



LATVIJAS UNIVERSITĀTE
**ATOMFIZIKAS UN
SPEKTROSKOPIJAS
INSTITŪTS**

Teorētiskās fizikas laboratorijas atskaite par 2024. gadu

LU EZTF ASI seminārs
19.12.2024.

Darbinieki:

- Dr.hab.phys. **Imants Bērsons** (bāzes finansējums)
- Dr.phys. **Rita Veilande**
 - LZP projekts “Dzīvudraba piesārņojums savvaļas putnos Latvijā: pašreizējais stāvoklis un līdzšinējo pārmaiņu rekonstrukcija” (projekta vadītājs Rita Veilande) – projekta pabeigšana bez papildus finansējuma
 - EU projekts «Atomu, molekulu un optisko procesu kvantu dinamiskā kontrole» (Q-DYNAMO) (projekta vadītājs Teodora Velcheva Kirova)
 - LU ASI bāzes finansējums
- 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 Vīters)
 - EU projekts «Atomu, molekulu un optisko procesu kvantu dinamiskā kontrole» (Q-DYNAMO) (projekta vadītājs Teodora Velcheva Kirova)
 - LU ASI bāzes finansējums
- **Dina Bērziņa**
 - EU projekts «Atomu, molekulu un optisko procesu kvantu dinamiskā kontrole» (Q-DYNAMO) (projekta vadītājs Teodora Velcheva Kirova)
 - LU ASI bāzes finansējums



Papildus projekti

- COST akcija CA18222 (2019-2024) “Attosecond Chemistry” (AttoChem)
- COST akcija CA18212 (2019-2023) “Molecular Dynamics in GAS phase” (MD-GAS)
- COST akcija CA21101 (2022-2026) “Confined Molecular Systems: from a New Generation of Materials to the Stars” (COSY)
- COST akcija CA22147 (2023-2027) “European metal organic framework network: combining research and development to promote technological solutions” (EU4MOFs).
- COST akcija CA23134 (2024-2027) “Topological Textures in Condensed Matter” (PolyTopo)

Mobilitātes (1):

- no Horizon Europe MSCA-SE projekta “**Q-DYNAMO**: Quantum Dynamic Control of Atomic, Molecular and Optical Process”
 1. **Parmas universitāte**, Itālija, Prof. Sandro M. Wimberger
✓ T.Kirova 5.-14.03.2024
 2. **Pizas universitāte**, Itālija, Prof. Donatella Ciampini
✓ T.Kirova 15.-25.03.2024
 3. **Ulmas Universitāte**, Ulma, Vācija, Prof. Johannes H. Denschlag
✓ T.Kirova 25.03.-04.04.2024
 4. **Tokijas zinātnes universitāte**, Tokija, Japāna, Prof. Mark Sadgrove
✓ R.Veilande 01.-30.04.2024
✓ T.Kirova 15.11.-14.12.2024
 5. **Temples universitāte**, Filadelfija, ASV, Prof. Marjatta Lyyra
✓ R.Veilande 01.09.-31.10.2024
✓ D.Bērziņa 01.-31.10.2024

Mobilitātes (2):

- no Horizon Europe MSCA-SE projekta “**SENS4CORN**: Novel optical nanocomposite sensors for analysis of micro and macro elements in corn plants”, **SME ”SensoGrafa”**, Viļņa, Lietuva, Prof. Arunas Ramanavicius
✓ T.Kirova 01.-31.05.2024
- no Latvija-Lietuva-Taivāna projekta ”**Coherent Optical Control of Atomic Systems**”, **Nacionālā centrālā universitāte**, Taojuaņa, Taivāna, Prof. Wen-Te Liao
✓ T.Kirova 14.10.-14.11.2024

Publikācijas (SCOPUS/WoS):

1. “Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field”, J.Tamuliene and T. Kirova, Journal of Molecular Modeling, 30, 11 (2024), <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05802-2>
2. “Spatial Characterization of Fraunhofer Diffraction in a Four-Level Light-Matter Coupling System”, S.H.Asadpour, T.Kirova, H.R.Hamedi, and R.Asgari, Phys. Rev. A 109, 023702 (2024), <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.023702>
3. “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, Phys. Rev. A 109, 063116 (2024), <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.063116>
4. “The characterisation of mercury pollution in the faeces of Baltic region breeding black storks”, A.Rimsa, A.Abola, R.Veilande, Z.Brike, G.Revalde, A.Skudra, M.Strazds, Journal of Hazardous Materials Advances 16, 100499 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.hazadv.2024.100499>
5. “Education for Sustainable Development in Baltic Universities” In Book of proceedings ‘First International Conference on Sustainable Energy Education (SEED 2024)’, Valencia, Spain, 3-5 July 2024. Editorial Universitat Politècnica de València, pp 531-539. DOI: <https://doi.org/10.4995/SEED2024.2024.19007>

Publikācijas (sagatavošanas procesā):

1. “Generation and Coherent Control of Dark-State Spatial Mode”, H.-Ch.Shia, S.-W.Shao, W.Ch.Chiang, Y.-H.Kuan, I-K.Liu, T.Kirova, G.Juzeliunas, Y.-J.Lin, and W.-T.Liao, tiks iesniegts uz Phys. Rev. Research 2024.g.
2. “Azimuthally dependent absorption and gain in ambda system with spontaneously generated coherence controlled by an optical vortex field”, V.Kudriasov, T.Kirova, S.H.Asadpour, and H.R.Hamedi, tiks sniegts uz Scientific Reports 2024.g.
3. paper on organic luminophores..., I.Tepliakova, V.Zabolotnii, V.Lukinsone,A.Kinens, J.Tamuliene, T.Kirova, R.Viter, sagatavošanā
4. “Spectator state role in time-reversal symmetry”, sadarbībā ar itāļiem, Ennio Arimondo grupu, sagatavošanā

Starptautiskās konferences, referāti (1):

1. LU **82.konference** Atomfizikas, kosmiskās tehnoloģijas un medicīniskās fizikas sekcija 15.02.2024:
 1. I.Bērsons, R.Veilande, O.Balcers “3D quantum model of the photon”
 2. T.Kirova and J.Tamuliene “Numerical studies of the impact of the electromagnetic field of radiation on valine”,
 3. S.H.Asadpour, T.Kirova, H.R.Hamedi, V.Yannopapas, E.Paspalakis “Azimuthal Dependence of Electromagnetically Induced Grating in a Double V-type Atomic System near Plasmonic Nanostructure”
 4. R.Veilande, A.Abola, A.Rimsa, A.Skudra “Determination of mercury in wild bird samples by Zeeman atomic absorption spectrometry”
 5. D.Bērziņa “University of Latvia and the Times Higher Education (THE) World University Rankings”
2. “Investigation of Rydberg-Rydberg interaction and blockade radii under Förster resonance”, Ch-E.Wu, T.Kirova, M.Auzins, Y-H.Chen, **24th Annual Meeting of the Physical Society of Taiwan**, 24.–26. janvāris, Nacionālā centrālā universitāte, Taojuaņa, Taivāna
3. “Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field”, J.Tamuliene and T.Kirova, **5th and final workshop of the AttoChem COST Action (ATTOCHEM TENERIFE 2024)**, 2024.gada 28.februāris–1.marts, Tenerife, Spānija
4. “Quantum and Nonlinear Optics in Atomic and Molecular Systems”, T.Kirova, uzaicinātais referāts, marts, Ulmas Universitātes Kvantu matērijas institūts, Ulma, Vācija
5. “Modified basis sets for molecules in magnetic fields: applications to radiation-induced fragmentation of amino acids”, T.Kirova, J.Tamuliene, L.Romanova, V.Vukstich, and A.Snegursky, uzaicinātā prezentācija, Final Meeting of the **COST Action CA 18212 “Molecular Dynamics in the Gas Phase” (MD-GAS)**, 8.–12.aprīlis, Hamburga, Vācija
6. “My research at Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia” R.Veilande, aprīlis, Tokijas Zinātnes universitāte, Tokija, Japāna
7. “Quantum and Nonlinear Optics in Atomic Systems”, T.Kirova, uzaicinātais referāts, maijs, Viļņas Universitātes Teorētiskās fizikas un astronomijas institūts, Viļņa, Lietuva

Starptautiskās konferences, referāti (2):

8. "Rydberg-Rydberg Interaction Strengths and Dipole Blockade Radii in the Presence of Förster Resonances", T.Kirova, C.E.Wu, M.Auzins, and Y.-H.Chen, 55th edition of the European Group on Atomic Systems (**EGAS55**), 16.–20.jūnijs, Granada, Spānija
9. "Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field", T.Kirova and J.Tamuliene, uzaicinātais referāts, 2nd COSY General Meeting of the **COST action CA21101 "Confined Molecular Systems: from a New Generation of Materials to the Stars"**, 1.–3.jūlijs, Vroclava, Polija
10. "Education for Sustainable Development in Baltic Universities" D.Bērziņa, uzaicinātais referāts, **Sustainable energy education SEED**, 3.-5.jūlijs, Valencija, Spānija
11. "Azimuthal Dependence of Electromagnetically Induced Grating in a Double V-type Atomic System near Plasmonic Nanostructure", T.Kirova, S.H.Asadpour, H.R.Hamed, V.Yannopapas, E.Paspalakis, **26th International Conference-School "Advanced Materials and Technologies"**, 26.–30.augusts, Palanga, Lietuva
12. "Research structures and research management at University of Latvia" and "Overview at research priorities in Latvia and participation to EU Horizon Europe programme" D.Bērziņa, oktobris, Temples Universitāte, Filadelfija, ASV
13. "Research topics at Laboratory of Theoretical Physics" R.Veilande, oktobris, Temples Universitāte, Filadelfija, ASV
14. "Rydberg-Rydberg Interaction Strengths and Dipole Blockade Radii in the Presence of Förster Resonances", T. Kirova, C. E. Wu, M. Auzins, and Y.-H. Chen, uzaicinātais referāts, **3rd TLL Meeting "Coherent Optical Control of Atomic Systems"**, 8.–10. novembris, Gaosjuna, Taivāna
15. "Quantum and Nonlinear Optics in Atomic and Molecular Systems", T.Kirova, uzaicinātais referāts, **1st Q-DYNAMO workshop on Quantum Optics**, 9.decembris, Tokijas Zinātņu universitātes Fizikas nodaļa, Tokija, Japāna

