**Baigiamasis darbas bakalaurai** (IV k. Fizika; Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Aukštųjų technologijos)

**Final bachalor’s thesis (IV year)**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta  |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Hidrodinamikos uždavinių nestabilių sprendinių vizualizavimas realiu laikuReal-time visualization of unstable solutions in hydrodynamic simulations | Mikroskopinės skysčių savybės lemia juose stebimus netiesinės dinamikos reiškinius, pvz., savitvarką ir chaotiškumą, kuriuos galima užrašyti per analizinius sprendinius, bet ne taip paprasta modeliuoti smulkiu masteliu. Tyrimo metu dinamikos uždaviniai bus bandomi spręsti „realiu laiku“, t. y. 1 s sprendinio apskaičiuojant / atvaizduojant per 1 s arba sparčiau. | Laisva |
|  | Gytis Sliaužys, gytis.sliauzys@ff.vu.lt, (8 5) 223 4553 | Vakuuminės metalų garinimo įrangos automatizavimas, Automation of vacuum thermal evaporation equipment | Šio darbo metu reikės susipažinti su vakuuminio metalų garinimo principais. Išsiaiškinti vakuumo slėgio ir užgarinto sluoksnio storio daviklių veikimo principus. Sukurti sistemą kuri leistų automatiškai užgarinti reikiamo storio metalų sluoksnius.During this work, you will need to familiarize yourself with the principles of vacuum metal evaporation. Understand the operating principles of vacuum pressure and evaporated layer thickness sensors. Create a system that allows automatic evaporation of metal layers of the required thickness. | Laisva |
|  | Gytis Sliaužys, gytis.sliauzys@ff.vu.lt, (8 5) 223 4553 | Mažamolekulinių krūvį pernešančių medžiagų garinimas ir charakterizavimasEvaporation and characterization of small molecular charge-transporting materials | Šio darbo metu, reikės susipažinti su mažamolekulinių medžiagų vakuuminio garinimo ypatumais, išmokti naudotis vakuumine įranga, pasiruošti vakuuminę įrangą mažamolekulinių medžiagų garinimui, pasiruošti padėklus bandinių gamybai. Vakuume, ant paruoštų padėklų, užgarinti mažamolekulines krūvį pernešančias medžiagas. Charakterizuoti gautų bandinių optines, fotoelektrines ir elektrines savybes.During this work, you will need to familiarize yourself with the specifics of vacuum evaporation of small-molecule materials, learn to use vacuum equipment, prepare the vacuum equipment for the evaporation of small-molecule materials, and prepare substrates for sample preparation. In a vacuum, evaporate small-molecule charge-transporting materials onto the prepared substrates. Characterize the optical, photoelectric, and electrical properties of the obtained samples.” | Laisva |
|  | Prof. dr. Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt, +370 5 223 4593 | Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimasModelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids | LT: Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. 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 disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir vandens 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.EN: Ionic liquids are modern and actively studied materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of aqueous mixtures of 3rd-generation ionic liquids using advanced molecular modelling methods, such as classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University. | Laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,Saulėtekio al. 3, A327+370 (5)223 4556 | 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 | Metodika leidžia nustatyti dielektrinio sluoksnio pradinio įe­lektrinimo metu vykstančius krūvininkų dinamikos procesus. Tiria­mąją medžiagą charakterizuojame visa eile parametrų, tokių kaip ribinis įelektrėjimo potencialas, paviršinio krūvio injekcijos srovių dydis, efektinė dielektrinė skvarba bei dielektrinis storis ir kt. Darbo metu matuojame naujai sintetintų cheminių medžiagų voltkulonines bei voltfaradines charakteristikas, aiškinamės jų tinkamumą foto­voltinio prietaiso (saulės elemento) gamybai. | Laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,Saulėtekio al. 3, A327+370 (5)223 4556 | Drėgmės difuzija mikroceliuliozės dangose, paveikus jas elektrinio išlydžio ore jonais Diffusion of moisture in microcellulose coatings exposed to electric discharge ions in air | Pasaulyje kuriamos technologijos, kuriose popieriaus pakuotėje nenaudojamas plastikas, o 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 tyrinėjama elektrinio išlydžio ore jonų poveikio įtaka tokių dangų atsparumui vandens garų pralaidumui.  | Laisva |
