

**Fizikos fakultetas**  
**Cheminės fizikos institutas**

**2019 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 2019 metams
<p style="text-align: center;">Nr. 1</p> <p style="text-align: center;"><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>35/9 –F-12</b></p>	<p style="text-align: center;">FUNKCINIŲ HIBRIDINIŲ IR STRUKTŪRIZUOTŲ MEDŽIAGŲ BEI DANGŲ FOTONIKAI IR ATRANKIEMS JUTIKLIAMS SPEKTROMETRIJA</p> <p style="text-align: center;"><b>Tikslas:</b> Panaudojant įvairius spektrinius metodus gauti išsamią informaciją apie molekulinį darinių struktūrinius parametrus, kuri reikalinga praktiniams jų taikymui fotonikoje ir jutiklių technologijose</p>	<p style="text-align: center;">2015- 2019</p>	<p style="text-align: center;">„Molekulių spektroskopijos“ mokslinė grupė Vadovas: prof., dr. (HP) V. Šablinskas, prof. Vykdytojai: habil dr. V. Balevičius, prof., dr. V. Aleksa, doc.dr. A. Gruodis, doc. dr. J. Čeponkus, doc., dr. V. Urbonienė, doc. dr. K. Aidas, lektorius dr. V. Urbonienė, doc., dr. A. Maršalka, doc., dr. F. Kuliešius, doc., dr. V. Klimavičius, lektorius, M. Velička, lektorius, R. Platakytė, lektorė, D. Lengvinaitė, lektorė, K. Kristinaitytė, doktorantė, R. Bandzevičiūtė, lektorė</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Atlikti eksperimentinius amorfinių ir nano-strukturizuotų medžiagų, naudojamų kuriant dangas fotonikai ir atrankiems jutikliams, tyrimus taikant daugelio branduolių BMR bei CP MAS (kryžminė poliarizacija kartu su „magiškojo kampo sukimu“) metodus ir sukurti naują teorinį modelį, kuris leistų aprašyti sukinių difuzijos ir terminės pusiausvyros tendencijas bei nustatyti galimus šių vyksmų kanalus ir dimensijas.</li> <li>2. Ištirti BMR spektroskopijos ir relaksometrijos taikymo galimybes tiriant mikro-heterogeniškumo apraiškas dvinariuose tirpaluose jonų poveikyje ir nustatyti tinkamiausius spektrinius parametrus susiformavusioms fazėms charakterizuoti.</li> <li>3. Vystyti Ramano matricinės</li> </ol>

				<p>izoliacijos metodą vidinio vandenilinio ryšio tyrimams, atliekant eksperimentus 3 K temperatūroje.</p> <p>4. Tobulinti FTIR ATR spektriniu metodu pagrįstą vėžinių audinių diagnostiką. Vystyti spektrinę sistemą in situ ir in vivo tyrimams.</p> <p>5. Tęsti biologinių skysčių spektrinius tyrimus SERS metodu.</p> <p>6. Praplėsti SERS taikymus nereceptinių vaistų kokybinei ir kiekybinei analizei kraujyje ir kituose biologiniuose skysčiuose.</p> <p>7. Vystyti atominių jonų kvadrupolinės BMR relaksacijos parametrų modeliavimo taikant klasikines molekulinės dinamikos simuliacijas bei hibridinius QM/MM metodus algoritmai.</p> <p>8. Vykdyti tautomerizmu pasižyminčių junginių rūgštingumo ir tautomerinės pusiausvyros konstantų modeliavimo tankio funkcionalo teorijos metodais darbus.</p>
<p>Nr. 2</p> <p><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>35/9 –F-2</b></p>	<p>MOLEKULINIŲ IR KRISTALINIŲ MEDŽIAGŲ ELEKTRONINIŲ SPEKTRŲ SKAIČIAVIMO METODŲ VYSTYMAS</p>	<p>2019-2023</p>	<p>Molekulių teorijos ir modeliavimo grupė</p> <p>Vadovas: Dr. D. Abramavičius, prof.</p> <p>Vykdytojai: Habil. Dr. L. Valkūnas,</p>	<p>1. Vystyti koherentinės spektroskopijos teorinį aprašymą įtraukiant eksitonų anihilacijos reiškinius. Aprašyti koherentinės spektroskopijos prie didelių žadinimo intensyvumų eksperimentinius rezultatus,</p>

