā ar vizītēm un pieteiktiem kopīgiem projektiem, COST akcijās.

Tēmas, pie kurām strādājam:

- Autlera-Tovna efekts un gaišo un tumšo stāvokļu izveidošanās atomu un molekulu sistēmās.
- Kvantu un nelineārā optika ar Ridberga atomiem (dipola-dipola mijiedarbība, dipola blokāde, atomu lokalizācija...).
- Teorētiskie un skaitliskie modeļi aminiskābju mijiedarbībai ar ārējo lauku.
- Optisko īpašību skaitliskie aprēķini ZnO nanodaļiņām.
- 3D fotonu matemātiskie modeļi un to pārbaude dažādos fizikālos procesos - difrakcija.
- Elektrona mijiedarbība ar kvantēto elektromagnētisko lauku.
- Dzīvsudraba piesārņojuma mērījumi melnajos stārķos.

Dzīvsudraba piesārņojums melnajos stārķos

- WP1: Paraugu ievākšana no melnajiem stārķiem un citiem savvaļas putniem un rezultātu analīze
- WP2: Piesārņojuma (Hg) mērījumi savāktajos paraugos
- WP3: Zēmana absorbcijas metodes optimizācija



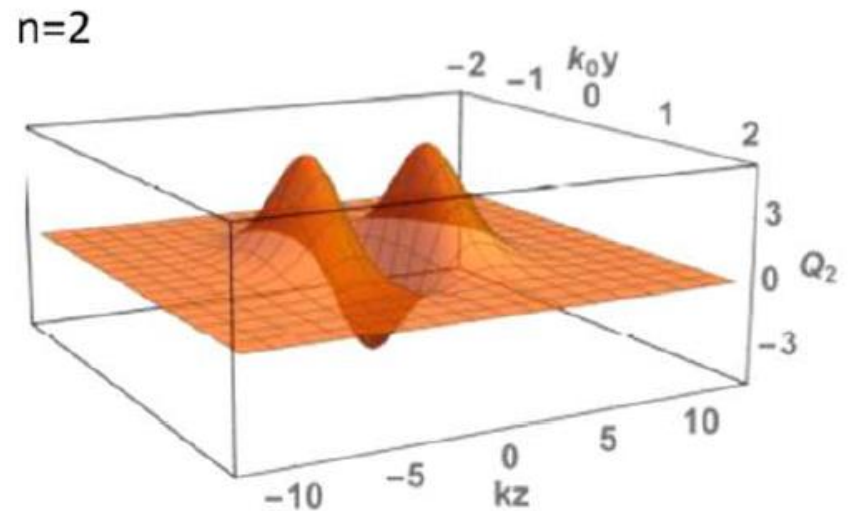
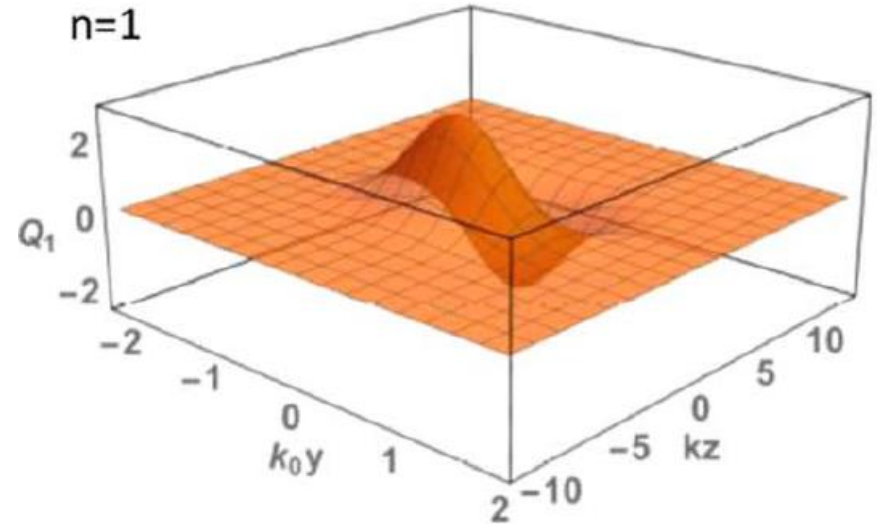
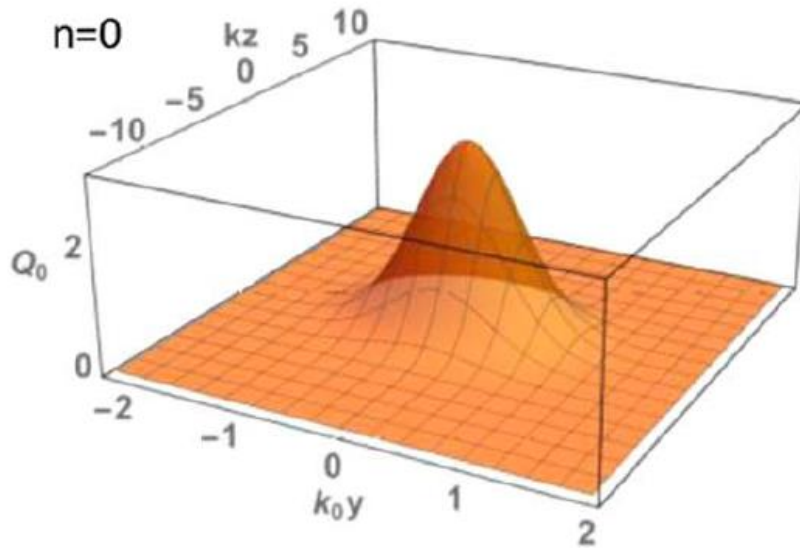
- 350 sūdu paraugi, ap 1400 mērījumu no 150 ligzdām no 4 pēdējiem gadiem
- 1030 olu čaumalu/membrānu paraugi, ap 5400 mērījumi, par pēdējiem 26 gadiem