Iesniegtie projekti:

1. Pēcdoktorantūras grants “Nanoarhitektūras pusvadītāju optoelektronika” ar Dr. Sami Ortakaya, padomdevējs T.Kirova, gaidām rezultātus
2. LZP projekts “Teorētiskās un skaitliskās simulācijas viena fotona tehnoloģijām ar Ridberga atomiem”, 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. ERAF projekts «Development of ecological disinfection equipment using UV LEDs and ozone» (projekta vadītāja G.Rēvalde, administratīvā vadītāja D.Bērziņa, dalībiece R.Veilande), gaidām rezultātus
5. GENERA projekts ar KA220-HED-8FA7F489 ar STIFTUNG DEUTSCHES ELEKTRONEN-SYNCHROTRON DESY un Nationale Agentur für Erasmus+ Hochschulzusammenarbeit, sagatavošanā

Citas aktivitātes:

- **Rita Veilande:**

- LU ASI Zinātniskās padomes sekretāre
- LU EZTF Konsultatīvās Zinātniskās padomes loceklis
- LU Senators ar dalībām Finanšu un budžeta komisijā, Akadēmiskajā komisijā un Stratēģijas komisijā

- **Imants Bērsons:**

- LZA korespondētājloceklis
- Dalība studentu seminārā par laboratoriju

- **Teodora Velcheva Kirova:**

- Aktīvi darbojas starptautiskā zinātniskā laukā ar vizītēm un pieteikumiem kopīgiem projektiem, COST akcijās.
- Dalība Zinātnieku naktī par Q-Dynamo projektu

- **Dina Bērziņa:**

- ASI mājas lapas uzturētāja.
- Dalība Zinātnieku naktī par Q-Dynamo projektu

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.
- Kvantu optika uz nanošķiedrām
- 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



- Pēdējo mērījumu veikšana 2023.gada ievāktajiem paraugiem;
- Nopietnākas publikācijas rakstīšana par daļu no ievāktajiem datiem;
- Projekta gala atskaides rakstīšana – pozitīvi novērtēts.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Hazardous Materials Advances

journal homepage: www.elsevier.com/locate/hazadv

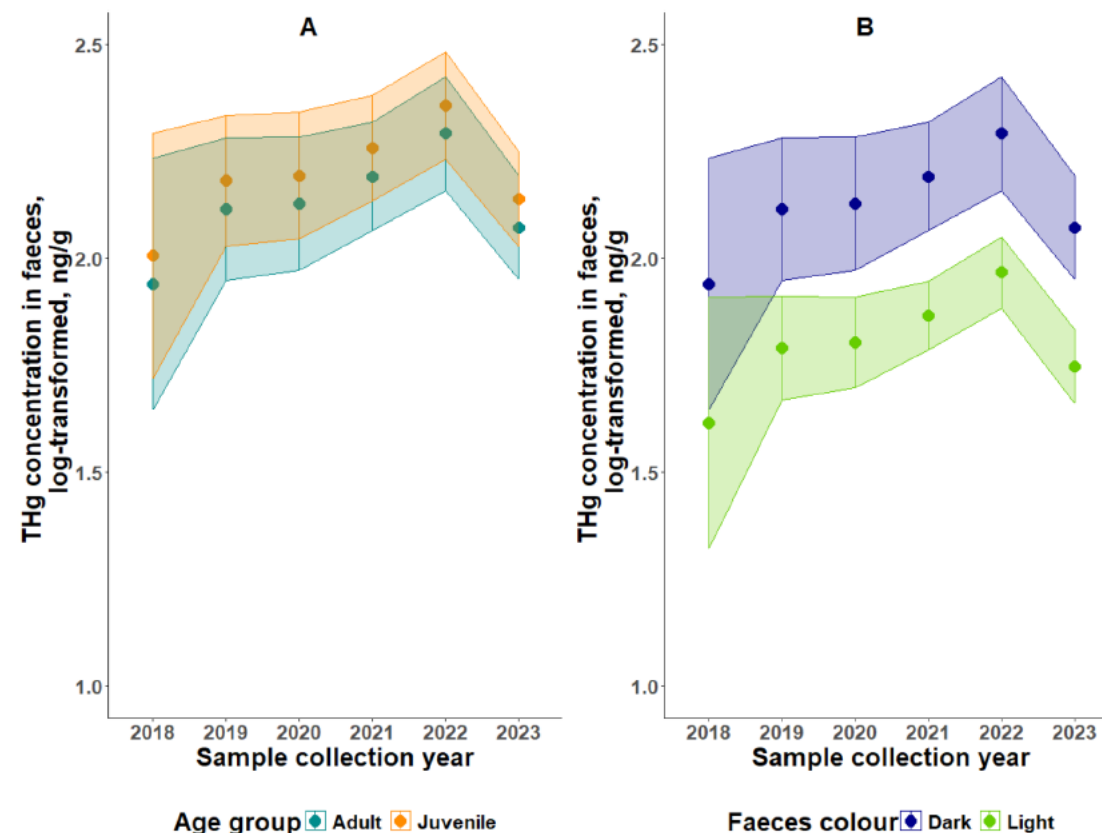
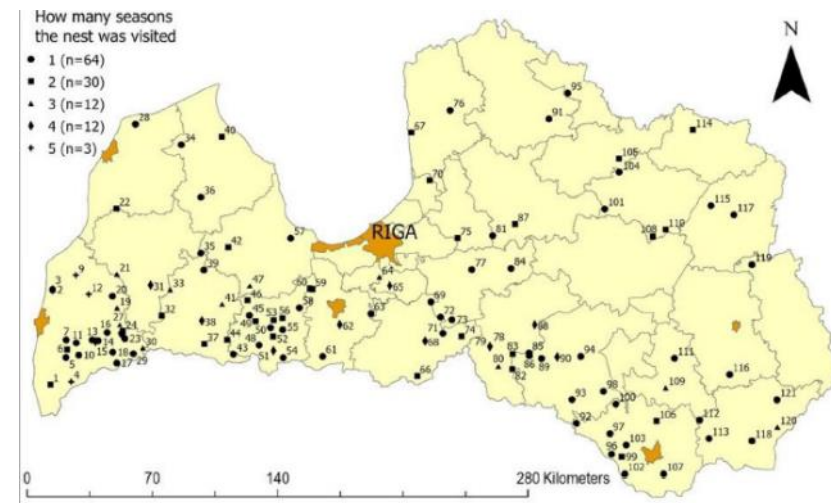
The characterisation of mercury pollution in the faeces of Baltic region breeding black storks

Antonija Rimša^{a,b,*}, Anda Abola^a, Rita Veilande^a, Zanda Brike^a, Gita Revalde^a, Atis Skudra^a, Maris Strazds^b

^a Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Str 3, Riga, , LV-1004, Latvia

^b Institute of Biology, University of Latvia, Jelgavas Str 1, Riga, , LV-1004, Latvia

- Raksts balstījās uz sūdu un ēdienu paraugu mērījumiem.
- Melno stārķu sūdu paraugi ievākti 6 gadu periodā (2018-2023) no 121 ligzdas Latvijas teritorijā, atdalot jaunuļu un pieaugušo putnu sūdu paraugus.
- Hg koncentrācija tumšu sūdu paraugos ir statistiski nozīmīgi augstāka kā gaišajos sūdos.





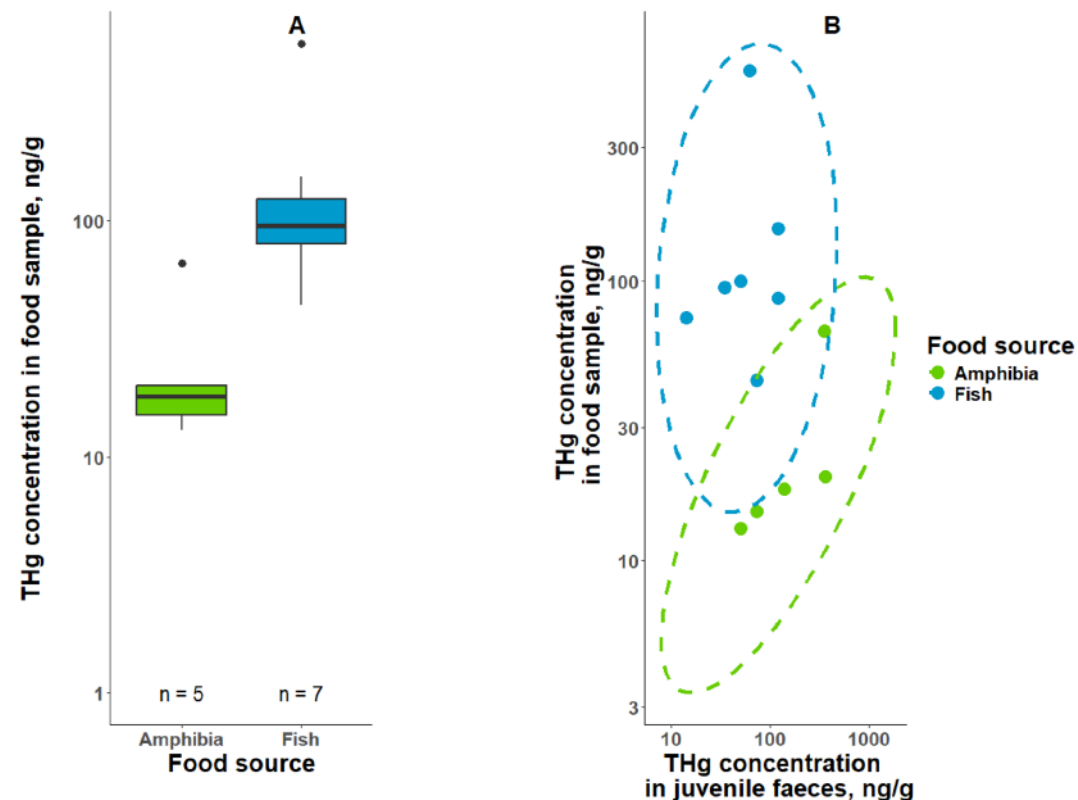
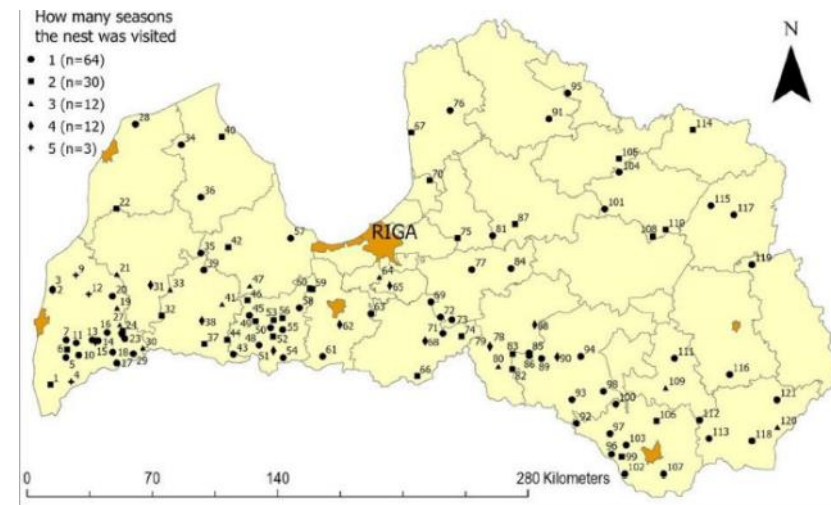
The characterisation of mercury pollution in the faeces of Baltic region breeding black storks

