**3 kurso Šviesos technologijų studijų programos Kursiniai darbai:**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba) | Tema laisva/užimta |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | Molekulių struktūros nustatymo skaičiavimų modeliais tikslumo ribos  *Accuracy limits of computationally modeled molecular structure* | Molekulės struktūros nustatymas yra daugiamačio energijos optimizavimo uždavinys, ir skirtingos parametrų (pvz., ryšių ilgių) vertės neretai atitinka praktiškai vienodas energijos reikšmes. Darbo metu bus tiriama, kokio parametrų tikslumo verta tikėtis optimizuojant struktūros parametrus populiariais kvantinės chemijos paketais.  *Numerical estimation of molecular structure is equal to multidimensional optimization problem w. r. t. energy, and differing parameters (e. g., bond lengths) may result in the same energy value. The goal of the study is to assess practical accuracy of the structural parameters obtained by commonly-used quantum chemistry packages.* | laisva |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Monomolekulinių sluoksnių, skirtų optoelektronikai tyrimas spektroskopiniu elipsometru  *Investigation of monomolecular layers for optoelectronic devices by spectroscopic ellipsometry.* | Elipsometrija yra populiarus medžiagos sluoksnio neardantis optinių parametrų matavimo metodas, kuris remiasi šviesos bangos poliarizacijos po atspindžio pokyčiu, leidžiantis įvertinti sluoksnio storį, paviršiaus šiurkštumą, el.laidumą ir kt. Pats elipsometras nėra labai sudėtingas prietaisas, tačiau studentas turės išmokti paruošti bandinius bei pritaikyti reikiamą teorinį modelį, o gauti rezultatai bus naudingi laboratorijoje gaminant daugiasluoksnius foto- ar optoelektrinius prietaisus. | laisva |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, [kristijonas.genevicius@ff.vu.lt](mailto:kristijonas.genevicius@ff.vu.lt) | Skersaryšinimo įtaka krūvininkų pernašai organinėse puslaidininkinėse medžiagose  *Influence of cross-linking of organic semiconductor materials on charge carrier transport* | Organinių molekulių skersaryšinimas sumažina tirpumą, sulėtina degradacinius procesus ir padidina mechaninį atsparumą. Skersaryšinimo metu sudaromos papildomos cheminės jungtys keičia tarpmolekulinius atstumus bei molekulių išsidėstymo tvarką, neretai tokie pokyčiai stipriai pakeičia krūvininkų judrį.  Sluoksnių gamyba iš tirpalų inertinių dujų kameroje, skersaryšinimo sąlygų parinkimas, judrio nustatymas lėkio trukmės metodu | laisva |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, [kristijonas.genevicius@ff.vu.lt](mailto:kristijonas.genevicius@ff.vu.lt) | Skersaryšinamų medžiagų panaudojimas tūrinėse heterosandūrose  *Cross-linkable materials in organic bulk heterojunctions* | Vienas iš pagrindinių tūrinės heterosandūros saulės elementų trūkumų yra morfologiniai pokyčiai mažinantys efektyvumą. Atlikus pilną ar dalinį tūrinės heterosandūros skersaryšinimą būtų galima tikėtis sulėtinti ne tik morfologinę bet ir cheminę degradaciją.  Sluoksnių gamyba iš tirpalų inertinių dujų kameroje, tūrinės heterosandūros sudėties parinkimas, degradacinių procesų spartos įvertinimas. | laisva |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, [kristijonas.genevicius@ff.vu.lt](mailto:kristijonas.genevicius@ff.vu.lt) | Šviesos sugerties gylio įtaka bimolekulinės rekombinacijos nustatymui lėkio trukmės metodu  *Influence of absorption depth to the precision of bimolecular recombination estimated from time-of-flight* | Daugumoje organinių medžiagų vyraujantis rekombinacijos mechanizmas yra Langevin tipo bimolekulinė rekombinacija, kuri dažnai ir apriboja organinių saulės elementų efektyvumą. Vienas paprasčiausių būdų nustatyti bimolekulinės rekombinacijos koeficientą yra lėkio trukmės metodo panaudojimas, kuris reikalauja, kad šviesos sugertis būtų tūrinė. Jei sugerties gylis yra palyginamas ar mažesnis nei sluoksnio storis, rekombinacijos koeficientas nustatomas netiksliai.  Bandinių gamyba inertinių dujų kameroje, bimolekulinės rekombinacijos koeficiento nustatymas bei krūvininkų judrių nustatymas, rezultatų palyginimas su skaitmeninio modeliavimo rezultatais. | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis,  (+ 370) 5 223 4659  mindaugas.macernis@ff.vu.lt | Kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų duomenų bazė ir informacinė sistema  *The Database and Information System for the results of the Quantum Chemical calculations* | Superkompiuterių kvantinės chemijos panaudojimo efektyvumui naudojamos sistemos kaip WebMO, kurios skirtos uždavinių paruošimui ir vykdymui. Tuo tarpu labai svarbu tinkamai saugoti jau atliktus skaičiavimus. Tam, kad vartotojas galėtų lengviau pasiekti ir redaguoti tuos duomenis, yra naudojamos informacinės sistemos, kurios palengvina darbą su duomenų bazėmis –pateikiama paprasta aplinka duomenims įkelti, tvarkyti, trinti ir atvaizduoti. Skirtingi kvantinės chemijos programų paketai turi didelį kiekį skirtingų skaičiavimo algoritmų, iš kurių vieni sutampa, o kiti skiriasi. Darbo tikslas automatizuoti ir pritaikyta kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų leidimui, saugojimui, jų automatizuotai analizei ir turėtų informacinę sistemą, kurioje daugelis vartotojų (šiuo metu pritaikyta vienam vartotojui) gali lengvai pasiekti bei tvarkyti kvantinių skaičiavimų duomenis. Įdiegti vieną pasirinktą kvantinės chemijos paketą ir atlikti našumo testus. Skaičiavimai bus atliekamai su Fizikos fakultete esančiu superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [1].  [1] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022 | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių karotinoidų modeliavimas baltymuose su superkompiuteriu  *Modeling of various Carotenoids with Protein using supercomputer* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose[1-3].  Karotinoidų savybės priklauso nuo baltyminės aplinkos, kuri yra kintanti laike, todėl reikalingas detalus sistemos aprašymas norint suprasti spektrines savybes, o tam reikalingi paketų našumo analizės tyrimai, tokių kaip GROMACS. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant GROMACS ir Gaussian 16, NwChem, QChem ir kt. paketus. Reikės įdiegti atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje. Skaičiavimai bus atliekamai su Fizikos fakultete esančiu superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [4].  Literatūra  [1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014).  [2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018)  [3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022.  [4] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022 | laisva |