

Cheminės fizikos institutas
(kamieninis akademinis padalinys)

2018 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 2018 metams
<p align="center">Nr. 1 Mokslo kryptis - Fiziniai mokslai P000 (02P) MTEP programa - 35 Darbo pobūdis - F Ūkio ekonominė-socialinė sfera - 12</p>	<p align="center">Pavadinimas: FUNKCINIŲ HIBRIDINIŲ IR STRUKTŪRIZUOTŲ MEDŽIAGŲ BEI DANGŲ FOTONIKAI IR ATRANKIEMS JUTIKLIAMS SPEKTROMETRIJA</p> <p align="center">Tikslas: Panaudojant įvairius spektrinius metodus gauti išsamią informaciją apie molekulinį darinių struktūrinius parametrus, kuri reikalinga praktiniam jų taikymui fotonikoje ir jutiklių technologijose</p>	<p align="center">2015-2019</p>	<p>„Molekulių eksperimentinės spektroskopijos“ mokslinė grupė Vadovai: habil.dr. V.Balevičius, prof., dr (HP) V. Šablinskas, prof. Vykdytojai: doc.dr. V.Aleksa, docentas, doc.dr. A.Gruodis, docentas, dr. J. Čeponkus, docentas, dr. K. Aidas, lektorius, dr. V. Urbonienė, docentė, dr. A.Maršalka, docentas, dr. F.Kuliešius, docentas, V. Klimavičius, lektorius, M. Velička, lektorius, R. Platakytė, lektorė, D. Lengvinaitė, lektorė, K. Kristinaitytė, doktorantė, J. Kausteklis, doktorantas.</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Atlikti eksperimentinius polimerinių junginių ir polikristalų, naudojamų kuriant dangas fotonikai ir atrankiems jutikliams, tyrimus taikant CP MAS (kryžminė poliarizacija kartu su „magiškojo kampo sukimu“) metodą ir sukurti teorinį duomenų apdorojimo modelį, kuris leistų aprašyti lėtą sukinių sistemų evoliuciją kvazipusiausvyros link bei nustatyti lokaliuosius tvarkos parametrus. 2. Vystyti Ramano matricinės izoliacijos metodą vidinio vandenilinio ryšio tyrimams. 3. Tobulinti infraraudonosios sugerties spektriniais metodais pagrįstą vėžinių audinių diagnostiką. Sukurti spektrinę sistemą in situ ir in vivo tyrimams. 4. Vystyti atominių jonų kvadrupolinės BMR relaksacijos parametrų modeliavimo taikant klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijas bei hibridinius QM/MM metodus algoritmai. 5. Tęsti karboksirūgščių bei cikloheksano mišinių struktūros tyrimus taikant molekulinės dinamikos metodus bei H-1 BMR spektrų modeliavimą jungtiniais QM/MM metodais. 6. Vykdyti tautomerizmu pasižyminčių junginių rūgštingumo ir tautomerinės pusiausvyros