Antonija Rimša^{a,b,*}, Anda Abola^a, Rita Veilande^a, Zanda Brike^a, Gita Revalde^a, Atis Skudra^a, Maris Strazds^b

^a Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Str 3, Riga, , LV-1004, Latvia

^b Institute of Biology, University of Latvia, Jelgavas Str 1, Riga, , LV-1004, Latvia

- Raksts balstījās uz sūdu un ēdienu paraugu mērījumiem.
- Melno stārķu sūdu paraugi ievākti 6 gadu periodā (2018-2023) no 121 ligzdas Latvijas teritorijā, atdalot jaunuļu un pieaugušo putnu sūdu paraugus.
- Hg koncentrācija tumšu sūdu paraugos ir statistiski nozīmīgi augstāka kā gaišajos sūdos.
- Kā sagaidāms zivīs ir augstāka Hg koncentrācija kā abiniekos.
- Hg koncentrācijas korelācija starp atvemto zivs paraugiem un atbilstošiem jauno putnu sūdiem no konkrētās ligzdas ir vāja un statistiski nenoizīmīga.





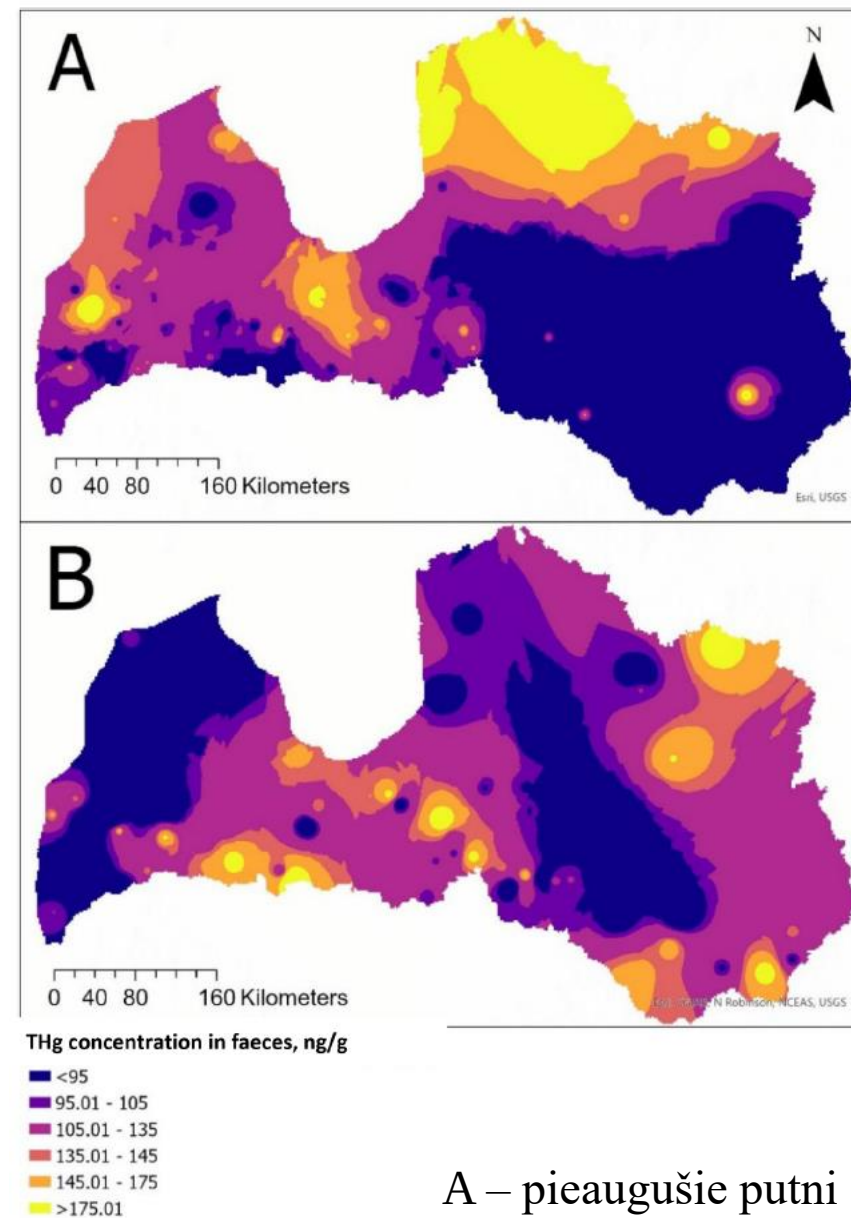
The characterisation of mercury pollution in the faeces of Baltic region breeding black storks

Antonija Rimsa^{a,b,*}, Anda Abola^a, Rita Veilande^a, Zanda Brike^a, Gita Revalde^a, Atis Skudra^a, Maris Strazds^b

^a Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Str 3, Riga, , LV-1004, Latvia

^b Institute of Biology, University of Latvia, Jelgavas Str 1, Riga, , LV-1004, Latvia

- Raksts balstījās uz sūdu un ēdienu paraugu mērījumiem.
- Melno stārķu sūdu paraugi ievākti 6 gadu periodā (2018-2023) no 121 ligzdas Latvijas teritorijā, atdalot jaunuļu un pieaugušo putnu sūdu paraugus.
- Hg koncentrācija tumšu sūdu paraugos ir statistiski nozīmīgi augstāka kā gaišajos sūdos.
- Kā sagaidāms zivīs ir augstāka Hg koncentrācija kā abiniekos.
- Hg koncentrācijas korelācija starp atvemtā zivs paraugiem un atbilstošiem jauno putnu sūdiem no konkrētās ligzdas ir vāja un statistiski nenoizīmīga.
- Vispārīga tendence (attēlotas vidējās koncentrācijas) ir ka Latvijas DA daļā ir zemāka Hg koncentrācija salīdzinot ar centrālo daļu.





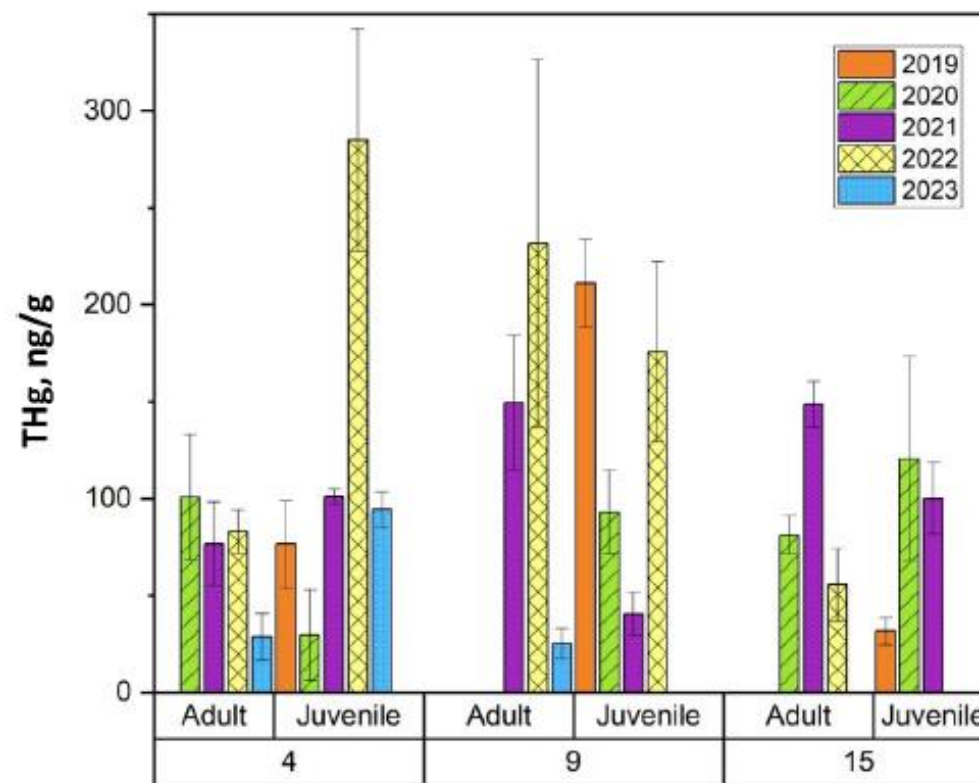
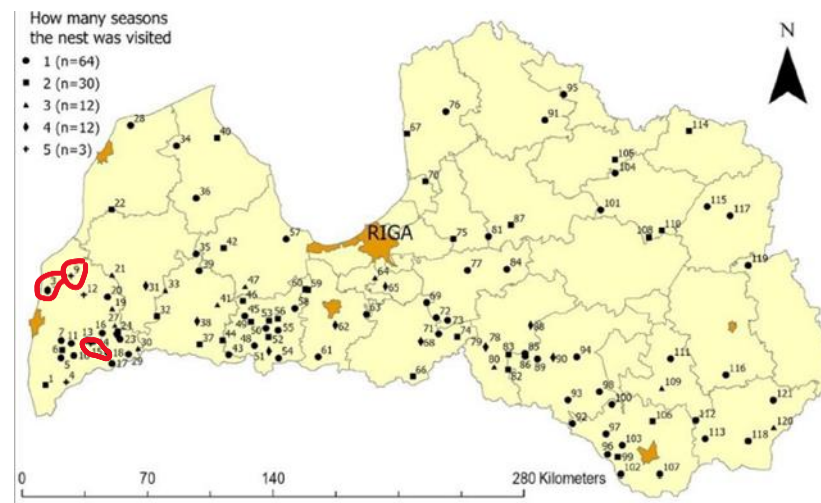
The characterisation of mercury pollution in the faeces of Baltic region breeding black storks

