

**Fizikos fakulteto
Cheminės fizikos instituto**

2020 M. VYKDOMŲ MOKSLO TIRIAMŲJŲ DARBŲ SĄRAŠAS

Eil. Nr. Mokslo sritis (kryptis) * MTEP programa/VU mokslo sritis ** Darbo pobūdis *** Ūkio ekonominė-socialinė sfera****	Mokslo tiriamojo darbo pavadinimas. Darbo tikslas	Darbo pradžia, pabaiga	Padaliniai, temos vadovai ir vykdytojai (moksl.vardas ir laipsnis, v., pavardė, pagrindinės pareigos)	Mokslo tiriamojo darbo užduotys 2020 metams
<p style="text-align: center;">Nr. 1</p> <p style="text-align: center;">Fiziniai mokslai (Fizika) 35/9 –F-12</p>	<p style="text-align: center;">Pavadinimas: FUNKCINIŲ HIBRIDINIŲ IR STRUKTŪRIZUOTŲ MEDŽIAGŲ BEI DANGŲ FOTONIKAI IR ATRANKIEMS JUTIKLIAMS SPEKTROMETRIJA</p> <p style="text-align: center;">Tikslas: Panaudojant įvairius spektrinius metodus gauti išsamią informaciją apie molekulinių darinių struktūrinius parametrus, kuri reikalinga praktiniam jų taikymui fotonikoje ir jutiklių technologijose</p>	<p style="text-align: center;">2020- 2024</p>	<p>„Molekulių spektroskopijos“ mokslinė grupė Vadovas: dr. (HP) V. Šablinskas, prof.</p> <p>Vykdytojai: habil dr. V. Balevičius, 0,5 prof., 0,5 vyriausiasis mokslo darbuotojas, habil. dr. G. Niaura, prof., habil. dr. V. Gulbinas, prof., dr. V.Aleksa, doc. dr. A.Gruodis, 0,25 doc., 0,25 vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. J. Čeponkus, doc., dr. V. Urbanienė, doc., dr. K. Aidas, 0,75 vyresnysis mokslo darbuotojas, 0,25 lektorius, dr. A.Maršalka, doc., dr. F.Kuliešius, doc., M. Velička, lektorius, R. Platakytė, lektorė, D. Lengvinaitė, lektorė, R. Bandzevičiūtė, lektorė S. Adomavičiūtė, lektorė</p>	<ol style="list-style-type: none"> Ištirti naujos kartos medžiagų ir jų kompozitų, naudojamų kuriant optoelektroninės įrangos sandus, struktūrinius ir dinaminis vyksmus, kuriems būdingi labai platūs struktūrinio daugiafaziškumo ir tinkamos mastai. Tam numatoma panaudoti kietojo kūno BMR - MAS („magiškojo kampo sukimo“), 2D hetero-branduolinių koreliacijų ir daugiakvantinės koherencijos metodus. Taikant ^1H, ^{13}C ir ^{17}O BMR spektroskopiją ištirti protonų permašos dinamiką polimeriniuose, amorfiniuose ir nano- struktūrizuotose žemos dimensijos H-ryšio protonų laidininkuose. Pritaikyti žemos temperatūros ($T < 3\text{K}$) matricinės izoliacijos metodą salicilo pagrindo biologiškai aktyvių molekulių struktūros ir sąveikos su vandeniu tyrimui Ramano sklaidos ir infraraudonosios sugerties spektroskopijos metodais . Plėsti FTIR ATR šviesolaidinio zondo pritaikomumą skirtingų organų navikinių darinių indentifikavimui. Vystyti šviesolaidinę spektrinę sistemą <i>in situ</i> ir <i>in vivo</i> tyrimams.

