**Bakalauro Baigiamieji darbai** (Fizika, Taikomoji fizika, Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Kompiuterinė fizika ir modeliavimas, Aukštųjų technologijų fizika ir verslas):

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba) | Tema laisva/užimta |
|  | Robertas Maldžius,  robertas.maldzius@ff.vu.lt,  Saulėtekio al. 3, A330  +370 (5)223 4556 | Spektrinis fotojautris ir fotogeneracijos kvantinis našumas skersaryšintuose organiniuose sluoksniuose fotovoltaikos prietaisams  *Spectral photosensitivity and photogeneration quantum efficiency in cross-linked organic layers for photovoltaic devices* | Fotovoltinių prietaisų (saulės elementai) gamybai sintetinamos cheminės medžiagos tinkamumą įvertiname tada, kai nustatoma visa eilė fizikinių parametrų. Vieni iš tokių yra spektrinis fotojautris ir krūvininkų fotogeneracijos kvantinio našumo spektrinis pasiskirstymas. Darbo metu tyrinėjame kaip medžiagos skersaryšinimo cheminės reakcijos įtakoja minėtų spektrinių charakteristikų pakitimus, lemiančius būsimo fotovoltinio prietaiso našumo augimą. | laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,  Saulėtekio al. 3, A327  +370 (5)223 4549 | Krūvininkų dinamikos tyrimai dielektriniuose fotovoltinių prietaisų sluoksniuose dozuoto įelektrinimo-išelektrinimo metodu  *Studies of the dynamics of charge carriers in the dielectric layers of photovoltaic devices using the dosed charge-discharge method* | Tyrimo metodas leidžia spręsti, ar susintetinta cheminė medžiaga gali būti tinkama fotovoltinio prietaiso (saulės elemento) gamyboje. Tokių medžiagų sluoksnius charakterizuojame visa eile parametrų: ribiniu įelektrėjimo potencialu, paviršinio krūvio injekcijos srovėmis, efektine dielektrine skvarba, dielektriniu storiu ir kt. Darbe išmatuojame sluoksnių voltkulonines bei voltfaradines charakteristikas bei jas analizuojame. | laisva |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt),  8 5 223 4593 | Joninių skysčių mišiniai su tradiciniais tirpikliais: struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  Modelling structural and NMR properties of mixtures between ionic liquids and traditional solvents | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. Kadangi katijonų molekulinė struktūra pasižymi tam tikra asimetrija, dažnai JS, – kitaip nei įprastinės druskos, – išlieka skysti kambario ar netgi dar žemesnėje temperatūroje. Dėl savo išskirtinės sudėties šie skysčiai pasižymi unikaliomis savybėmis, kurios atveria duris įvairialypiams jų taikymams cheminėje inžinerijoje, gyvybės moksluose ir nanotechnologijose. Siekiant suprasti ir kontroliuoti joninių skysčių fiziko-chemines savybes, būtina turėti detalią informaciją molekuliniame lygmenyje apie šių sistemų tarpmolekulinę struktūrą ir dinamiką. Šiame darbe bus modeliuojami imidazolio katijono šeimos joninių skysčių ir dichlormetano mišinių struktūra ir branduolių magnetinio rezonanso spektrai taikant modernius molekulinių sistemų modeliavimo metodus – klasikines molekulinės dinamikos simuliacijas ir jungtinius kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos modelius. Visi modeliavimo darbai bus atliekami VU aukšto našumo skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu. | laisva |
|  | Gytis Sliaužys ([gytis.sliauzys@ff.vu.lt](mailto:gytis.sliauzys@ff.vu.lt), 8 5 223 4553) | Krūvininkų pernašos savybių tyrimas organiniuose lauko tranzistoriuose  Investigation of charge carriers transport properties in organic field-effect transistors | Šio darbo tikslas:  pasigaminti organinius lauko tranzistorius naudojant skirtingus organinius puslaidininkius;  skirtingomis metodikomis ištirti, šių puslaidininkių, krūvio pernašos savybes organiniuose lauko tranzistoriuose;  iš gautų rezultatų nustatyti naudotų organinių puslaidininkių tinkamumą organiniams lauko tranzistoriams. | laisva |