Antonija Rimsa^{a,b,*}, Anda Abola^a, Rita Veilande^a, Zanda Brike^a, Gita Revalde^a, Atis Skudra^a, Maris Strazds^b

^a Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Str 3, Riga, , LV-1004, Latvia

^b Institute of Biology, University of Latvia, Jelgavas Str 1, Riga, , LV-1004, Latvia

- Raksts balstījās uz sūdu un ēdienu paraugu mērījumiem.
- Melno stārķu sūdu paraugi ievākti 6 gadu periodā (2018-2023) no 121 ligzdas Latvijas teritorijā, atdalot jaunuļu un pieaugušo putnu sūdu paraugus.
- Hg koncentrācija tumšu sūdu paraugos ir statistiski nozīmīgi augstāka kā gaišajos sūdos.
- Kā sagaidāms zivīs ir augstāka Hg koncentrācija kā abiniekos.
- Hg koncentrācijas korelācija starp atņemto zivs paraugiem un atbilstošiem jauno putnu sūdiem no konkrētās ligzdas ir vāja un statistiski nenoizīmīga.
- Vispārīga tendence (attēlotas vidējās koncentrācijas) ir ka Latvijas DA daļā ir zemāka Hg koncentrācija salīdzinot ar centrālo daļu.
- Bija 3 ligzdas, kurās vairākus gadus pēc kārtas bija mērīti gan pieaugušu, gan jauno putnu sūdu paraugi.

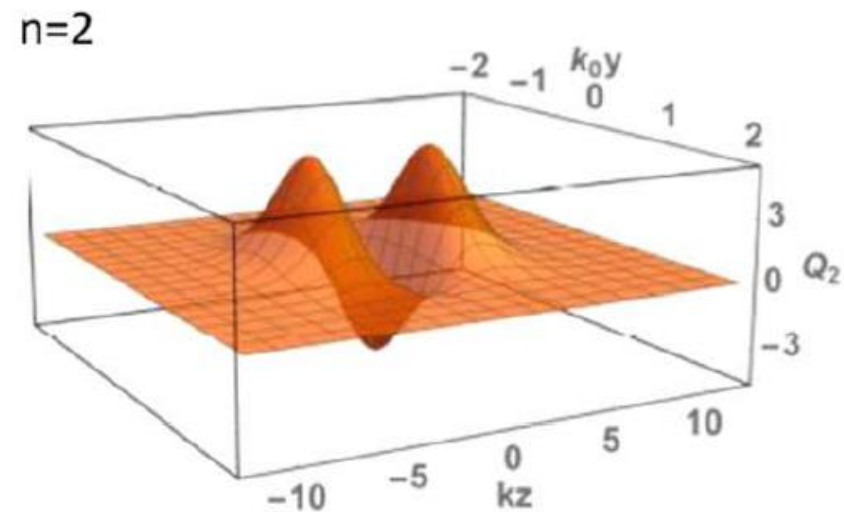
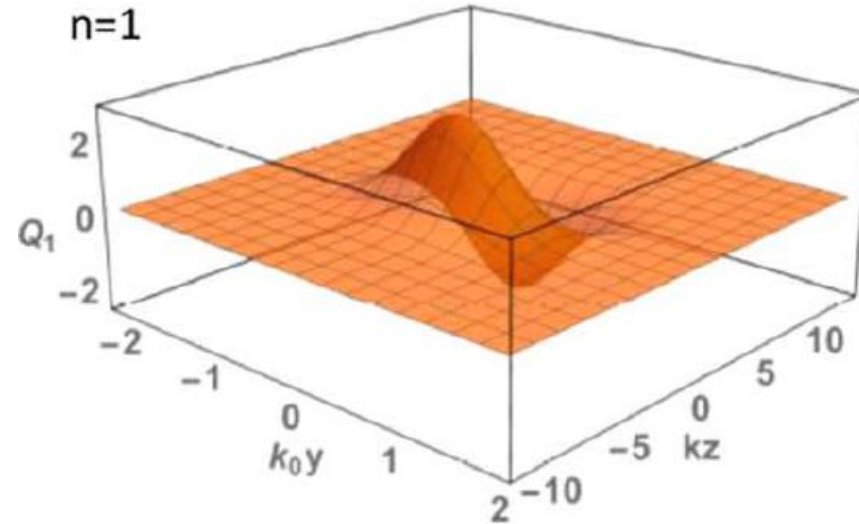
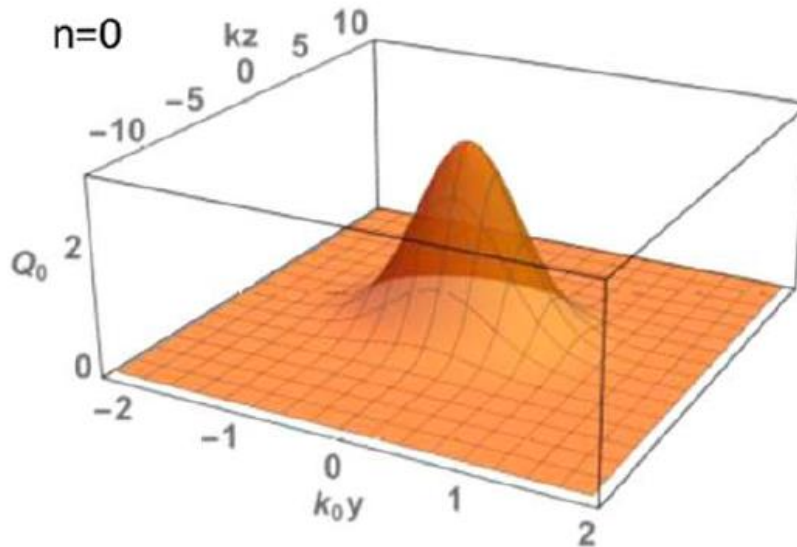


- Normētas īpašfunkcijas

Fotona kvantu modelis

$$A_{kn} = kN H_n(s\eta_k) e^{\frac{1}{2}[-s^2\eta_k^2 - k_0^2(x_0 - \mu_x x)^2 - k_0^2(y_0 - \mu_y y)^2]}$$

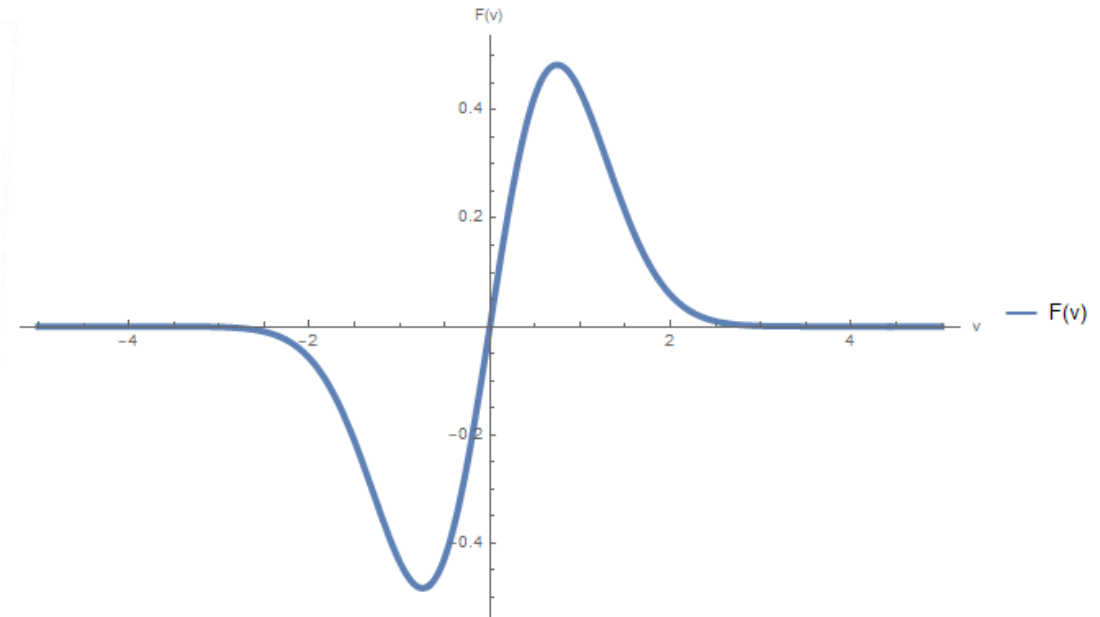
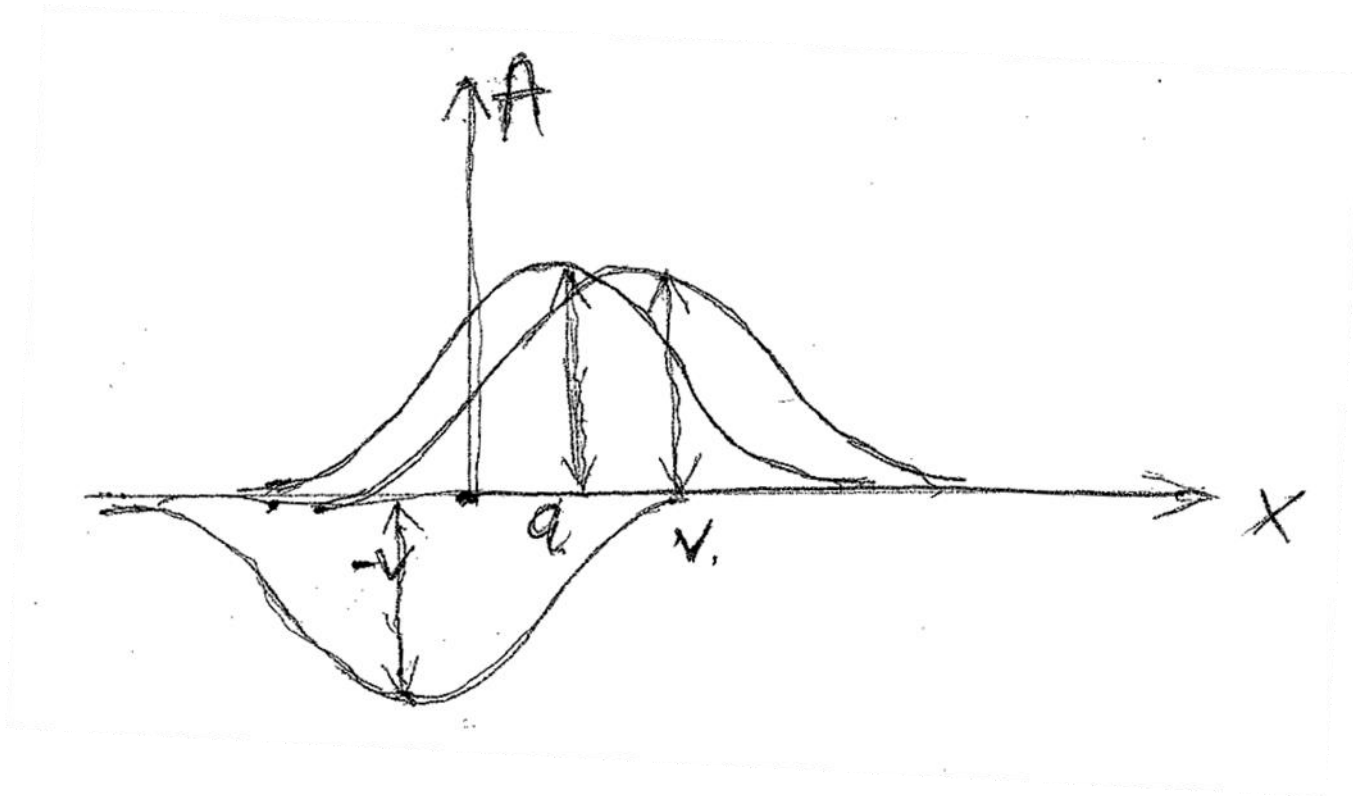
$$\eta_k = \omega t - k(z - z_0), \quad k_0 = \frac{\omega}{c}$$



