

Fizikos fakulteto Cheminės fizikos instituto

2021 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 2021 metams
<p style="text-align: center;">Tema Nr. 1 <b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> 35/9 –F-12</p>	<p style="text-align: center;"><b>Pavadinimas:</b> NAUJOS KARTOS MEDŽIAGŲ INOVATYVIOSIOMS TECHNOLOGIJOMS IR MEDICINAI SPEKTROSKOPIJA</p> <p style="text-align: center;"><b>Tikslas:</b> Pasitelkus modernią spektrometrinę įrangą ir metodus charakterizuoti elektroninius, molekulinis bei struktūrinius procesus vykstančius naujos kartos neorganiniuose ir organiniuose junginiuose bei jų kompozituose, perspektyviuose cheminėms ir šviesos technologijoms bei medicinos inovacijoms.</p>	<p style="text-align: center;">2021-2025</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, 0,25 prof., habil. dr. V. Gulbinas, 0,25 prof., dr. V. Aleksa, doc. Dr. V. Klimavičius, 0,25 doc., dr. A. Gruodis, 0,5 vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. J. Čeponkus, doc., dr. V. Urbonienė, doc., dr. K. Aidas, 0,75 vyresnysis mokslo darbuotojas, 0,25 doc, dr. A. Maršalka, doc., dr. F. Kuliešius, doc., M. Velička, 0,5 lektorius, R. Platakytė, 0,5 lektorė, D. Lengvinaitė, 0,25 lektorė, R. Bandzevičiūtė, 0,5 lektorė S. Adomavičiūtė, 0,5 lektorė</p>	<p>1. Kietojo kūno BMR metodu ištirti struktūros ypatumus bei sukinių difuziją medžiagose, perspektyviuose kuriant dirbtinius implantus, ir bio-suderintines, aprėpiančias maksimaliai plačias vyksmų trukmės ir erdvės skales. Tam bus atlikti daugelio branduolių kietojo kūno BMR kryžminės polarizacijos CP MAS kinetikų matavimai; bus patobulinti teoriniai sukinių dinamikos modeliai išplečiant jų galimybes aprašant tolimas sukinių saveikas ir miltelinių bandinių tyrimuose.</p> <p>2. Kietojo kūno BMR metodu ištirti naujo tipo supramolekulinius agregatus. Taikant daugiabranduolinius BMR eksperimentinius metodus nustatyti jų formavimosi ypatumus. Pasitelkiant kryžminės poliarizacijos ir kitus eksperimentinius metodus, paremtus sukinių difuzijos procesu, nustatyti protonų dinamiką agregatuose pasižyminčiuose skyliniu laidumu. Taikant 1D, 2D ir kitus kietojo kūno daugiabranduolinius metodus charakterizuoti agregatus, pasižyminčius ertmėmis savo struktūroje, kuri tinkama kaip terpė vaistų pernašai, katalizei, sintezei.</p> <p>3. Taikant žemų temperatūrų (T&lt;4K) matricinės izoliacijos Infraraudonosios sugerties ir</p>

				<p>Ramano sklaidos spektrometrija tirti vandenilinio ryšio savybes biologiškai aktyviose molekulėse dažnai naudojamose nereceptinių vaistų gamyboje (salicilo rūgšties acetilsalicilo rūgšties, kofeino, acetaminofeno molekules). Nustatyti tokių molekulių stabiliausius izomerus egzistuojančius kambario temperatūroje, tirti vandens priemaišų įtaką galimų izomerų struktūrai, nustatyti galimas fotodinamines reakcijas, švitinant tokias molekules UV spinduliuote.</p> <p>4. Taikant naujai sukurtą infraraudonosios spektrinės srities šviesolaidinį visiškojo vidaus atspindžio zondą kurti metodikas navikinių audinių diagnostikai, panaudojant naujausius statistinės analizės metodus tokius kaip klasterių analizė; dalinė mažiausių kvadratų regresija ir kt.</p> <p>5. Pritaikyti virpesinės spektrometrijos metodus patogeninių grybelių aptikimui ir identifikavimui ant žmogaus odos. Tyrimų sistemos pagrindu panaudoti šviesolaidinį zondą ir naujausius statistinės analizės metodus.</p> <p>6. Vystyti Paviršiaus sutirpintos Ramano sklaidos metodo taikymo galimybes, naudojant koloidinius tirpalus bei specialiai paruoštus nanostruktūrizuotus paviršius. Pritaikyti šiuos metodus nereceptinių vaistų molekulių bei navikinių darinių žymenų detekcijai žmogaus biologiniuose skysčiuose</p> <p>7. Vystyti Rezonansinio Ramano spektrometrijos metodą žadinimui naudojant UV spinduliuotę. Metodą pritaikyti antrinių baltymų struktūrų tyrimui, bei amino rūgščių konformacijų nustatymui amiloidiniuose baltymuose. Dalį šių</p>
--	--	--	--	---