				<p>konstantų modeliavimo tankio funkcionalo teorijos metodais darbus.</p> <p>7. Tęsti biologinių skysčių spektrinius tyrimus SERS metodu.</p> <p>8. Sukurti metodiką mažų koncentracijų nereceptinių vaistų kokybinei ir kiekybinei analizei kraujyje ar kituose biologiniuose skysčiuose.</p>
<p>Nr. 2 Mokslo kryptis - Fiziniai mokslai P000 (02P) MTEP programa 35 - F – 12 Darbo pobūdis T Ūkio ekonominė-socialinė sfera 3</p>	<p>Pavadinimas: VYKSMŲ FOTOAKTYVIOSE ORGANINĖSE MEDŽIAGOSE IR NANODARINIUOSE MODELIAVIMAS</p> <p>Tikslai: Kvantinės mechanikos ir kvantinės elektro-dinamikos metodų plėtra sandarai bei vyksmams atomuose, molekulėse ir nanosistemose modeliuoti. Daugiamatės spektroskopijos teorinio aprašymo pagrindų vystymas bei koherentinio valdymo metodų galimybių paieškos.</p> <p>Molekulių ir nanodarinių Elektroninių sužadinių ir jų sukeltų struktūrų kitimo sąryšiai, biologinės kilmės ir dideliuose molekuliniuose dariniuose;</p> <p>Teoriniai pagrindai kvantinei relaksacijai:</p>	<p>2011 - 2018</p>	<p>Atvirų kvantinių sistemų fizikos grupė</p> <p>prof. dr. D. Abramavičius, prof.. (vadovas) Vykdotojai: dr. O. Rancova, doc.; dokt. E. Maksimovaitė, inž. M. Jakučionis, inž. V. Bubilaitis</p> <p>Vyksmų modeliavimo grupė</p> <p>prof. habil. dr. L. Valkūnas, prof. (vadovas) Vykdotojai: doc. dr. J. Bučinskas, doc.; dr. J.</p>	<p>1. Tobulinti dvimatės koherentinės spektroskopijos teorinį modelį ir jį taikyti, aprašant eksperimentinius rezultatus, leidžiančius nustatyti įvairių sparčiųjų vyksmų prigimtį, ypač skiriant dėmesį vibroninių būsenų galimą vaidmenį elektroninių vyksmų dinamikai.</p> <p>2. Vystyti teorinius netiesinės spektroskopijos aprašymo metodus molekulinėms ir kristalinėms sistemoms žemose temperatūrose.</p> <p>3. Vystyti kvantinės relaksacijos metodus apjungiant juos į kompiuterinį skaičiavimo paketą.</p> <p>4. Vystyti virpesinės relaksacijos modeliavimo metodus ir virpesinės spektroskopijos metodus.</p> <p>1. Vystyti turimą teorinį modelį, aprašantį energijos pernašos dinamiką fotosintetiniuose kompleksuose, siekiant jį pritaikyti spektroskopinių duomenų analizei plačiame temperatūrų ruože, nuo 10 K iki kambario temperatūros.</p> <p>2. Nagrinėti karotenoidų konformacinius vyksmus vyksmus įvairiose aplinkose.</p>

	<p>Nepusiausvyrinių elektroninių vyksmų dinamika, valdymas ir optimizavimas</p>		<p>Chmeliov, doc; dr. V. Butkus, lekt.; dr. A. Gelžinis, lekt.</p> <p>Kvantinės chemijos grupė prof. dr. J. Šulskus, (vadovas), Vykdytojai: dr. M. Mačernis, doc., doc. dr. K. Glemža, doc.; dr. S. Toliautas, lekt.; inž. I. Gaižiūnas</p>	<ol style="list-style-type: none"> 3. Vystyti modelius, tinkamus pavienių molekulių kompleksų fluorescencijos dinamikos aprašymui. Vystyti sklaidos rutulių rinkiniu kraštinio uždavinio sprendimo algoritmą, šalinant plokščios bangos skleidimo sferinėmis bangomis pririšimą prie bazinės koordinatinių sistemos orientacijos. 4. Suderinti tankio funkcionalo ir neempirius kvantinės chemijos metodus modeliuoti organinių molekulių elektronines ir spektrines savybes: monomerų sąveikos oksadiazolio kompleksuose įtaką fluorescencijos spektrams; 1. Kvantinės chemijos metodais skaičiuoti BODIPY molekulės S1 būsenos potencialių paviršių, siekiant suderinti metodologiją molekuliniam klampumo nustatymo jutikliams modeliuoti; 2. Nagrinėti karotenoidų sugerties ir Ramano spektrus bei jų priklausomybes nuo konformacijos ir aplinkos. 3. Panaudojant molekulių dinamikos ir tankio funkcionalo metodus nagrinėti ir vystyti protono pernašos modelį bakteriorodpsino baltyme. 4. Nagrinėti DNR kirpimo mechanizmus BCNI baltymu.
<p>Nr. 3 Mokslo kryptis - Medžiagų inžinerija T000 (08T) MTEP programa 34 Darbo pobūdis E Ūkio ekonominė-socialinė sfera 6</p>	<p>Pavadinimas: NAUJOS FUNKCINĖS MEDŽIAGOS IR SANDAROS</p>	<p>2018 – 2021 m.</p>	<p>Vadovas: Dr. Kęstutis Arlauskas, prof. Vykdytojai: dr. A.Poškus, docentas, dr.M.Viliūnas, docentas, dr. R.Rinkūnas, vyresnysis</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Krūvininkų pernašos įvairios sandaros organiniuose Saulės elementuose kompiuterinis modeliavimas. 2. Krūvininkų rekombinacijos, elektrinių ir dielektrinių sąvybių