|  | Egidijus Kamarauskas,  [egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt](mailto:egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt),  A307 | Skersaryšinimo įtaka organinių molekulių energetiniams lygmenims  Cross-linking influence on energy levels in organic molecules | Darbo metu tiriama organinių medžiagų sluoksniai prieš ir po skersaryšinimo reakcijos. Matuojami fotoelektronų emisijos (PES) bei šviesos sugerties spektrai, iš jų vertinami energijos lygmenų pokyčiai. | laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,  Saulėtekio al. 3, A327  +370 (5)223 4549 | Drėgmės difuzijos popieriaus dangose tyrimas po paviršiaus paveikimo elektrinio išlydžio ore jonais  Investigation of moisture diffusion in paper coatings after surface exposure with electrical discharge ions in air | Pasaulyje kuriamos technologijos, kuriose popieriaus pakuotėje nenaudojamas plastikas. Tuo pat metu tokia danga turi apsaugoti nuo drėgmės poveikio. Vandens garų difuzijos nustatymo metodas, pagrįstas paviršinio elektrinio laidumo kinetikos matavimu, įgalina popieriaus pakuotės technologinio gamybos proceso metu sparčiai nustatyti dangos tinkamumą, kokybę ir kitus parametrus. Darbe bus įvertinamas popieriaus dangų atsparumas drėgmei, kuomet tos dangos veikiamos atitinkamo poliškumo jonais, gaunamais elektrinio išlydžio ore metodu. | užimta |
|  | Vygintas Jankauskas  85 223 4557, [vygintas.jankauskas@ff.vu.lt](mailto:vygintas.jankauskas@ff.vu.lt) | Skersaryšinamų krūvio pernašos junginių tyrimas (Investigation of cross-linked charge transport compounds) | Ištirti izocianatais skersaryšimamas organines krūvio pernašos medžiagas, surasti optimalias skersaryšimino sąlygas, duodančias geriausią krūvio pernašą bei patikimą skersaryšinimą. | užimta |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt),  8 5 223 4593 | Imidazolio joninių skysčių struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  Modelling structural properties and NMR spectra of imidazolium ionic liquids |  | užimta |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt),  8 5 223 4593 | Vaistinių junginių supramolekulinėse matricose BMR spektrų modeliavimas  Modelling NMR spectra of drug molecules bound to supramolecular matrices |  | užimta |
|  | Rokas Dobužinskas ([rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt](mailto:rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt), +37066238767) | Organinių tranzistorinių struktūrų gamyba ir jų taikymas biologiniams objekams tirti  Production of organic transistor structures and their application to the study of biological objects | Organiniai tranzistorinės struktūros gali būti naudojamos biojoninių skysčių detekcijai. Organiniai tranzistoriai yra pagaminti iš organinių medžiagų, tokių kaip polimerai arba molekulės. Pasitelkus elektrinius metodus tokiomis struktūromis galima detektuoti jonų dinamiką skysčiuose. Metodas, kuriuo nustatomas biologinių medžiagų, tokių kaip jonai, metabolitai ar hormonai, kiekis skystyje yra svarbus medicininėje diagnostikoje, aplinkos jutikliuose ir kitose srityse. | užimta |
|  | Rokas Dobužinskas ([rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt](mailto:rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt), +37066238767) | Biojoninių skysčių detektavimas su organinėmis tranzistorinėmis struktūromis  Detection of Bioionic Fluids with Organic Transistor Structures | Organiniai tranzistorinės struktūros gali būti naudojamos biojoninių skysčių detekcijai. Organiniai tranzistoriai yra pagaminti iš organinių medžiagų, tokių kaip polimerai arba molekulės. Pasitelkus elektrinius metodus tokiomis struktūromis galima detektuoti jonų dinamiką skysčiuose. Metodas, kuriuo nustatomas biologinių medžiagų, tokių kaip jonai, metabolitai ar hormonai, kiekis skystyje yra svarbus medicininėje diagnostikoje, aplinkos jutikliuose ir kitose srityse. | užimta |