				<p>tyrimų atlikti bendradarbiaujant su Švedijos nacionaline sinchrotroninio spinduliavimo laboratoriją MAXIV.</p> <p>8. Taikant teorinio molekulių modeliavimo metodus, tokius kaip molekulių dinamikos simuliacijos ir hibridiniai kvatiniai-klaiskiniai modeliai, iširti technologiniu požiūriu svarbių joninių skysčių ir jų binarinių mišinių su tradiciniais molekuliniais tirpikliais struktūros ir dinamikos ypatumus, sumodeliuoti jų BMR spektrinius parametrus. Bus nagrinėjami vandens agregavimosi dėsniumai joninių skysčių matricose; bus modeluojamas jonininius skysčius sudarančių jonų poravimasis žemos koncentracijos molekulinuose tirpikliuose. Siekiant gerinti modeliavimo tikslumą, bus tobulinami jėgų laikai, aprašantys jonus ir molekules klasikinėje hibridinio modelio dalyje.</p> <p>9. Modeliuosime vaistinėmis savybėmis pasižyminčių biomolekulių struktūras, termodinaminius bei spektrinius parametrus. Taikydami molekulių dinamikos ir hibridinius kvantinius-klasikinius modelius, taip pat elektroninės struktūros metodus kartu su termodinaminiais ciklais, nagrinėsime mikotoksinų bei potencialiai antivėžinėmis savybėmis pasižyminčių biomolekulių tautomerizavimosi ir struktūros ypatumus, modeliuodami jų BMR spektrus, rūgštingumo bei tautomerinės pusiausvyros konstantas.</p>
--	--	--	--	---

<p style="text-align: center;">Nr. 2</p> <p style="text-align: center;"><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>35/9 –F-2</b></p>	<p style="text-align: center;"><b>Pavadinimas:</b> MOLEKULINIŲ IR KRISTALINIŲ MEDŽIAGŲ ELEKTRONINIŲ SPEKTRŲ SKAIČIAVIMO METODŲ VYSTYMAS</p> <p style="text-align: center;"><b>Tikslai:</b> Kvantinės ir klasikinės mechanikos, kvantinės ir klasikinės elektrodinamikos, statistinės fizikos metodų plėtra sandarai bei vyksmams atomuose, molekulėse, nanodalelėse ir jų kompleksuose modeliuoti. Medžiagų sąveikos su elektromagnetiniu lauku nuo GHz iki UV ir netiesinės spektroskopijos teorinių aprašymo pagrindų vystymas.</p>	<p style="text-align: center;">2019 - 2023</p>	<p>Molekulių teorijos ir modeliavimo grupė</p> <p style="text-align: center;">Vadovas: Dr. D. Abramavičius, prof.</p> <p style="text-align: center;">Vykdytojai: Habil. Dr. L. Valkūnas, prof., dr. J. Šulskus, prof., dr. O. Rancova, doc., dr. M. Mačernis, doc., dr. S. Toliautas, asist. dr. J. Chmeliov, doc. dr. A. Gelžinis, doc. dr. K. Glenža, doc. V. Bubilaitis, laborantas, L. Diska, 0,8 laborantas, M. Jakučionis, 0,5 laborantas.</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Vystyti koherentinės spektroskopijos teorinį aprašymą įtraukiant eksitonų anihilacijos reiškinius. Aprašyti koherentinės spektroskopijos prie didelių žadinimo intensyvumų.</li> <li>2. Vystyti molekulių agregatų vibroninius ir variacinius modelius, įskaitant virpesių anharmonišumą, netiesinę modų sąveiką. Aprašyti molekulių vidinės konversijos procesus.</li> <li>3. Vystyti teorinius netiesinės spektroskopijos aprašymo metodus molekulinėms ir kristalinėms sistemoms žemose temperatūrose.</li> <li>5. Vystyti kvantinės chemijos teorinius metodus skaičiuoti chlorofilų, karotinoidų, bakteriorodopsino, aktyvaus centro elektronines būsenas, tirti DNR kirpimą BCNI baltyme.</li> <li>7. Nagrinėti fotosintetinių tilakoidinių membranų bei anteninių baltyminių kompleksų fluorescencijos spektrų laikines priklausomybes plačiame temperatūrų diapazone. Šie tyrimai yra sietini su nefotocheminio gesinimo mechanizmo modelio kūrimu.</li> <li>8. Kurti aukštos skiriamosios gebos mikroskopijos modelius.</li> <li>9. Vystyti teorinius modelius, leidžiančius analizuoti elektrinio lauko poveikį molekulinį darinių spektrams.</li> </ol>
---	---	--	--	--

Nr. 3

**Fiziniai mokslai (Fizika)  
34/9 –T-6**

**Pavadinimas:  
NAUJOS FUNKCINĖS  
MEDŽIAGOS IR  
SANDAROS**

**Tikslas:**  
Naujų organinių, neorganinių ir  
hibridinių medžiagų sluoksnių  
bei darinių formavimo  
technologijos, jų elektrinių,  
fotoelektrinių ir krūvio pernašos  
savybių tyrimas

2018 –  
2021 m.