|  | Sonata Adomavičiūtė-Grabusovėsonata.adomaviciute@ff.vu.lt, +37052234596 | Lakųjų organinių junginių spektrinis aptikimas ore naudojant SERS metodąSpectral Detection of Volatile Organic Compounds in Air Using SERS |  | Laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas MačernisTel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt | DNR kirpimo mechanizmo tyrimas tankio funkcionalų metodais su superkompiuteriuDNA Restriction endonuclease cleavage mechanisms DFT study using supercomputers | BCNI baltymas atpažįsta ir nukerpa tam tikras DNR sekas. Atpažinimo ir kirpimo mechanizmas nėra suprastas, tad reikalingas QM/MM modeliavimas. Darbo tikslas ištirti kaip ir kurios DNR struktūrinės dalys sudaro ryšius su BcnI baltymu. Darbo rezultatai patikslins apytiksliai žinomas BCNI aktyvių centrų atomų padėtis, bei kur ir kokie susidaro ryšiai tarp DNR ir BcnI baltymo. Darbe reikės paruošti apie 2 tūkst. atomų baltymų struktūras AMBER paketui. Atlikti DFT skaičiavimus su Gaussian 16 paketu. Skaičiavimai bus atliekamai su Fizikos fakultete esančiu superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [1].Literatūra[1] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022The BCNI protein recognizes and cuts specific DNA sequences. The mechanism of recognition and scission is not understood, so QM/MM simulations are required. The aim of the work is to investigate how and which structural parts of DNA form connections with the BcnI protein. The results of the work will clarify the approximately known position of the atoms of the active centers of BCNI, as well as where and what connections are formed between DNA and the BcnI protein. About 2 thousand will need to be prepared at work. atomic protein structures for the AMBER package. Perform DFT calculations with the Gaussian 16 package. Calculations will be performed with the "VU HPC" Saulėtekis supercomputer at the Faculty of Physics, using SLURM and Webmo systems [1].Literature [1] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022 | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Kristalų formavimas iš augalinių riebalų rugščių ir jų fizikinių savybių tyrimasFormation of Crystals from Vegetable Fatty Acids and Investigation of Their Physical Properties | Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas kambario temperatūroje yra vienos įdomiausių tyrimų objektų. Įvairūs riebalų rugščių gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančią ir mechaniškai kiečiausią kristalinę formą. Šios struktūros yra taikomos ne tik maisto (šokolado gamyboje), bet ir galėtų būti taikomos elektronikos ir sunkiojoje pramonėse. Šiame darbe formuosite riebalų rūgščių kristalus su optimizuotu temperatūriniu stendu ir analizuosite juos rentgeno spindulių difrakcijos metodais (naujuoju Rigaku SmartLab spektrometru). | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Plonų sluoksnių gamyba iš organinių mažamolekulinių medžiagų ir jonizuojančios spinduliuotės poveikio tyrimasFabrication of Thin Films from Organic Small Molecular Materials and Investigation of the Effects of Ionizing Radiation | Organinės technologijos yra sparčiai besivystanti sritis, kurioje kuriamos naujos kartos elektronikos ir optoelektronikos priemonės (OLED, saulės elementai, organiniai tranzistoriai ir įv. jutikliai). Mažamolekuliniai organiniai junginiai, pasižymi santykinai maža molekuline mase, tačiau inkorporuojant į juos sunkiuosius elementus (pvz., F, Cl, Br, I), jie įgauna savybę geriau sugerti jonizuojančią spinduliuotę. Šios lietuvių chemikų sintetinamos medžiagos yra perspektyvios medicinos prietaisų ir radiacijos jutiklių srityse. Darbo metu formuosite organinius mažamolekulinius sluoksnius ir tirsite jų elektrines savybes, ypatingą dėmesį skiriant jonizuojančios spinduliuotės poveikiui. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Stilbenoidinių kristalinių struktūrų modeliavimas iš eksperimentinių rentgenostruktūrinių spektrųModeling of Stilbenoid Crystal Structures from Experimental X-ray Diffraction Spectra | Stilbeno kristalai pasižymi unikaliomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis. Tokios medžiagos dar besikuriant šiuolaikinei elektronikai buvo taikomos neutronų detektavimo prietaisuose. Pastaraisiais metais ypatingai išpopuliarėjo stilbenoidai - medžiagos randamos tam tikrų augalų šakniagumbiuose, vynuogėse ir vartojamos kaip maisto papildai, jomis domisi farmakologai dėl antioksidacinių savybių bei gero pasisavinimo. Didžiąja dalimi šios savybės yra nulemtos jų pakavimosi į kristalinius darinius. Šių kristalų spektrai ChFI laboratorijoje yra matuojami rentgeno difrakcijos matavimais, tačiau norint tiksliau nusakyti erdvinę struktūrą molekulių išsidėstymas turi būti modeliuojamas ir skaičiavimų resultatai lyginami su eksperimentais. Darbas vykdomas kartu su modeliavimo moksline grupe skaičiavimams pasitelkiant superkompiuterį. | Laisva |
|  | Vytautas KlimavičiusVytautas.klimavicius@ff.vu.lt+370 5 223 4588 | Katecholio pagrindo polimerų kietojo kūno BMR tyrimasSolid State NMR study of Catechol based polymers | Tirs katecholio pagrindo polimerus kietojo kūno BMR metodaisStudent will investigate catechol based polymers using solid state NMR | Užimta |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Terpės poliškumo poveikio BODIPY klasės molekulių struktūrai tyrimasStudy of the effect of medium polarity on the structure of BODIPY derivatives | 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, kiek BODIPY klasės junginių struktūra yra jautri aplinkinės terpės poliškumui, naudojant PCM tirpiklio modelį. | Užimta |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,Saulėtekio al. 3, A327+370 (5)223 4556 | Fotovoltinių sluoksnių voltamperinės charakteristikos ir jų spektriniai tyrimaiVoltammetric characteristics of photovoltaic layers and their spectral studies | Fotovoltinio prietaiso (pvz. saulės elemento), įjungto į atitinkamą elektronikos grandinę, veiksena esmingai priklauso nuo jo voltamperinės bei voltkandelinės charakteristikų. Institute gaminami fotovoltiniai sluoksniai iš naujai sinetina­mų cheminių medžiagų, todėl tyrinėjant tokių sluoksnių voltamperinių charakteristikų spektrines savybes, galime spręsti apie jų tinkamumą galutiniam elektronikos gaminiui.Darbo metu matuojame voltamperines charakteristikas apšviečiant medžiagą pasirinkto bangos ilgio monochromatine šviesa. Ieškome skersaryšinimo cheminės reakcijos įtakos minėtų prietaisų spekt­rinėms savybėms, lemiančioms būsimo fotovoltinio prietaiso našumą. | Užimta |
|  | Laurynas Dagys (laurynas.dagys@ff.vu.lt, +370 65451856) | Fumarato rūgšties izotopomerų BMR išilginės relaksacijos tyrimas NMR longitudinal relaxation study of fumaric acid isotopomers | Metabolitais paremtos MRT kontrastinės medžiagos dažnai yra izotopiškai žymimos chemospecifiškai informacijai gauti. Darbo tikslas yra išsiaiškinti, kokią įtaką šios modifikacijos daro relaksacinėms šių medžiagų savybėms.Isotope labelling is one of the strategies to acquire chemospecific information with metabolite-based MRI contrast agents. The objective of this work is to understand how these modification can influence their relaxation properties. | Užimta |
