**Magistrantūros 1 kurso Mokslo tiriamieji darbai:**

| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Tema laisva/užimta |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, 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 |
|  | Kristijonas Genevičius  kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  +370 5 223 4553 | Rekombinacijos ir krūvininkų pernašos priklausomybė nuo tūrinės heterosandūros morfologijos    Dependence of recombination and charge carrier transport on the morphology of a bulk heterojunction | Veiksnių įtakojančių saulės elementų su tūrine heterosandūra tyrimas. Darbas technologinėje laboratorijoje ir eksperimentas.    Research on the factors affecting the efficiency of bulk heterojunction solar cells. Work in the technological laboratory and experiment. | laisva |
| 3. | Kristijonas Genevičius  kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  +370 5 223 4553 | Krūvininkų ištraukimo kinetikos donoro ir akceptoriaus mišiniuose    Charge carrier extraction kinetics in donor and acceptor mixtures | Eksperimentinių metodikų skirtų rekombinacijos tyrimams tobulinimas. Bandinių gamyba technologinėje laboratorijoje ir eksperimentas.    Improvement of experimental techniques for investigation of charge carrier recombination. Sample preparation in a technological laboratory and experiment | laisva |
| 4. | Justinas Čeponkus/ justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Molekulių su vidinius vandeniliniu ryšiu tyrimas Matricinės izoliacijos virpesinės spektrometrijos metodais    Study of internaly hydrogen bonded molecules using matrix isolation vibrational spectroscopy. | Tyrimo idėja pritaikyti matricinės izolaicijos metoda molekulių su vidiniu vandeiniliniu ryšiu tyrimui. Pagrindinis tyrimo objektas psiaudociklinės molekulės kurių žiedą „uždaro“ vandeinilinis ryšys. Tokių molekulių elektroninė struktūra pasižymi stipria delokalizacija, lemenčia molekulės fizines ir chemines savybes. Virpesinės spektrometrijos metodais siekiama gauti žinių apie tokio tipo sąveikas ir jų fotodinaminius aspektus. | laisva |
| 5. | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Karotenporfirino dyadų būsenų modeliavimas naudojant tankio funkcionalus ir molekulių dinamiką    Carotenoporphyrin Dyad Modeling with DFT and Molecular Dynamics | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose, kurie sudaro kompleksus su chlorofilais. Viena tokių dirbtinių sistemų yra karotenporfirino dyados, kuriose vyksta analogiški fotofizikiniai procesai. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotenporfirino dyadų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant tankio funkcionalo metodikas. Reikės atlikti ab initio skaičiavimus, kad įvertinti galimai susidarančias krūvio pernašos būsenas. Skaičiavimai bus atliekamai su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
| 6. | Vytautas Klimavičius  vytautas.klimavicius@ff.vu.lt  +370 5 223 4588 | NASICON-tipo baterijų medžiagų 47,49Ti kietojo kūno BMR tyrimas,  Solid state 47,49Ti NMR study of NASICON based battery materials | Baterijų BMR tyrimai, Battery Research using NMR | užimta |