Vadovas:  
Dr. Kęstutis Arlauskas, prof.

Vykdytojai:  
dr. A. Poškus, docentas,  
dr. M. Viliūnas, docentas,  
dr. K. Genevičius, vyriausias  
mokslo darbuotojas,  
dr. V. Jankauskas, ½ prof.,  
½ vyresnysis mokslo  
darbuotojas,  
dr. R. Maldžius, ½ docentas,  
½ vyresnysis mokslo  
darbuotojas,  
dr. R. Dobužinskas, mokslo  
darbuotojas,  
dr. N. Nekrašas, docentas,  
dr. G. Sliaužys, lektorius,  
habil. dr. G. Juška (emeritas),  
dr. R. Purlys,  
habil. Dr. V. Gaidelis,  
habil. Dr. T. Lozovski,  
dr. T. Grigaitis, mokslo  
darbuotojas  
dr. E. Kamarauskas, mokslo  
darbuotojas  
V. Sabonis, doktorantas,  
J. Nekrasovas, doktorantas,  
A. Aukštuolis, doktorantas,  
A. Naujokaitis, doktorantas.

1. Krūvininkų pernašos organiniuose lauko tranzistoriuose kompiuterinis modeliavimas.
2. Krūvininkų rekombinacijos, elektrinių ir dielektrinių sąvybių tyrimai perovskitiniuose Saulės elementuose bei dvisluoksniuose hibridiniuose dariniuose.
3. Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos tyrimai naujose organinėse medžiagose.
4. Krūvininkų judrio priklausomybės nuo temperatūros skystuose kristaluose tyrimai
5. Tūrinės heterosandūros bei perovskitinių saulės celių sluoksnių kūrimas, panaudojant organines skersaryšinas medžiagas, naudojant liejimo ir purškimo metodus.
6. Organinių puslaidininkinių, tinkamų perovskitiniams ir heterosandūros saulės elementams, krūvio pernašos savybių tyrimai.
7. Organinių puslaidininkinių junginių elektroninių lygmenų nustatymas lėtųjų elektronų skaitikliu.
8. Krūvininkų pernašos ir fotojonizacijos charakteristikų tyrimas naujose padidinto laidumo organinėse medžiagose, skirtose saulės elementams.
9. Įvairių struktūrų popierių tyrimas taikant aukštos įtampos išlydžio ir triboelektrinimo metodus.
10. Tolesnis kodo BREMS (tinklalapis <http://web.vu.lt/ff/a.poskus/brems>) vystymas, siekiant pagerinti greitaeigiškumą (optimizavimas) ir tikslumą (tuo tikslu yra planuojama nustatyti optimalią modelinę funkciją, kuri tiktų aproksimuojant elektrono-atomo stabdomosios spinduliuotės diferencialinio skerspjuvio

				<p>priklausomybę nuo naudojamų dalinių bangų skaičiaus).</p> <p>11. Naudojant kodą BREMS, apskaičiuoti tikslus elektrono-atomo stabdomosios spinduliuotės diferencialinius skerspjūvius visiems cheminiams elementams, kai elektrono energija yra nuo 10 eV iki 10 MeV.</p> <p>12. Modifikuoti Monte Karlo kodą MCNelectron (tinklapis <a href="http://web.vu.lt/ff/a.poskus/mcnelectron/">http://web.vu.lt/ff/a.poskus/mcnelectron/</a>), papildant jį tiksliais stabdomosios spinduliuotės skerspjūviais, gautais naudojant kodą BREMS.</p> <p>13. Silicio karbido bei silicio karbido diodų formavimo galimybės, naudojant rentgeno spinduliuotę, tyrimas.</p> <p>14. Halidinių perovskitų, organinių ir kompositinių medžiagų struktūriniai, spektrometriniai ir elektriniai tyrimai.</p> <p>15. Organinių medžiagų sluoksnių formavimo magnetiniame lauke ir jų optinių bei elektrinių savybių tyrimas.</p>
<p>Nr. 4</p> <p><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>34/9-T-3</b></p>	<p><b>Pavadinimas:</b> MAŽŪJŲ PALYDOVŲ RAKETINIŲ MIKROVARIKLIŲ GAMYBA IR TYRIMAS</p> <p><b>Tikslas:</b> Raketinių mikrovariklių modeliavimas ir testavimas</p>	<p>2018 – 2021 m.</p>	<p>Vadovas: dr. Liudas Tumonis, vyresnysis mokslo darbuotojas</p> <p>Vykdytojai: dr. (HP) Kęstutis Arlauskas, profesorius, dr. M. Viliūnas, docentas, J. Markevičius, technikas</p>	<p>1. Mažųjų palydovų raketinių mikrovariklių bandymų stendo su su magnetine levituojančia pakaba kūrimas.</p> <p>2. Kvarcinio raketinio mikrovariklio šilumokaičio mechaninio nuovargio priklausomybės nuo ciklinio kaitinimo tyrimai.</p>