|  | Justinas Čeponkusjustinas.ceponkus@ff.vu.lt | Virpesinės spektroskopijos ir statistinės analizės metodų taikymai archeologinių radinių tyrimams. Application of infrared spectroscopy with statistical analysis for the studies of archeological findings | Tyrimo tikslas taikant Ramano ir Infraraudonosios sugerties spektrinius metodus, identifikuoti skirtingų kilmės vietų keramikas. Studentui bus keliama užduotis atlikti skirtingų dirbinių spektrinius tyrimus bei duomenų klasifikaciją naudojant statistinius metodusThe aim of the topic is using Raman and Infrared absorption spectral methods to identify ceramics from different origin locations. The student will be tasked with conducting spectral analyses of various artifacts and classifying the data using statistical methods. | Užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas MačernisTel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Stilbeno ir kitų struktūrų galimų kompleksų modeliavimas taikant molekulių dinamiką.Modeling of possible complexes of stilbene and other structures using molecular dynamics. | Stilbenai pasižymi unikaliomis optinėmis ir biologinėmis savybėmis. Darbo bus nagrinėjami galimi stilbeno ir kitų struktūrų kompleksai, pasitelkiant molekulių dinamikos metodus. Taip siekiama suprasti šių struktūrų sąveikų mechanizmus, stabilumą ir kitas svarbias savybes. Skaičiavimams bus naudojami Gaussian ir GROMACS paketai.Stilbenes exhibit unique optical and biological properties. The study will examine possible complexes of stilbene and other structures using molecular dynamics methods, aiming to understand the interaction mechanisms, stability, and other important properties of these structures. Calculations will be performed using the Gaussian and GROMACS software packages. | Užimta |
|  | Doc. dr. Mindaugas MačernisTel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Karotinoidų struktūrų analizė panaudojant kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos metodusCarotenoid Structure Analysis Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics Methods | Karotinoidų molekulės plačiai paplitusios gyvojoje gamtoje, tačiau ne visos jų fizikinės savybės iki galo ištirtos. Šiame darbe bus nagrinėjamos karotinoidų struktūros, taikant kvantinės chemijos (ADC, DFT, TD-DFT) ir molekulių dinamikos metodus. Darbe bus nagrinėjamos jų fotofizikinės savybės, įskaitant sugerties ir Ramano spektrus, siekiant atskleisti esminius struktūros ir funkcijos ryšius. Skaičiavimams bus naudojami Gaussian, Q-Chem ir AMBER paketai.Carotenoid molecules are widely distributed in living organisms, yet not all of their physical properties have been fully investigated. In this study, carotenoid structures will be examined using quantum chemistry (ADC, DFT, TD-DFT) and molecular dynamics methods. The work will focus on their photophysical properties, including absorption and Raman spectra, aiming to reveal essential structure–function relationships. Calculations will be performed using the Gaussian, Q-Chem, and AMBER software packages. | Užimta |
|  | K. Genevičiuskristijonas.genevicius@ff.vu.lttel.: 85 233 4553 | Krūvininkų prilipimo įtaka ekstrakcinių srovių kinetikomsThe influence of charge carrier trapping on extraction current kinetics | Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos modeliavimas baigtinių skirtumų metodu.Charge carrier transport and recombination modeling by finite differences method | Užimta |
|  | Liudas Tumonis | Elektrinio šiluminio raketinio variklio savitojo impulso vakuume tyrimas |  | Užimta |
|  | Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lttel. 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  | Ličio jonų kondensatorių tyrimas. Investigation of Li-ion capacitors. | Ličio jonų kondensatorius pasižymididžiausia tarp visų kondensatorių sukaupiama energija ir nedidele savaimine iškrova. Tačiau jis turi ir baterijoms būdingų savybių- minimalią įtampą, gana ribotą gabaritinę galią ir charakteristikų blogėjimą nuo persikrovimo ciklų kiekio. Šio darbo užduotis būtų ištirti charakteristikas, kurios nėra normuojamos gamintojų dokumentacijoje, tačiau yra labai svarbios taikymuose- ypač darbo ribiniuose režimuose ir perkrovų pasekmes. | Užimta |