Fotona kvantu modelis

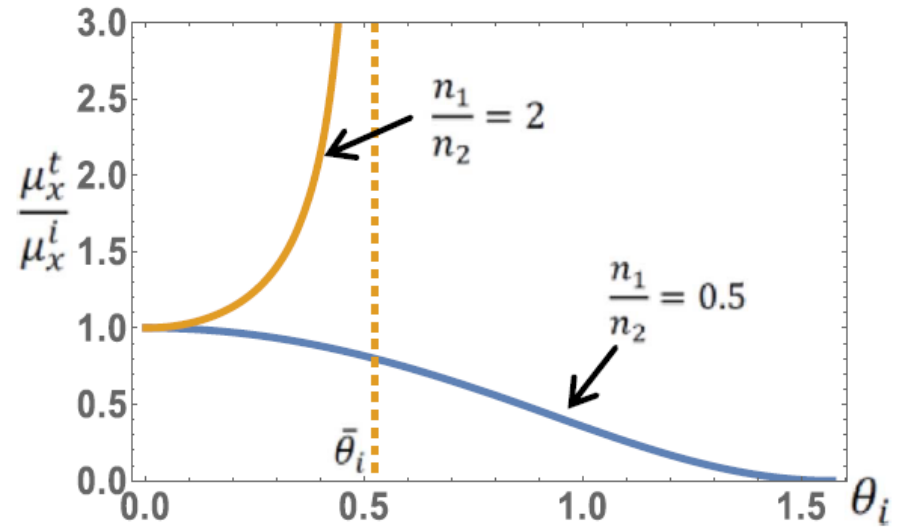
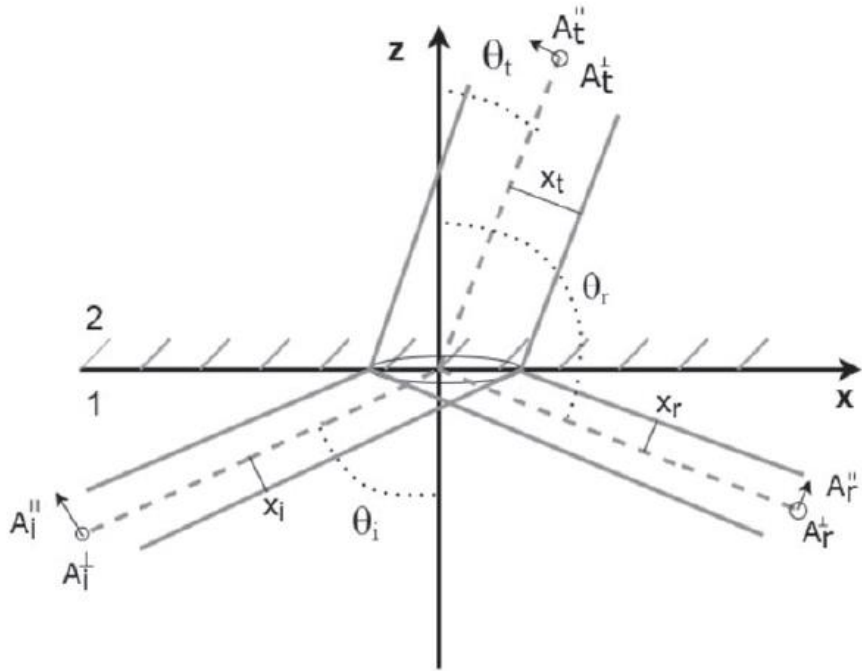
- Normētas īpašfunkcijas