Fotona krišana uz pusplakni mūsu 3D fotona kvantu modeļa gadījumā

$$\int_0^{\infty} dv F(v) e^{-\frac{(v-\mu x)^2}{2}} = -e^{-\frac{(a-\mu_0 x)^2}{2}}, x > 0$$

$$\int_{-\infty}^0 dv F(v) e^{-\frac{(v-\mu x)^2}{2}} = e^{-\frac{(a-\mu_0 x)^2}{2}}, x < 0$$

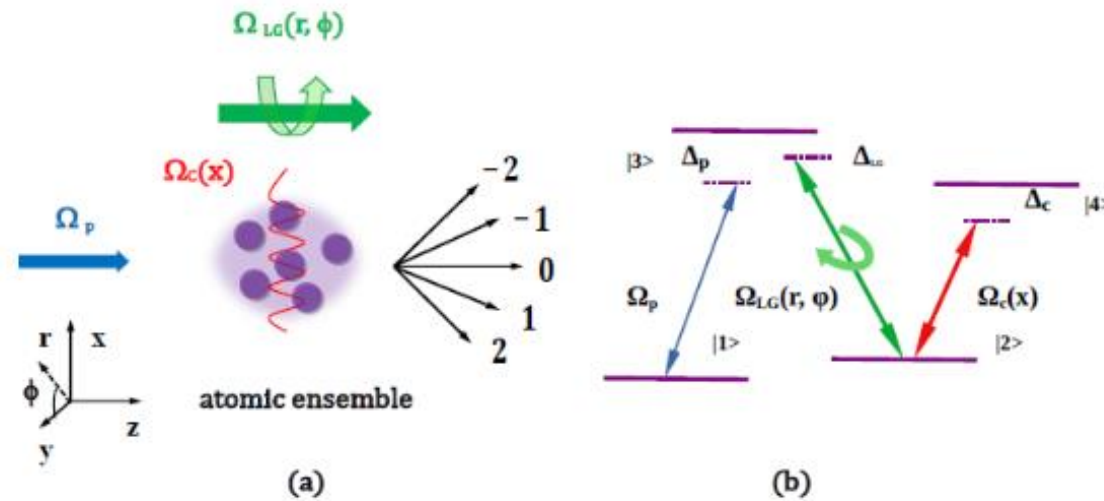




Project 1: Spatial characterization of Fraunhofer diffraction in a four-level light-matter-coupling system



This work was supported by the **trilateral Grant No. LV-LT-TW/2024/11 "Coherent Optical Control of Atomic Systems"** by the Ministry of Education and Science of the Republic of Latvia, the Research Council of Lithuania, and the National Science Council of Taiwan (project leader Prof. Marcis Auzinsh)



(a) Excitation scheme of atomic ensemble in Electromagnetically Induced Grating

(b) Four-level N-type excitation scheme, interacting with three lasers:

- a weak probe field with Rabi frequency Ω_p ,
- a strong standing wave field with Rabi frequency $\Omega_c(x)$,
- a Laguerre-Gaussian beam with Rabi Frequency $\Omega_{LG}(r, \phi)$.

● This work is published in:

S. H. Asadpour, T. Kirova, H. R. Hamed, and R. Asgari, [Phys. Rev. A 109, 023702 \(2024\)](#)



Project 1: Spatial characterization of Fraunhofer diffraction in a four-level light-matter-coupling system

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_{int}, \rho] + \mathcal{L} \rho,$$

-density matrix equations of motion, last term describes the effects of different decay mechanisms

$$\chi = \gamma_{31} \rho_{12}$$

-optical susceptibility of the medium

$$T(x, y) = e^{-Im(\chi)L} e^{iRe(\chi)L},$$

-transmission function for interaction length L, first/second term corresponds to amplitude/phase modulation

$$E(\theta_x, \theta_y) = \int_0^1 T(x, y) \exp(-i2\pi x \sin \theta_x) \exp(-i2\pi y \sin \theta_y) dx dy$$

-Fraunhofer diffraction of single space period

-Fraunhofer (far field) diffraction

$\Theta_{x,y}$ -diffraction angles

$$I_p(\theta_x, \theta_y) = |E(\theta_x, \theta_y)|^2 \frac{\sin^2(M\pi R_x \sin \theta_x)}{M^2 \sin^2(\pi R_x \sin \theta_x)} \frac{\sin^2(N\pi R_y \sin \theta_y)}{N^2 \sin^2(\pi R_y \sin \theta_y)}$$

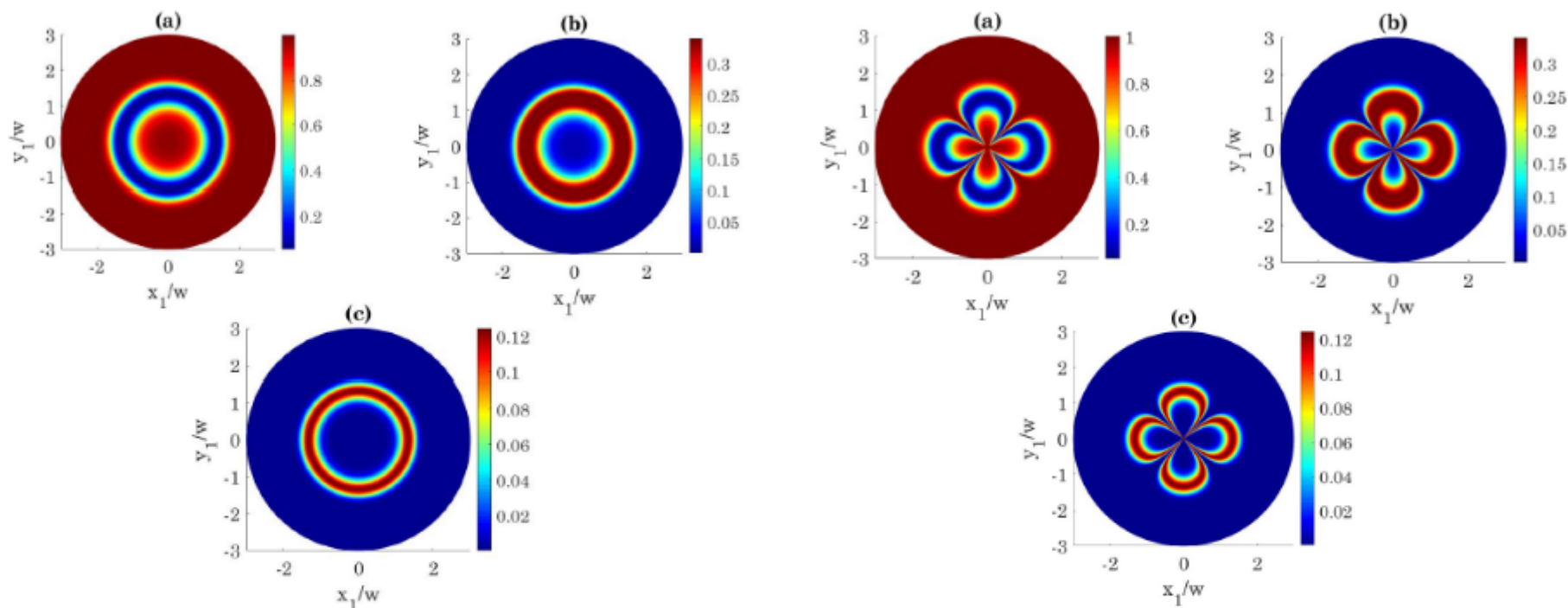
$\sin \Theta_x = m/\lambda$; $\sin \Theta_y = n/\lambda$ -diffraction orders

$R_{x,y} = \Lambda_{x,y}/\lambda$

M, N-number of spatial periods in the grating



Project 1: Spatial characterization of Fraunhofer diffraction in a four-level light-matter-coupling system



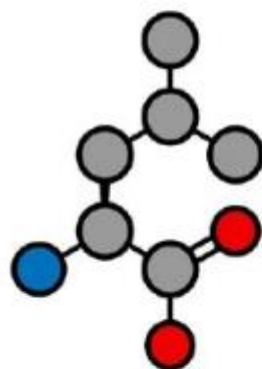
Spatial dependency of the different diffraction orders for winding number $l = 0$ (left) and $l=2$ (right). (a) corresponds to the zero-order, (b) corresponds to the first-order and (c) corresponds to the second-order.