|  | Dr. Vygintas Jankauskas, vygintas.jankauskas@ff.vu.lt, 85 223 4557 | Naujų bipolinių organinių medžiagų fotoelektrinių savybių tyrimai Study of photovoltaic properties of new bipolar organic materials | Šiame darbe reiks atlikti naujų medžiagų, kurios galėtų būti bipolinės, krūvininkų pernašos tyrimą, nustatyti pernašos parametrus.This work involves studying the charge transport of new materials that could be bipolar, and determining the transport parameters. | Užimta |
|  | Dr. Vygintas Jankauskas, vygintas.jankauskas@ff.vu.lt, 85 223 4557 | Krūvio pernašos savybių tyrimas naujų organinių medžiagų sluoksniuse XTOF metodaisInvestigation of charge transport properties in layers of novel organic materials using XTOF methods | Greitaeigiais fotosignalo integratoriais bei stiprintuvais ištirti krūvio pernašos savybes naujų medžiagų sluoksniuose. To study the charge transport properties in layers of new materials using high-speed photosignal integrators and amplifiers  | Užimta |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Struktūrizuotų lanksčių elektrodų gamyba ir jų taikymas biologinių objektų impedanso spektrometrijoje Fabrication of Structured Flexible Electrodes and Their Application in Impedance Spectrometry of Biological Objects | Organiniai biojutikliai yra naujos kartos jutikliai, kuriuose tradicinės neorganinės medžiagos keičiamos organinėmis. Šios organinės medžiagos, dažnai pasižyminčios unikaliomis elektroninėmis savybėmis, leidžia kurti lankstesnius, pigesnius ir jautresnius biojutiklius, kurie gali būti pritaikyti įvairioms biomedicinos ir aplinkosaugos sritims. Pagrindinis stebėjimo metodas – impedanso spektrometrija, leidžianti tiksliai analizuoti sąveikas tarp biologinių objektų ir jutiklių paviršiaus. Šio darbo tikslas – sukurti lanksčias organines struktūras, skirtas mikroorganizmų stebėjimui, ištirti jų veikimą ir elektrines savybes. | Užimta |
|  | Darius Abramavičiusdarius.abramavičius@ff.vu.lt | Molekulinių nanovamzdelių ir jų optinių spektrų modeliavimasModeling of the molecular nanotubes and their optical spectra | Molekuliniai nanovamzdeliai yra dažnai randamos struktūrinės molekulių dažiklių saviorganizacijos formos. Jų optines savybes lemia tarpmolekulinės sąveikos. Darbe bus modeliuojami nanovamzdelių optiniai spektrai naudojant Frenkelio eksitonų modelį. Molecular nanotubes are a commonly found structural form of self-organization of molecular dyes. Their optical properties are determined by intermolecular interactions. The project will focus on simulation of the optical spectra of nanotubes using the Frenkel exciton model. | Užimta |

**Baigiamasis darbas magistras** (IIk Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Fotonika ir nanotechnologijos, Gyvybės ir cheminė fizika, Lazerinė fizika ir optinės technologijos, Lazerinė technologija, Teorinė fizika ir astrofizika )

**Final master’s thesis II year**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta  |
|  | Prof. dr. Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt, +370 5 223 4593 | Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimasModelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. 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 disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir vandens 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.Ionic liquids are modern and actively studied materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of aqueous mixtures of 3rd-generation ionic liquids using advanced molecular modelling methods, such as classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Kristalų formavimas iš augalinių riebalų rugščių ir jų fizikinių savybių tyrimasFormation of Crystals from Vegetable Fatty Acids and Investigation of Their Physical Properties | Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas kambario temperatūroje yra vienos įdomiausių tyrimų objektų. Įvairūs riebalų rugščių gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančią ir mechaniškai kiečiausią kristalinę formą. Šios struktūros yra taikomos ne tik maisto (šokolado gamyboje), bet