				<p>5. Nustatyti Infraraudonosios sugerties ATR metodikos taikymo grybelinių darinių aptikimui ant žmogaus odos galimybes.</p> <p>6. Ištirti SERS metodo pritaikomumo skystos biopsijos diagnostikoje galimybes.</p> <p>7. Išplėsti SERS metodo pritaikymo galimybes nereceptinių vaistų aptikimui biologiniuose skysčiuose.</p> <p>8. Vystyti atominių jonų kvadrupolinės BMR relaksacijos parametrų modeliavimo, taikant klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijas bei hibridinius QM/MM metodus, algoritmus, taikyti juos joninių skysčių molekulinės struktūros ir dinamikos tyrimuose.</p> <p>9. Charakterizuoti biomolekulių struktūrą ir nustatyti spektrinius struktūros žymenis žemadažnės Ramano spektroskopijos metodu.</p>
<p>Nr. 2</p> <p>Fiziniai mokslai (Fizika) 35/9 –F-2</p>	<p>Pavadinimas: MOLEKULINIŲ IR KRISTALINIŲ MEDŽIAGŲ ELEKTRONINIŲ SPEKTRŲ SKAIČIAVIMO METODŲ VYSTYMAS</p> <p>Tikslai: Kvantinės ir klasikinės mechanikos, kvantinės ir klasikinės elektrodinamikos, statistinės fizikos metodų plėtra sandarai bei vyksmams</p>	<p>2019 - 2023</p>	<p>Molekulių teorijos ir modeliavimo grupė</p> <p>Vadovas: Dr. D. Abramavičius, prof.</p> <p>Vykdytojai: dr. J. Šulskus, prof., dr. O. Rancova, doc., dr. M. Mačernis, doc., dr. S. Toliautas, asistentas, dr. J. Chmeliov, doc., dr. A. Gelžinis, doc., dr. V. Butkus, lektorius dr. K. Glemža, doc., dr. J. Bučinskas, doc.</p>	<p>1. Aprašyti koherentinės spektroskopijos prie didelių žadinimo intensyvumų eksperimentinius rezultatus, leidžiančius nustatyti įvairių sparčiųjų vyksmų prigimtį.</p> <p>2. Vystyti molekulių agregatų vibroninius ir variacinius modelius, įskaitant virpesių anharmoniškumą, netiesinę modų sąveiką. Aprašyti molekulių vidinės konversijos procesus.</p> <p>3. Vystyti kvantinės relaksacijos teoriją įtraukiant nemarkovinius reiškinius laipsniškai nykstančioms fliuktuacinėms koreliacinėms funkcijoms.</p>

	<p>atomoose, molekulese, nanodalelese ir jų kompleksuose modeliuoti. Medžiagų sąveikos su elektromagnetiniu lauku nuo GHz iki UV ir netiesinės spektroskopijos teorinių aprašymo pagrindų vystymas.</p>			<p>4.Vystyti kvantinės chemijos teorinius metodus skaičiuoti karotinoidų, bakteriorodpsino, aktyvaus centro elektronines būsenas, kolageno baltyme, tirti DNR kirpimą BCNI baltyme.</p> <p>5. Vystyti elektromagnetinės bangos sklaidos dielektrinių rutulių baigtiniu rinkiniu kraštinio uždavinio sprendinio radimo programinį kodą.</p> <p>6.Nagrinėti fotosintetinių tilakoidinių membranų bei anteninių pigmentus turinčių baltyminių kompleksų fluorescencijos spektrų laikines priklausomybes plačiame temperatūrų diapazone. Šie tyrimai yra sietini su taip vadinamo nefotocheminio gesinimo mechanizmo modelio kūrimu.</p> <p>7.Vystyti teorinius modelius, leidžiančius analizuoti galimus atskirtų krūvių būsenų efektus molekulinuose dariniuose.</p>
<p>Nr. 3</p> <p>Fiziniai mokslai (Fizika) 34/9 –T-6</p>	<p>Pavadinimas: NAUJOS FUNKCINĖS MEDŽIAGOS IR SANDAROS</p> <p>Tikslas: Naujų organinių, neorganinių ir hibridinių medžiagų sluoksnių bei darinių formavimo technologijos, jų elektrinių, fotoelektrinių ir krūvio pernašos savybių tyrimas</p>	<p>2018 – 2021</p>	<p>Vadovas: Dr. Kęstutis Arlauskas, prof.</p> <p>Vykdytojai: dr. A.Poškus, docentas, dr.M.Viliūnas, docentas, dr. R.Rinkūnas, vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. K.Genevičius, vyriausiasis mokslo darbuotojas, dr. V. Jankauskas, 0,5 vyresnysis mokslo darbuotojas, 0,5 prof., dr. R.Maldžius, 0,5 vyresnysis mokslo darbuotojas, 0,5 docentas,</p>	<p>1. Krūvininkų pernašos įvairios sandaros organiniuose Saulės elementuose kompiuterinis modeliavimas.</p> <p>2. Krūvininkų rekombinacijos, elektrinių ir dielektrinių sąvybių tyrimai perovskitiniuose Saulės elementuose bei dvisluoksniuose hibridiniuose dariniuose.</p> <p>3. Neorganinių perovskitinių sandarų saulės celėms technologijos paieška.</p> <p>4. Sluoksnių morfologijos įtakos krūvininkų pernašai organiniuose lauko tranzistoriuose ir kituos prietaisuose eksperimentiniai tyrimai.</p>