	<p>Tikslas: Naujų organinių, neorganinių ir hibridinių medžiagų sluoksnių bei darinių formavimo technologijos, jų elektrinių, fotoelektrinių ir krūvio pernašos savybių tyrimas</p>		<p>mokslo darbuotojas, dr. K.Genevičius, vyriausias mokslo darbuotojas, dr. V.Jankauskas, ½ docentas, ½ vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. R.Maldžius, ½ docentas, ½ vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. N.Nekrašas, vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. G.Sliaužys, vyresnysis mokslo darbuotojas, habil.dr. G.Juška (emeritas), dr. R.Purlys, habil. Dr. V. Gaidelis, habil. Dr. T. Lozovski, dr. T. Grigaitis, dr. E. Kamarauskas, V. Sabonis, doktorantas, J. Nekrasovas, doktorantas, A. Aukštuolis, doktorantas, A. Naujokaitis, doktorantas.</p>	<p>tyrimai perovskitiniuose Saulės elementuose bei dvisluoksniuose hibridiniuose dariniuose.</p> <ol style="list-style-type: none"> 3. Sluoksnių morfologijos įtakos krūvininkų pernašai organiniuose lauko tranzistoriuose ir kituos prietaisuose eksperimentiniai tyrimai. 4. Purškimo metodo taikymo visiems perovskitinių saulės celių sluoksnių gamybos etapams išvystymas, siekiant išlaikyti/pasiekti didelius (~20%) efektyvumus. 5. Organinių puslaidininkinių, tinkamų perovskitiniams saulės elementams, krūvio pernašos tyrimai. 6. Organinių puslaidininkinių junginių elektroninių lygmenų tyrimas, lėtųjų elektronų skaitikliu. 7. Krūvininkų pernašos ir fotojonizacijos charakteristikų tyrimas naujose padidinto laidumo organinėse medžiagose, skirtose Saulės elementams. 8. Įvairių struktūrų popierių tyrimas taikant aukštos įtampos išlydžio metodus. 9. 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/) 10. 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. 11. Silicio karbido ir silicio nitrido sluoksnių bei silicio karbido diodų formavimo galimybes, naudojant rentgeno spinduliuotę,
--	---	--	--	---

				<p>tyrimas.</p> <p>12. Dirbtinio deimanto ir kitų plonų anglies bei silicio sluoksnių formavimas HW CVD metodu bei jų fotoelektrinių savybių tyrimai.</p> <p>13. Organinių-neorganinių ir kompozitinių sluoksnių Rentgeno spindulių jutikliams medžiagų ir technologijos paieška bei jų savybių tyrimas.</p>
<p>Nr. 4 Mokslų sritis (kryptis) 08T MTEP programa 34 Darbo pobūdis T Ūkio ekonominė-socialinė sfera 3</p>	<p>Pavadinimas: MAŽŪJŲ PALYDOVŲ RAKETINIŲ MIKROVARIKLIŲ GAMYBA IR TYRIMAS Tikslas: Raketinių mikrovariklių modeliavimas ir testavimas</p>	<p>2018 – 2021 m.</p>	<p>FF Kosmoso technologijų centras. Vadovas: dr. Liudas Tumonis. Vykdytojai: dr. Liudas Tumonis, vyr. m.d., Prof. K. Arlauskas, Doc. M. Viliūnas, Vyr. inž. A. Baronas</p>	<p>1. Mažųjų palydovų raketinių mikrovariklių bandymų ir charakterizavimo standų kūrimas. 2. Laboratorinio raketinio variklio modelio kūrimas ir tyrimai.</p>