The behavior of the different orders of Fraunhofer diffraction patterns upon varying the different OAM numbers shows the distribution of the probe field energy.

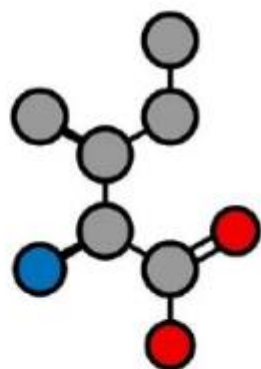
Taking advantage of the additional degree of freedom provided by the coupling composite optical vortex, we proposed a straightforward scheme for controlling the performance of the EIG



Project 2: Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field



L-leucine (Leu, L)



L-isoleucine (Ile, I)

Leu and Ile are two of the three branched chain amino acids essential for the human body, with a general role to ensure normal metabolism of muscles and energy production

Due to their identical elementary composition it is rather difficult to distinguish these two isomeric amino acids by mass

Numerical studies on Leu vs Ile with the inclusion of an electric dipole field and also added the magnetic field contributions are performed using GAUSSIAN09 package.

The study included geometry optimization of the structures of the amino acids using the original basis cc-pVTZ.

We used a modified basis set where the correction coefficients are added to the s- and p-orbitals as in our previous works following the AGTO scheme.

● This work is published in:

J. Tamuliene and T. Kirova,
J. Molec. Modeling 30, 11, (2024)



COST Action CA18212

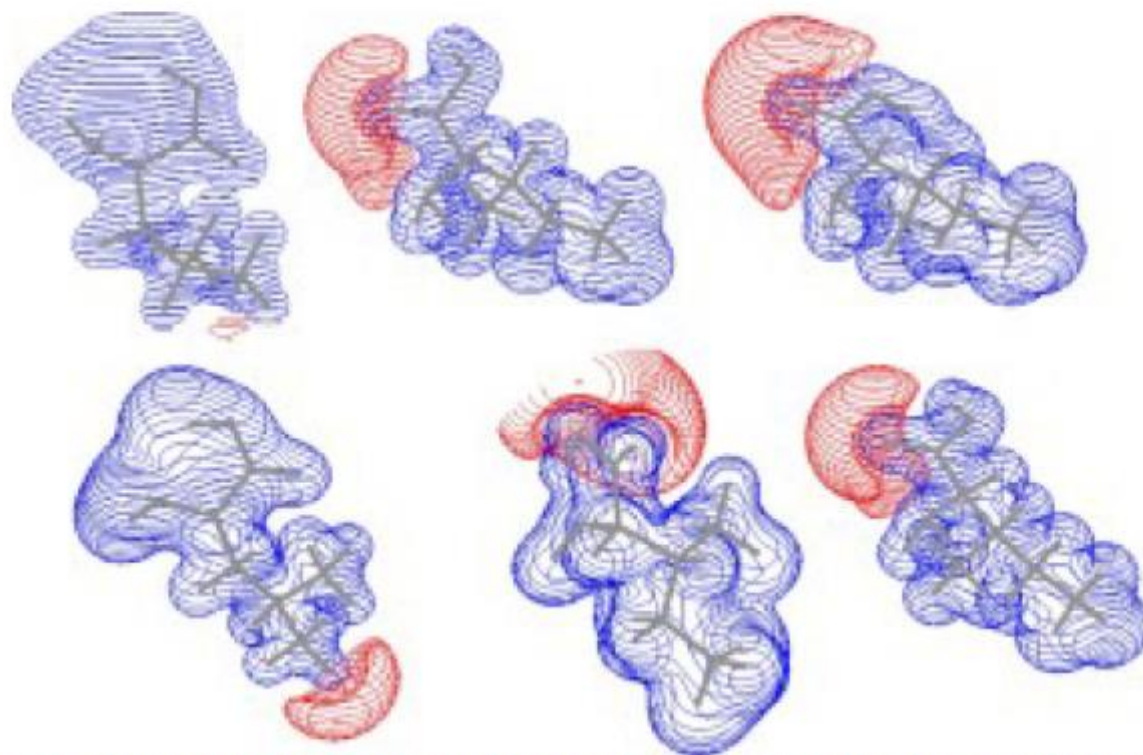
MD-GAS

Molecular Dynamics
in the GAS phase

COST Acton CA18212 – Molecular Dynamics
in the GAS phase (MD-GAS), supported by COST
(European Cooperation in Science and Technology)



Project 2: Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by EM field



-View of the electric potential of Leu (on the left), ILeu1 (in the centre) and Ile2 (on the right) obtained with the inclusion of the electric dipole field (a) and along with the corresponding magnetic field (b).

-The field strength is equal to $E = 0.40 \text{ a.u.}$ The contour value is 0.10. Red colour denotes electric potential of -0.1 V , while blue corresponds to -0.05 V .



Project 2: Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by EM field

The chemical structure of the fragments that could be formed due to the decomposition of Leu and Ile in the dipole electric and electromagnetic fields

Field	Strength, a.u.	Leu	Ile1	Ile2
Electric dipole	0.47	CO_2H, H $C_5H_{11}N$	$C_6H_{13}NO_2$	$C_6H_{13}NO_2$
	0.50	CO_2, C_2H_5N $C_3H_6, 2H$	CH_3, C_3H_6 $C_2H_4NO_2$	$C_6H_{13}NO_2$
	0.51			CO_2, C_3H_7N $C_2H_2, 4H$
Electromagnetic field	0.47	$C_6H_{13}NO_2$	$C_6H_{13}NO_2$	$C_6H_{13}NO_2$
	0.50	CO_2, C_3H_6 $2H, C_2H_5N$	CO_2, C_3H_8N H, C_2H_4	CO_2, C_2H_4 $2H, C_3H_7N$

Our comparative studies show that using an electric dipole field or electromagnetic field we may distinguish leucine from isoleucine because of the different fragment formation.

For example, for field strength 0.5a.u. in the case of leucine the fragmentation is field-independent, giving CO_2 , C_2H_5N , C_3H_6 , $2H$, while isoleucine decomposes into CH_3 , C_3H_6 , $C_2H_4NO_2$ in the electric dipole field, and into CO_2 , C_3H_8N , C_2H_4 , H in the electromagnetic field.

Moreover, the above fields could be used for the recognition of the isoleucine conformers, since decomposition of one of the conformers happens at field strength 0.5a.u., while the second one is not decomposed at this value.

The latter suggests the relevance of our numerical calculations, which account for corrections to the molecular orbitals due to the magnetic field, since they could be proposed as a **possible tool for isomer and conformer discrimination**.

Atomu, molekulu un optisko procesu kvantu dinamiskā kontrole (Q-DYNAMO)

- Projekta līguma numurs: 101131418
- <https://cordis.europa.eu/project/id/101131418>
- Projekta partneri:
 - **Latvijas Universitāte (koordinators)**
 - Pisas Universitāte, Itālija - Università di Pisa
 - Ulmas Universitāte, Vācija - Universität Ulm
 - Parmas Universitāte, Itālija - Università Degli Studi di Parma
 - Otago Universitāte, Jaunzēlande - University of Otago
 - Temple Universitāte, ASV - Temple University
 - Mičiganas Universitāte, ASV - University of Michigan
 - Kolorado Universitāte, ASV - University of Colorado
 - Elektrokomunikāciju Universitāte, Japāna - University of Electro-Communications
 - Tokijas Zinātnes universitāte, Japāna - Tokyo University of Science
 - Masačūsetsas Bostonas Universitāte, ASV – University of Massachusetts Boston
 - Oklendas Universitāte, Jaunzēlande – University of Auckland
- Projekta īstenošanas termiņš: 01.01.2024.-31.12.2027.
- Projekta kopējais finansējums: 404 800 EUR (t.sk. LU daļa – 151 800 EUR)
- Projekta zinātniskā vadītāja: **Teodora Velcheva Kirova**
- Projekta administratīvā vadītāja: **Dina Bērziņa**

Atomu, molekulu un optisko procesu kvantu dinamiskā kontrole (Q-DYNAMO)

Vairāk par projektu - www.q-dynamo.eu

Projekta mērķi:

- veikt vismodernākos eksperimentālos un teorētiskos pētījumus kvantu optikas kontroles jomā, izstrādājot jaunus kvantu kontroles protokolus pilnajam optiskajam spina-slēdzim, molekulārajai orientācijai, kā arī ar spiniem sapītajiem aukstajiem atomiem ultra-aukstu ķīmisko reakciju produktu kontrolei, Ridberga-jonu molekulām, manipulējot ar ārējiem laukiem (lāzeriem, radiofrekvenču un mikroviļņu laukiem un kvantu starotājiem), kas savienoti ar optiskām nanošķiedrām un dobumiem;
- nodrošināt jaunajiem zinātniekiem (Early Stage Researchers - ESRs) augstas kvalitātes apmācību teorētiskās/eksperimentālās kvantu optikas un kvantu kontroles jomā, nododot zināšanas no nozares ekspertiem jaunajiem dalībniekiem; īpašs uzsvars tiks likts uz papildu prasmju apgūšanu: pētnieciskās darbības plānošana, zinātnisko rezultātu prezentēšana, konferenču tēžu un manuskriptu sagatavošana publicēšanai;
- stiprināt eksistējošās un veidot jaunas starptautiskās sadarbības, izmantojot apmaiņas vizīšu (Staff Exchange - SE) piedāvātās iespējas, tādējādi veicinot tīklošanos starp visiem partneriem un daloties zināšanās starp partneriem ar atšķirīgu pieredzi;
- izplatīt pētījumu rezultātus zinātniekiem un informēt plašāku sabiedrību, kā arī koordinēt turpmākos iespējamus tehniskos pielietojumus ražošanā.