	<p><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>prof.,  dr. J. Šulskus, prof.,  dr. O. Rancova, doc.,  dr. M. Mačernis, doc.,  dr. S. Toliautas,  dr. J. Chmeliiov,  dr. A. Gelžinis,  dr. V. Butkus,  dr. K. Glemža, doc.,  dr. J. Bučinskas, doc.</p>	<p>leidžiančius nustatyti įvairių sparčiųjų vyksmų prigimtį.</p> <p>2.Vystyti molekulių agregatų vibroninius ir variacinius modelius, įskaitant virpesių anharmoniškimą, netiesinę modų sąveiką. Aprašyti molekulių vidinės konversijos procesus.</p> <p>3.Vystyti teorinius netiesinės spektroskopijos aprašymo metodus molekulinėms ir kristalinėms sistemoms žemose temperatūrose.</p> <p>4.Vystyti kvantinės relaksacijos teoriją įtraukiant nemarkovinius reiškinius laipsniškai nykstančioms fliuktuacinėms koreliacinėms funkcijoms.</p> <p>5.Vystyti kvantinės chemijos teorinius metodus skaičiuoti karotinoidų, bakteriorodpsino, aktyvaus centro elektronines būsenas, tirti DNR kirpimą BCNI baltyme.</p> <p>6.Vystyti elektromagnetinės bangos sklaidos dielektrinių rutulių baigtiniu rinkiniu kraštinio uždavinio sprendinio radimo programinį kodą.</p> <p>7.Nagrinėti fotosintetinių tilakoidinių membranų bei anteninių pigmentus turinčių</p>
--	---	--	--	--

				<p>baltyminių kompleksų fluorescencijos spektrų laikines priklausomybes plačiame temperatūrų diapazone. Šie tyrimai yra sietini su taip vadinamo nefotocheminio gesinimo mechanizmo modelio kūrimu.</p> <p>8.Kurti aukštos skiriamosios gebos mikroskopijos modelius.</p> <p>9.Vystyti teorinius modelius, leidžiančius analizuoti galimus atskirtų krūvių būsenų efektus molekulinuose dariniuose.</p>
<p>Nr. 3</p> <p><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>34/9 –T-6</b></p>	<p>NAUJOS FUNKCINĖS MEDŽIAGOS IR SANDAROS</p> <p><b>Tikslas:</b> 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, vyriausias mokslo darbuotojas, dr. V. Jankauskas, ½ prof., ½ vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. R.Maldžius, ½ docentas, ½ vyresnysis mokslo darbuotojas, dr. N.Nekrašas, docentas, dr. G.Sliaužys, lektorius,</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Krūvininkų pernašos įvairios sandaros organiniuose Saulės elementuose kompiuterinis modeliavimas.</li> <li>2. Krūvininkų rekombinacijos, elektrinių ir dielektrinių sąvybių tyrimai perovskitiniuose Saulės elementuose bei dvisluoksniuose hibridiniuose dariniuose.</li> <li>3. Neorganinių perovskitinių sandarų saulės celėms technologijos paieška.</li> <li>4. Sluoksnių morfologijos įtakos krūvininkų pernašai organiniuose lauko tranzistoriuose ir kituos prietaisuose eksperimentiniai tyrimai.</li> <li>5. Purškimo metodo taikymo visiems</li> </ol>

			<p>             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.           </p>	<p>             perovskitinių saulės celių              sluoksnių gamybos etapams              išvystymas, siekiant              išlaikyti/pasiekti didelius              (~20%) efektyvumus.              6. Organinių              puslaidininkių, tinkamų              perovskitiniams saulės              elementams, krūvio              pernašos tyrimai.              7. Organinių              puslaidininkinių junginių              elektroninių lygmenų              tyrimas, 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              metodus.              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:  <a href="http://web.vu.lt/ff/a.poskus/brems/">http://web.vu.lt/ff/a.poskus/              brems/</a>              11. Tobulinti didelės              energijos elektronų ir fotonų              sąveikos su medžiaga           </p>
--	--	--	--	--

				<p>modeliavimo Monte Karlo metodu kodą MCNelectron (atviras kodas, nuoroda: <a href="http://web.vu.lt/ff/a.poskus/mcnelectron/">http://web.vu.lt/ff/a.poskus/mcnelectron/</a>) 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>Nr. 4</p> <p><b>Fiziniai mokslai (Fizika)</b> <b>34/9-T-3</b></p>	<p>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, A. Baronas, vyresnysis inžinierius</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mažųjų palydovų raketinių mikrovariklių bandymų ir charakterizavimo stendo tobulinimas.</li> <li>2. Laboratorinio raketinio variklio modelio kūrimas ir tyrimai.</li> </ol>