$$A_{kn} = kN H_n(s\eta_k) e^{\frac{1}{2}[-s^2\eta_k^2 - \mu_x k^2(x-x_0)^2 - \mu_y k^2(y-y_0)^2]}$$

$$\eta_k = \omega t - k(z - z_0), \quad k = \frac{\omega}{c}$$

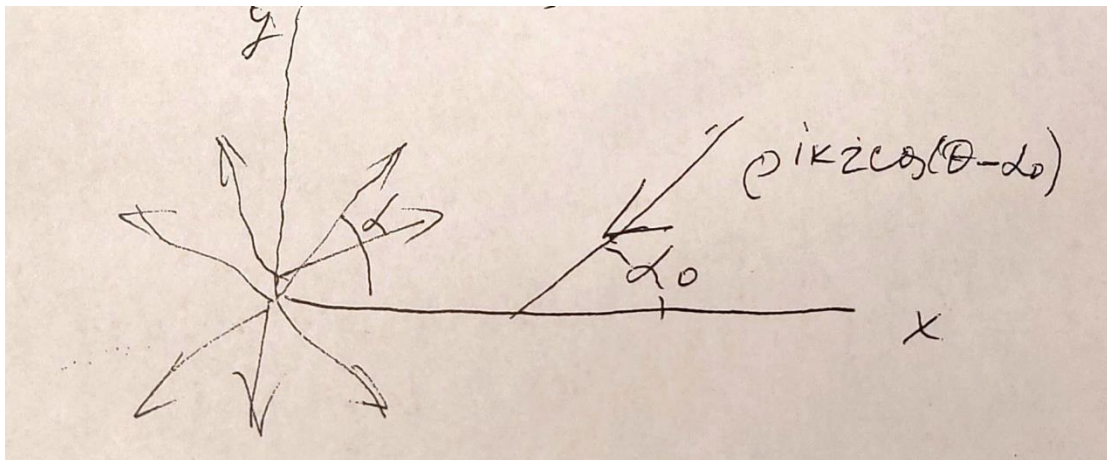


Atstarošanās un laušana



$$\mu_x^t = \frac{\mu_x^i \cos^2 \theta_i}{\cos^2 \theta_t} = \mu_x^i \frac{1 - \sin^2 \theta_i}{1 - \frac{n_1^2}{n_2^2} \sin^2 \theta_i}.$$