Projekta aktivitātes (1):

- **WP 1 – Kvantu kontrole izmantojot Autler-Tauna efektu** – Mērķis ir izstrādāt teorētiskus un eksperimentālus platformas modeļus kvantu kontrolei molekulās, kā arī Ridberga atomos, pamatojoties uz Autlera-Tauna efektu, izmantojot ārējos radiofrekvences, mikroviļņu vai lāzera laukus. (Vadītājs: Pizas universitāte)
- **WP 2 – Aukstu atomu un molekulu koherentā kontrole** – mērķis ir panākt saskaņotu aukstu atomu un molekulu kontroli, tostarp atomu sapīšanās, manipulācijas ar kvantu stāvokļiem, ultraaukstu ķīmisko reakciju produktu sadalījumu, t.i., samazināt vai palielināt apdzīvotību noteiktos kvantu stāvokļos, kā arī izstrādāt kvantu stāvokļus no liela attāluma atomu jonu Ridberga molekulām. Lai kontrolētu reakcijas, reaģenti tiks pakļauti statistiskiem un dinamiskiem magnētiskiem laukiem vai optiskiem gaismas laukiem. (Vadītājs: Ulmas universitāte)
- **WP 3 – Kvantu emiteru eksperimentālā realizācija un kontrole** – Mērķis ir izstrādāt eksperimentālu platformu, lai noslāzdotu atsevišķu atomu rindu, izmantojot optiskās pincetes, un savienotu atomu rindu ar optiskām nanošķiedrām (ONF). Turklāt tiks pētīta izkārtoto atomu kolektīvā dinamika, ko veicina asimetriska gaismas un vielas mijiedarbība. Platforma tiks ieviesta, lai kontrolētu šķiedru vadītu atsevišķu fotonu ģenerēšanu un izplatīšanos. Paralēli tiks realizēta hibrīda shēma, kurā polarizējamie emiteri (piemēram, atomi) lielā skaitā ir savienoti ar dobuma rezanatoru, kas nodrošina asimetrisku savienojumu, izmantojot gaismas spin-orbītas savienojumu. (Vadītājs: Parmas universitāte)

Projekta aktivitātes (2):

- **WP 4 – Apmācību aktivitātes** – Mērķis ir nodrošināt pētnieku apmācības par mūsdienīgām teorētiskām un eksperimentālām pieejām kvantu optikas un kvantu kontroles jomā, kas tiek izmantotas WP 1-3. No vienas puses, apmācības tiks nodrošinātas mobilitātes komandējumos. No otras puses, tiks organizēti semināri vasaras skolas formātā ar mērķi nodot jaunajiem dalībniekiem specifiskas eksperimentālas un teorētiskas zināšanas no jomas ekspertiem. (Vadītājs: Latvijas Universitāte)
- **WP 5 – Vadības, komunikācijas un izplatīšanas pasākumi** – Mērķi ir, pirmkārt, nodrošināt efektīvu projekta īstenošanu zinātniskā un administratīvā līmenī. Pasākumi ietver pārliecību, ka mobilitātes komandējumi tiek izpildīti; savlaicīga visas projekta dokumentācijas un atskaišu sagatavošana; saziņa ar Eiropas Komisiju (REA) un konsorcijs ietvaros. Otrkārt, nodrošināt projekta īstenošanas laikā iegūto rezultātu efektīvu komunikāciju, izplatīšanu un izmantošanu zinātniskā, kā arī plašākas sabiedrības līmenī. (Vadītājs: Latvijas Universitāte)

Mobilitātes 2024.g., kopā ap 10,6 mēneši (kopā plānotas 88+30, LV: 33)

University of Latvia → University of Parma + University of Pisa +
University of Ulm 05.03.2024 - 04.04.2024 →

Ulm University → University of Parma + University of Pisa →
19.03.2024-24.03.2024

University of Latvia → Tokyo University of Science 01.04.2024 -
30.04.2024 →

Ulm University → University of Colorado 02.08.2024-13.09.2024 →

University of Latvia → Temple University 01.09.2024-31.10.2024 →

Ulm University → Tokyo University of Science 14.09.2024 -
22.09.2024 →

University of Parma → Tokyo University of Science 01.10.2024-
22.12.2024 →

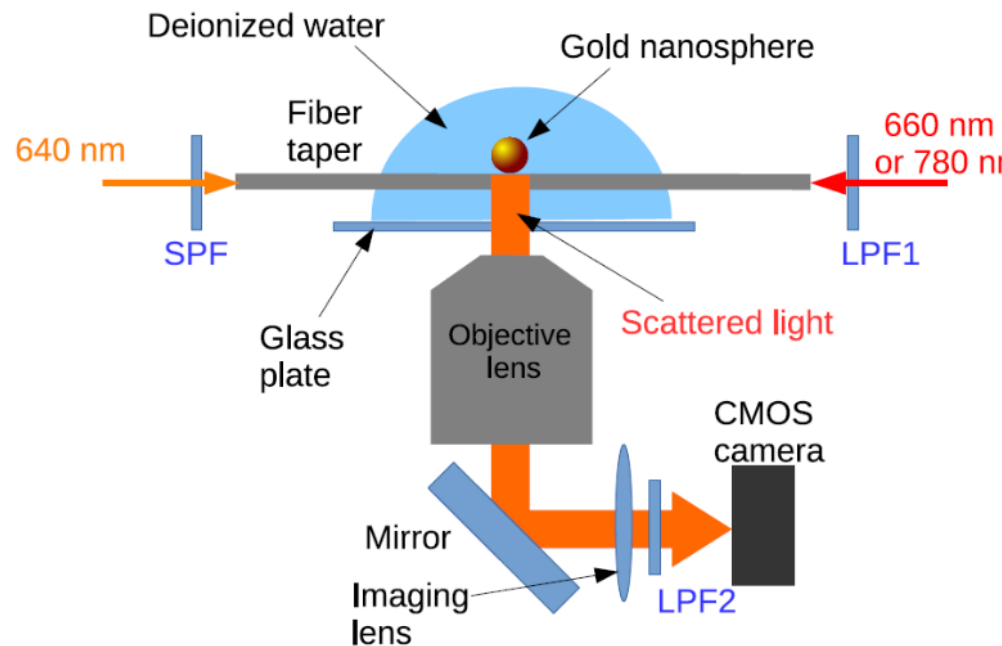
University of Latvia → Tokyo University of Science 15.11.2024 -
14.12.2024 →

Tokijas Zinātnes universitāte



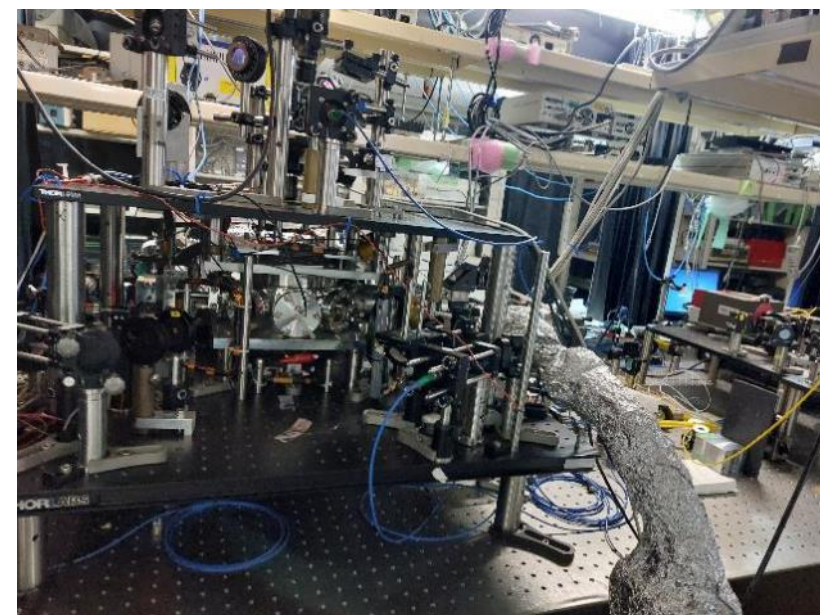
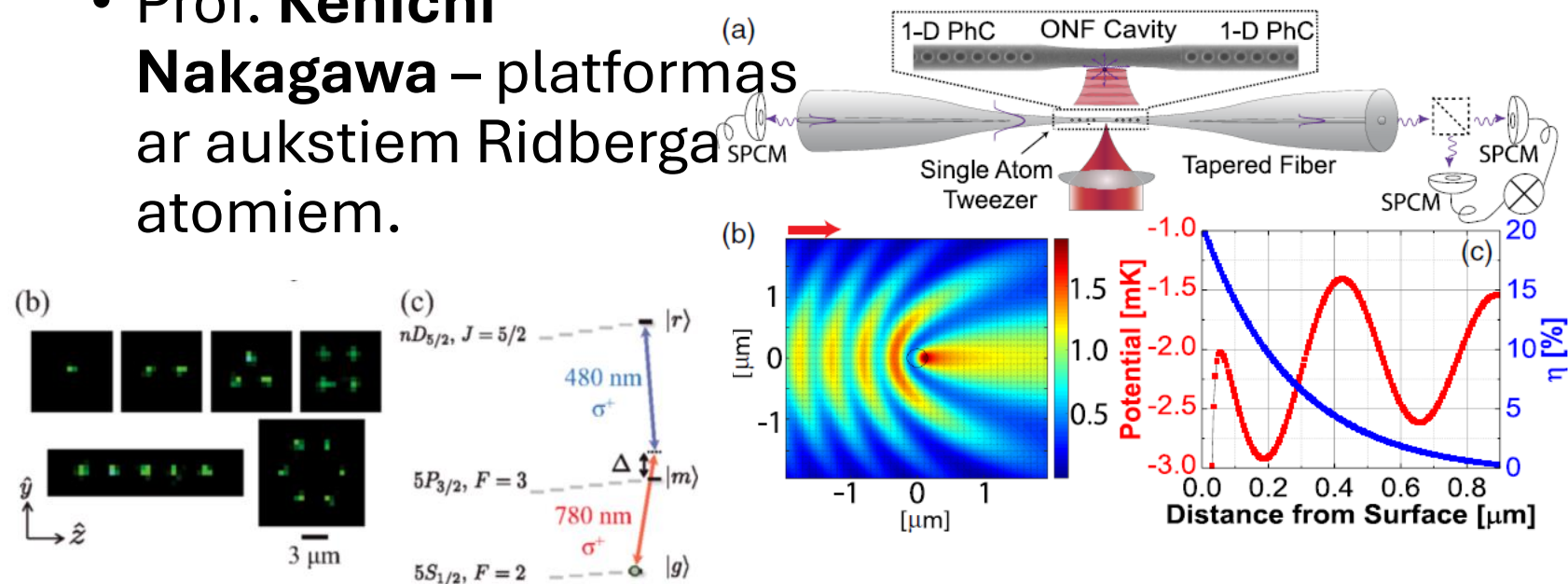
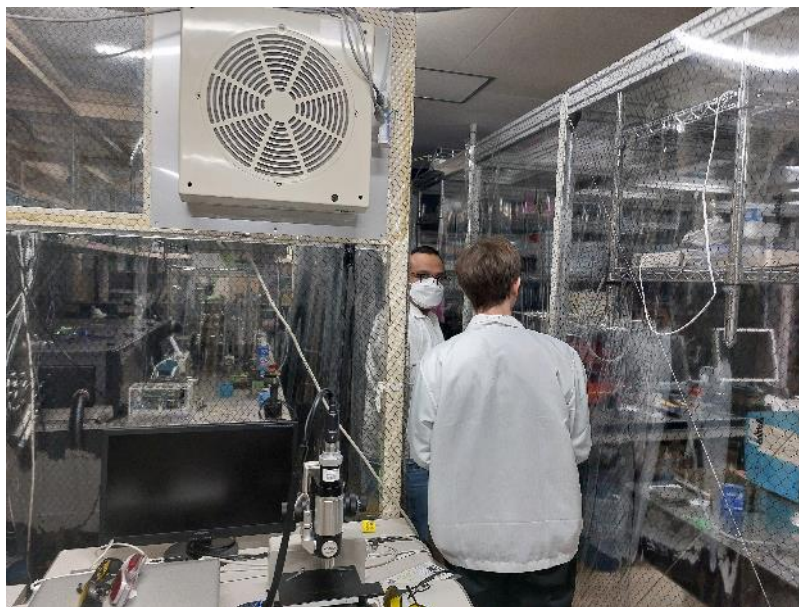
Tokijas Zinātnes universitāte