|  | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Mikroplastiko identifikavimas gamtiniuose bandiniuose Virpesinės spektrometrijos metodais  Identification of microplastics in environmental samples by the means of vibrational spectroscopy | Šiuolaikinė visuomenė susiduria su įvairiomis plastiko užterštumo formomis. Pastaruoju metu suprasta, kad greit suyrantis plastikas gamtoje vis tiek išlieka mikrodalelių formoje ir pavojingas gamtai ir žmogaus sveikatai. Spektriniai metodai galėtų būti taikomi užterštumo mikroplastiku tyrimams tačiau reikalingi išankstiniai tyrimai ir metodikos sukūrimas, kuris galėtų patvirtinti spektrinių metodų pritaikomumą. Studento darbo esmė atlikti mikroplastikų tyrimą skirtingais spektriniais metodais ir surasti optimalias sąlygas mikroplastiko identifikavimui gamtiniuose bandiniuose | užimta |
|  | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Mikroorganizmų identifikavimas Infraraudonosios ATR spektrometrijos metodais  Identification of microorganisms using ATR spectroscopy methods | Tyrimo tikslas taikant Ramano ir Infraraudonosios sugerties spektrinius metodus, identifikuoti skirtingus mikroorganizmus. Patikrinti galimybe, mikroorganizmus aptikti ant žmogaus odos. | užimta |
|  | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Virpesinės spektrometrijos ir matricinės izoliacijos metodo taikymas molekulių su Silicio pakaitais struktūros tyrimams  Application of matrix isolation vibrational spectroscopy in structural analysis of molecules with silicon substituents | Tyrimo tikslas taikant žemos temperatūros matricinės izoliacijos spektroskopijos ir kvantinės chemijos skaičiavimų metodus tirti molekulių turinčių kelias skirtingas konformacijas struktūras, nustatyti šių struktūrų pasikarstymą, bandinyje, energinius barjerus tarp jų. | užimta |
|  | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Sočiųjų karboksirūgščių monomerų ir dimerų struktūros tyrimas Matricinės izoliacijos virpesinės spektrometrijos metodais  Study of saturated monocarboxylic acids monomer and dimer structure by the means of matrix isolation vibrational spectroscopy | Tyrimo tikslas taikant virpesinės spektrometrijos ir kvantinės chemijos metodus tirti karboksirūgščių (propano, butano, pentano) struktūrą, galimas konformacijas, bei nustatyti tarpusavio sąveikos energijas, susiformavusių kompleksų geometrinius parametrus | užimta |
|  | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Mikroplastiko identifikavimas gamtiniuose bandiniuose Virpesinės spektrometrijos metodais  Identification of microplastics in environmental samples by the means of vibrational spectroscopy | Šiuolaikinė visuomenė susiduria su įvairiomis plastiko užterštumo formomis. Pastaruoju metu suprasta, kad greit suyrantis plastikas gamtoje vis tiek išlieka mikrodalelių formoje ir pavojingas gamtai ir žmogaus sveikatai. Spektriniai metodai galėtų būti taikomi užterštumo mikroplastiku tyrimams tačiau reikalingi išankstiniai tyrimai ir metodikos sukūrimas, kuris galėtų patvirtinti spektrinių metodų pritaikomumą. Studento darbo esmė atlikti mikroplastikų tyrimą skirtingais spektriniais metodais ir surasti optimalias sąlygas mikroplastiko identifikavimui gamtiniuose bandiniuose | užimta |
|  | Vytautas Klimavičius  [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  +370 5 223 4588 | Bioaktyviųjų joninių skysčių aukštosios skyros BMR tyrimas  High resolution NMR study of bioactive ionic liquids | Bioaktyviųjų joninių skysčių tyrimai taikant BMR | užimta |
|  | Vytautas Klimavičius  [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  +370 5 223 4588 | Halo-fosfatų 31P, 1H ir 35Cl kietojo kūno BMR tyrimas, 31P, 1H and 35Cl solid state NMR study of halo-phosphates | Chlorintų kalcio fosfatų kietojo kūno BMR tyrimas | užimta |