		<p>dr. N.Nekrašas, docentas, dr. G.Sliaužys, 0,25 lektorius, habil.dr. G.Juška (emeritas), habil. Dr. T. Lozovski, inžinierius, dr. T. Grigaitis, mokslo darbuotojas, dr. E. Kamarauskas, mokslo darbuotojas, J. Nekrasovas, jaunesnysis mokslo darbuotojas, A. Aukštuolis, jaunesnysis mokslo darbuotojas</p>	<p>5. Purškimo metodo taikymo visiems perovskitinių saulės celių sluoksnių gamybos etapams išvystymas, siekiant išlaikyti/pasiekti didelius (~20%) efektyvumus.</p> <p>6. Organinių puslaidininkių, tinkamų perovskitiniams saulės elementams, krūvio pernašos tyrimai.</p> <p>7. Organinių puslaidininkinių junginių elektroninių lygmenų tyrimas, lėtųjų elektronų skaitikliu.</p> <p>8. Krūvininkų pernašos ir fotojonizacijos charakteristikų tyrimas naujose padidinto laidumo organinėse medžiagose, skirtose Saulės elementams.</p> <p>9. Įvairių struktūrų popierių tyrimas taikant aukštos įtampos išlydžio metodus.</p> <p>10. Sukurti stabdomosios spinduliuotės spektrų ir kampinių pasiskirstymų duomenų bazę visiems cheminiams elementams ir dideliame elektrono bei fotono energijų verčių skaičiui intervale nuo 10 eV iki 3 MeV (programos tinklalapis: http://web.vu.lt/ff/a.poskus/brems/)</p> <p>11. Tobulinti didelės energijos elektronų ir fotonų sąveikos su medžiaga modeliavimo Monte Karlo metodu kodą MCNelectron (atviras kodas, nuoroda: http://web.vu.lt/ff/a.poskus/mcnelectron/) ir toliau jį taikyti tiriant didelės energijos elektronų sąveiką su medžiaga.</p> <p>12. Silicio karbido ir silicio nitrido sluoksnių bei silicio karbido diodų formavimo galimybės, naudojant rentgeno spinduliuotę, tyrimas.</p>
--	--	---	---

				<p>13. Dirbtinio deimanto sluoksnių auginimas CVD technologija ir jų elektrinių savybių tyrimas.</p> <p>14. Organinė medžiaga-wolframo dalelės kompozitų sluoksnių formavimo technologijos vystymas jautrių rentgeno spinduliutei jutiklių kūrimui.</p>
<p>Nr. 4</p> <p>Fiziniai mokslai (Fizika) 34/9-T-3</p>	<p>Pavadinimas: MAŽŪJŲ PALYDOVŲ RAKETINIŲ MIKROVARIKLIŲ GAMYBA IR TYRIMAS</p> <p>Tikslas: Elektrinio šiluminio raketinio variklio šilumokaičio tyrimai</p>	<p>2018 – 2021</p>	<p>Vadovas: dr. Liudas Tumonis, vyresnysis mokslo darbuotojas</p> <p>Vykdytojai: dr. M. Viliūnas, docentas, Studentai</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Laboratorinio raketinio variklio sukūrimas (Europos kosmoso agentūros finansuojamo projekto rėmuose) ir tyrimai. 2. Bandymų įrangos mikrovariklio tyrimams tobulinimas.