- Prof. **Mark Sadgrove** Nano transporta laboratorija - pēta un kontrolē nanomēroga objektu kustību nanošķiedrās, izmantojot gaismu, t.sk. nanodaļiņas, fotonus un atomus (Au, retzemju elementi).



Elektrokomunikāciju universitāte

- Prof. **Kali Prasanna Nayak** lab - viena atoma kvantu saskarnes izstrāde uz optiskās šķiedras.
- Prof. **Kenichi Nakagawa** – platformas ar aukstiem Ridberga atomiem.



Q-Dynamo, Tokijas Zinātnes universitātē

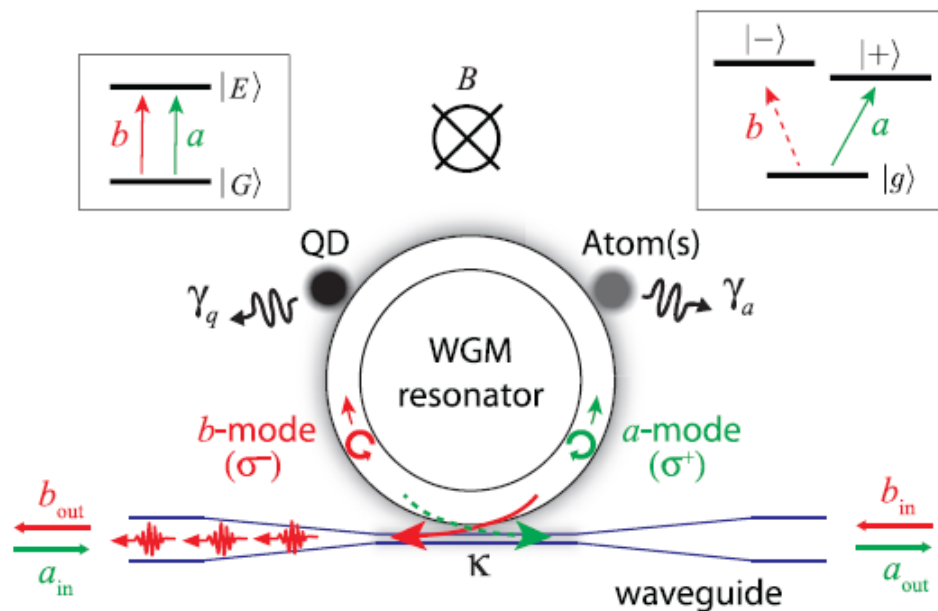
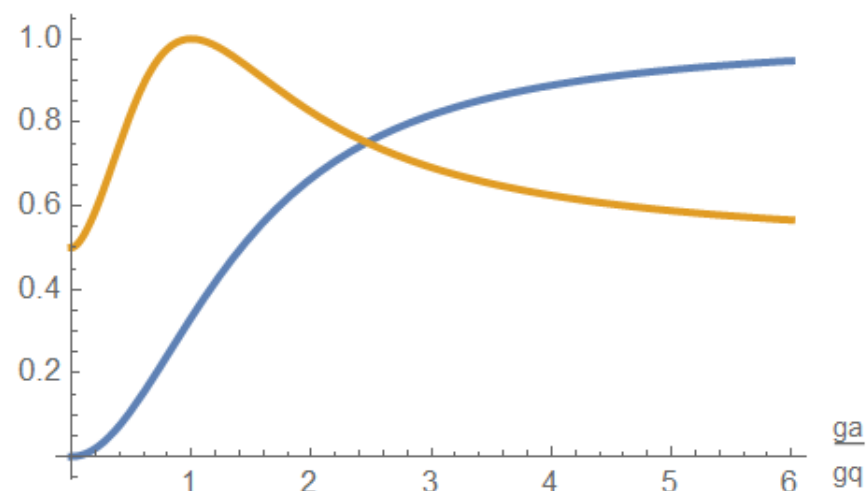


FIG. 1. Illustration of the system under consideration. A two-level quantum dot (QD) and a V-type three-level atom (or atoms) are coupled to the same whispering-gallery-mode (WGM) resonator. We label the counterclockwise circulating mode (polarization σ^+) of the resonator a and the clockwise circulating mode (polarization σ^-) b . The depicted decay channels are atomic spontaneous emission at rate γ_a , quantum dot spontaneous emission at rate γ_q , and decay from each cavity mode at rate κ into a waveguide (which could, e.g., be a tapered optical fiber). A magnetic field B may also be applied as shown.

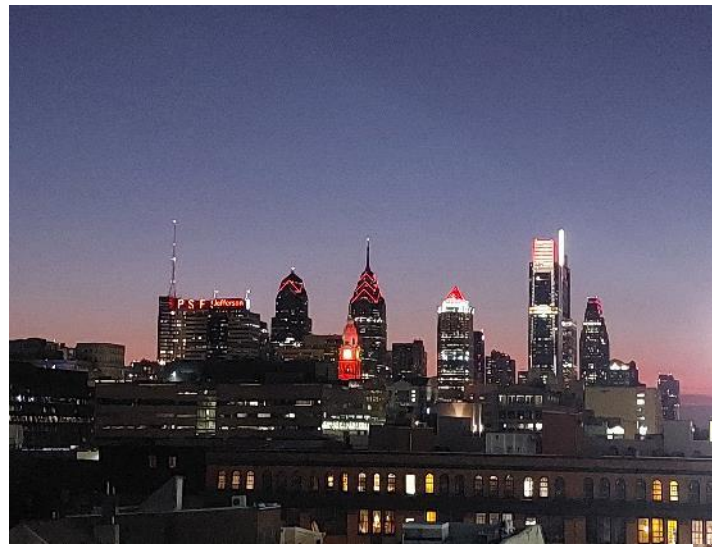
$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}}{dt} = & -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \kappa(\mathcal{D}[\hat{a}] + \mathcal{D}[\hat{b}])\hat{\rho}(t) \\ & \times \frac{\gamma_q}{2}\mathcal{D}[\hat{\sigma}_{q-}]\hat{\rho}(t) + \frac{\gamma_a}{2}(\mathcal{D}[\hat{\sigma}_{a-}] + \mathcal{D}[\hat{\sigma}_{b-}])\hat{\rho}(t) \\ \mathcal{D}[\hat{O}]\bullet \equiv & 2\hat{O}\bullet\hat{O}^\dagger - \hat{O}^\dagger\hat{O}\bullet - \bullet\hat{O}^\dagger\hat{O}, \end{aligned}$$

directionality (blue) and Entanglement (orange)



[Lucas Ostrowski, Scott Parkins, Morito Shirane, and **Mark Sadgrove** «Interference-induced directional emission from an unpolarized two-level emitter into a circulating cavity», Phys Rev A 105, 063719 (2022)]

Temples Universităte, ASV



Temples Universitāte

- **Prof. A.Marjattas Lyyra grupa** - Atomu, molekulārā un optiskā fizika — uzsvars uz molekulāro kvantu kontroli.
- Mūsu vizītes laikā eksperimenti tika veikti augsti ierosinātiem elektroniskajiem stāvokļiem Rb_2 un Cs_2 molekulām.



The background of the image is a dark blue, textured surface that resembles wood grain or a similar natural material. The texture is composed of numerous fine, vertical lines and small, dark spots, creating a rich, organic appearance. The lighting is slightly uneven, with some areas appearing darker than others, which emphasizes the texture.

Paldies par uzmanību!