|  | Vytautas Klimavičius  [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  +370 5 223 4588 | NASICON pagrindo baterijų elektrodų kietojo kūno BMR tyrimas, Solid state NMR study of NASICON based battery electrodes | Baterijų elektrodų kietojo kūno BMR tyrimai | užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų pernaša mažamolekulinių organinių medžiagų mišiniuose su polimerais  *Charge carriers transport in small molecule - polymer blends* | Mažų molekulių organiniuose junginiuose pasiekiami didesni krūvininkų judriai, bet kol kas neįmanoma efektyviai valdyti sluoksnio morfologijos. Kadangi polimerinių sluoksnių struktūra yra žymiai geriau kontroliuojama, tai mažų molekulių junginių komponavimas su polimerine matrica laikomas perspektyvia kryptimi. Pagrindinis šio darbo tikslas yra atskleisti naujai susintetintų mažamolekulinių organinių puslaidininkių panaudojimo perspektyvas, kombinuojant šias medžiagas su krūvį pernešančiais polimerais | užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų pernaša organiniuose lauko tranzistoriuose su monomolekuliniais sluoksniais  *Charge carriers transport in OFETs with monomolecular layers* | Bendradarbiaudami su chemikais nuolat gauname naujai susintetintų organinių medžiagų, tame tarpe skirtų labai ploniems, monomolekuliniams sluoksniams formuoti. Tokie sluoksniai gali būti naudojami kaip papildomi OFET dielektrikams padengti. Šiame darbe bus gaminami ir tiriami OFET su sluoksniais iš šių medžiagų. | užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Naujų skersaryšinamų organinių krūvininkų pernašos medžiagų charakterizavimas  *Characterization of new cross-linkable organic charge carrier materials* | Gaminant daugiasluoksnius organinės elektronikos prietaisus iš tirpalų, iškyla problemos dėl apatinių sluoksnių tirpumo liejant viršutinius sluoksnius. Vienas iš sprendimo būdų yra specialiai tam sukurtų sluoksnių skersaryšinimas temperatūros ar cheminio poveikio pagalba, kurio metu medžiagoje susidaro papildomos cheminės jungtys tarp gretimų molekulių ir ji pasidaro nebetirpi, taip pat atsparesnė aplinkos poveikiui. Tokiuose sluoksniuose pasikeičia ir krūvio pernaša, todėl reikalingi papildomi tyrimai siekiant jas pritaikyti prietaisuose. | užimta |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | sBazinių mašininio mokymo modelių taikymas kvantinės chemijos duomenų analizei  Application of machine learning foundation models in quantum-chemical data analysis |  | užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Karotinoidų baltymuose molekulių dinamikos tyrimas  Molecular dynamics study for Carotenoids in Protein | Šio tyrimo tikslas yra skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant AMBER, GROMACS ir Gaussian 16 paketus. Tyrimo metu bus atlikti našumo analizės tyrimai, kuriems reikės detalio sistemos, įskaitant baltyminę aplinką, aprašymo. GROMACS paketo diegimas, našumo tyrimai ir instrukcijos bus skirtos superkompiuterio „VU HPC“ Saulėtekis naudojimui. Darbo eiga apims šias pagrindines dalis:  1. Našumo tyrimai su AMBER ir GROMACS.  2. Ab initio ir molekulių dinamikos (MD) skaičiavimai karotinoidams baltyminėje aplinkoje  3. Superkompiuterio „VU HPC“ Saulėtekis našumo analizė.  4. GROMACS naudojimo instrukcijos.  5. Gautų MD rezultatų analizė.  Tyrimas reikalauja atidžios sistemų analizės bei efektyvaus superkompiuterio panaudojimo. | užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Karotinoidų sugerties spektrų analizė panaudojant QCHEM kvantinės chemijos paketą  Analysis of Carotenoid Absorption Spectra utilizing the QCHEM Quantum Chemistry Package | Ši tema skirta gilintis į karotinoidų sugerties spektrų analizę, panaudojant QCHEM kvantinės chemijos paketą. Karotinoidai, kaip pigmentai, atlieka svarbų vaidmenį fotosintezėje ir kituose biocheminiuose procesuose. Šio tyrimo metu bus naudojamas QCHEM