Difrakcija, Zomerfelda formulējums plakanam vilnim



- Uzdevums reducējas uz sekojošiem vienādojumiem

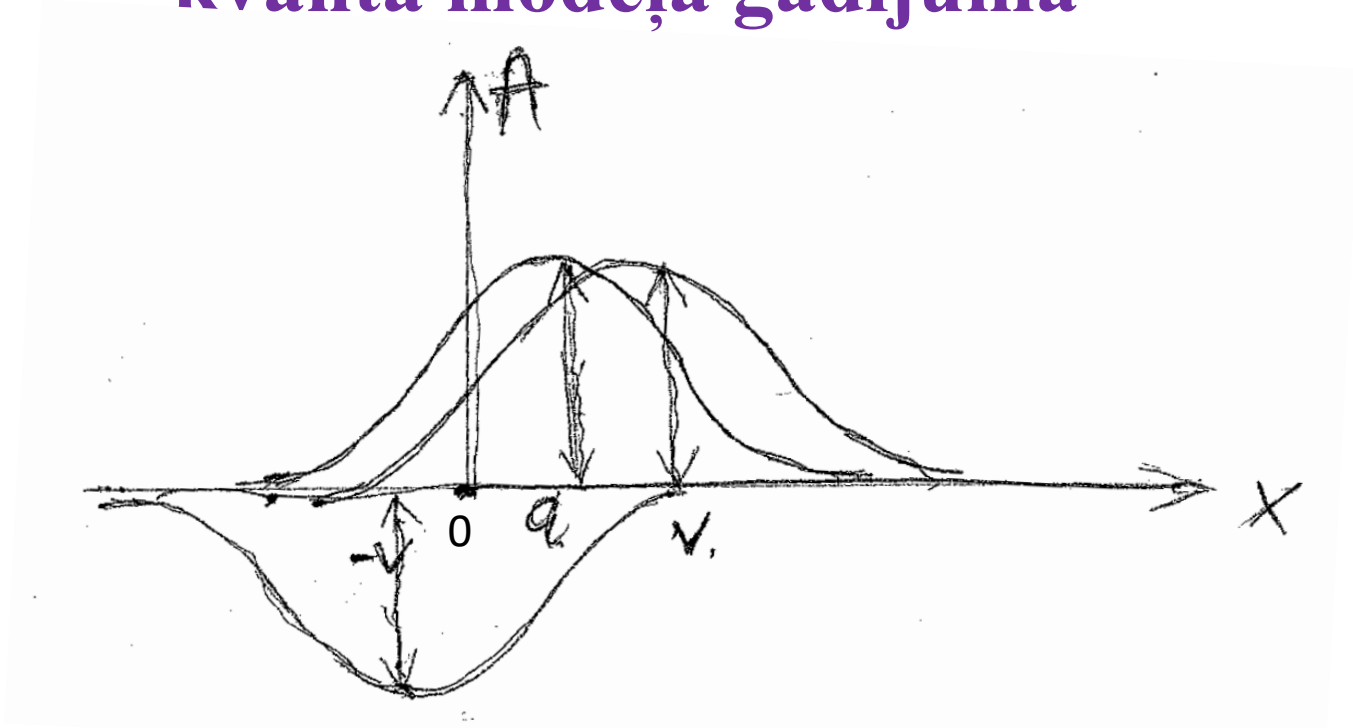
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\cos\alpha) \exp(ikx \cos\alpha) d\alpha = -\exp(-ikx \cos(\alpha_0)) \quad x > 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\cos\alpha) \sin\alpha \exp(ikx \cos\alpha) d\alpha = 0 \quad x < 0$$

- Atrisinājums

$$P(\cos\alpha) = \frac{i \sin \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\alpha_0}{2}}{\pi \cos \alpha + \cos \alpha_0}$$

Difrakcija, Zomerfelda uzdevums fotona kvanta modeļa gadījumā



$$\int_0^{\infty} dv F(v) e^{-\frac{(v-x)^2}{2}} = -e^{-\frac{(a-x)^2}{2}}, \quad x < 0$$

$$\int_{-\infty}^0 dv F(v) e^{-\frac{(v-x)^2}{2}} = e^{-\frac{(a-x)^2}{2}}, \quad x < 0$$

Elektrona mijiedarbība ar kvantēto elektromagnētisko lauku

- Elektromagnētiskā lauka kvantēšana

Viļņu vektori $\vec{k} = \left(\frac{2\pi n_x}{L}, \frac{2\pi n_y}{L}, \frac{2\pi n_z}{L} \right), \quad n_i = \pm 1, \pm 2 \dots$

Impulsa telpa sastāv no maziem kubiņiem ar tilpumu

$$\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3$$

Kvantētais lauks

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}\alpha} \vec{e}_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{kV}} \left(a_{\vec{k}\alpha} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} + a_{\vec{k}\alpha}^* e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \right)$$

- Diraka vienādojums elektronam elektromagnētiskā laukā ($\vec{\alpha}, \beta$ - Diraka matricas)

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\alpha} \left(i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar c} \vec{A} \right) + \beta \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0$$

- Vakuuma efekti, Lemba nobīde un elektrona anomālais magnētiskais moments.

Veicot unitāru transformāciju var atbrīvoties no elektrona koordinātēm.

$$A_x = N \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{k}} \xi_{\vec{k}}$$

bet pie laika atvasinājuma parādās summa:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\omega}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_{\vec{k}}^2} - \xi_{\vec{k}}^2 + 1 \right)$$