paketas, siekiant ištirti karotinoidų sugerties spektrus ir suprasti jų energijos pasiskirstymą. Metodika apims kvantinę chemiją, leidžiančią tiksliai modeliuoti molekulinius procesus. Be to, ši tema įtraukia QCHEM našumo analizę, kuri yra skirta įvertinti šio kvantinės chemijos paketo efektyvumą tyrimo atlikimo metu. Našumo analizė padės įvertinti skaičiavimų greitį ir efektyvumą, taip pat padės pasirinkti optimalias strategijas tyrimui vykdyti. Tyrimo rezultatai turėtų ne tik praplėsti mūsų supratimą apie karotinoidų sugerties spektrus, bet ir pateikti įžvalgų apie QCHEM paketo pritaikymą šioje specifinėje tyrinėjimo srityje. Panaudojant QCHEM paketą, siekiama sukurti tikslesnį ir išsamų karotinoidų sugerties spektrų modelį, įnešant naujų žinių į molekulinės biologijos tyrimus. | užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų duomenų bazių ir informacinė sistemų panaudojimas karotinoidų analizei  The Database and Information System for the results of the Carotenoids From Quantum Chemical calculations | Efektyviam superkompiuterių naudojimui kvantinės chemijos uždaviniams, ypač karotinoidų analizei, dažnai pasitelkiamos sistemos, pvz., WebMO. Svarbu tinkamai saugoti atliktus skaičiavimus, todėl naudojamos informacinės sistemos, kurios palengvina duomenų tvarkymą – suteikia paprastą aplinką duomenų įkėlimui, tvarkymui, trynimui ir atvaizdavimui. Įvairūs kvantinės chemijos programų paketai siūlo skirtingus skaičiavimo algoritmus, kurie gali skirtis.  Norint atlikti potencinių paviršių braižymą, reikalingi 100 skaičiavimo taškai, o mašininio mokymosi (ML) algoritmams, įskaitant karotinoidų analizę, būtini tūkstančiai skaičiavimo taškų. Darbo tikslas – automatizuoti ir pritaikyti kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų leidimui, saugojimui, automatizuotai analizei, sukurti informacinę sistemą, prieinamą daugeliui vartotojų. Tyrimas atliekamas su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis. | užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | MATLAB paketo mašininio mokymo panaudojimo tyrimas kvantinės chemijos skaičiavimų duomenų karotenoidams analizei  I nvestigation of the Use of MATLAB Package for Machine Learning in Quantum Chemistry Computational Data Analysis for Carotenoids | Šio tyrimo tikslas yra ištirti MATLAB mašininio mokymo (ML) paketo taikymą kvantinės chemijos skaičiavimų duomenų analizei, ypač karotinoidams. Panašiai kaip Superkompiuterių naudojamos sistemos tyrimo metu bus vertinama MATLAB paketo efektyvumas uždavinių paruošimui ir vykdymui. Be to, bus svarbu tinkamai saugoti atliktus skaičiavimus.  Pagrindinis tyrimas bus vieno MATLAB našumo testavimas, paruošimas ML karotinoidams ir rezultatų analizė. Visi skaičiavimai bus atlikti superkompiuteryje „VU HPC“ Saulėtekis. | užimta |
|  | Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt  tel. 868728948 | Aktyvinio elektromagnetinės spinduliuotės filtro taikymo tyrimas  Investigation of active EMI filter application | Kovojant su impulsinių grandinių skleidžiamais elektromagnetiniais trikdžiais iki šiol buvo naudojamos pasyvios technologijos- LC filtrai ir ekranai. Šiame darbe siūloma patyrinėti neseniai pasirodžiusią aktyvią trikdžių slopinimo sistemą TPSF12C1 pagrindu, slopinančią trikdžius priešfazinio signalo injekcijos būdu. | užimta |
|  | Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt  tel. 868728948 | Surinkimo linijos darbo savikainos įvertinimas pagal montuojamos plokštės ypatybes ir pateiktų komponentų sąrašą  Evaluation of the assembly line labor cost based on the characteristics of the assembled board and the list of provided components | Remiantis istoriniais duomenimis ir techninėmis surinkimo linijos charakteristikomis, rasti metodą, pagal kurį galima būtų kuo tiksliau įvertinti, kokia būtų planuojamos rinkti plokščių partijos savikaina. | užimta |