ir galėtų būti taikomos elektronikos ir sunkiojoje pramonėse. Šiame darbe formuosite riebalų rūgščių kristalus su optimizuotu temperatūriniu stendu ir analizuosite juos rentgeno spindulių difrakcijos metodais (naujuoju Rigaku SmartLab spektrometru). | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Stilbenoidinių kristalinių struktūrų modeliavimas iš eksperimentinių rentgenostruktūrinių spektrųModeling of Stilbenoid Crystal Structures from Experimental X-ray Diffraction Spectra | Stilbeno kristalai pasižymi unikaliomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis. Tokios medžiagos dar besikuriant šiuolaikinei elektronikai buvo taikomos neutronų detektavimo prietaisuose. Pastaraisiais metais ypatingai išpopuliarėjo stilbenoidai - medžiagos randamos tam tikrų augalų šakniagumbiuose, vynuogėse ir vartojamos kaip maisto papildai, jomis domisi farmakologai dėl antioksidacinių savybių bei gero pasisavinimo. Didžiąja dalimi šios savybės yra nulemtos jų pakavimosi į kristalinius darinius. Šių kristalų spektrai ChFI laboratorijoje yra matuojami rentgeno difrakcijos matavimais, tačiau norint tiksliau nusakyti erdvinę struktūrą molekulių išsidėstymas turi būti modeliuojamas ir skaičiavimų resultatai lyginami su eksperimentais. Darbas vykdomas kartu su modeliavimo moksline grupe skaičiavimams pasitelkiant superkompiuterį. | Laisva |
|  | Habil. Dr. Gediminas Niaura (el-paštas gediminas.niaura@gmc.vu.lt; gediminas.niaura@ftmc.lt; +370 68645026 | Gyvybės ir cheminė fizika:Ultravioletinė paviršiaus sustiprinta Raman spektroskopija: biomolekulių tyrimai Life and Chemical Physics: Utraviolet surface-enhanced Raman spectroscopy: study of biomolecules | Planuojama pritaikyti UV-SERS metodą biomolekulių nustatymui ir jų struktūros tyrimuose. Dauguma biomolekulių pasižymi elektronine sugertimi UV srityje. Tokiu atveju galima tikėtis, kad Ramano sklaida bus stiprinima ne tik paviršiaus nanostruktūrų bet ir rezonansiškai. Taigi, galima tikėtis nustatyti biomolekules esant itin mažosms koncentracijoms ir ištirti adsorbuotų biomolekulių struktūrą / It is planned to apply the UV-SERS method to the detection of biomolecules and their structure studies. Most biomolecules are characterized by electronic absorption in the UV region. In this case, it is expected that Raman scattering will be enhanced not only by surface nanostructures but also resonantly. Thus, it is expected to detect biomolecules at extremely low concentrations and study the structure of adsorbed biomolecules. | Laisva |
|  | Vytautas KlimavičiusVytautas.klimavicius@ff.vu.lt+370 5 223 4588 | Na3-xV2-xTix(PO4)3 beterijų medžiagų ir baterijų kietojo kūno BMR tyrimas Solid state NMR investigation of Na3-xV2-xTix(PO4)3 batterymaterials and batteries | Tirs baterijas ir baterijų medžiagas kietojo kūno BMR metodaisStudent will investigate batteries and battery materials using solid state NMR | Užimta |

**Mokslo tiriamasis darbas I** ( Ik. Cheminė fizika; Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Fotonika ir nanotechnologijos, Lazerinė fizika ir optinės technologijos, Lazerinė technologija)
**Reasearch work I**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta  |
|  | Darius Abramavičiusdarius.abramavičius@ff.vu.lt | Kvantinių sistemų netiesinių eksitonų lygčių metodo vystymasDevelopment of nonlinear exciton equations for quantum systems | Atvirųjų kvantinių sistemų relaksacija gali būti modeliuojama įvairiais metodais. Netiesinės eksitonų lygtys (NEE) naudojamos molekulių spektrų modeliavimui. Darbe bus susipažįstama su NEE, jos bus adaptuojamos modeliuoti vibroninius molekulių sužadinimus. The relaxation of open quantum systems can be modeled by various methods. Nonlinear exciton equations (NEEs) are used to model the spectra of molecules. The project will focus on NEE, their adaptation and implementation for modeling vibronic excitations of molecules. | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Mašinų mokymo metodų taikymas molekulių savybių tyrimams naudojant tankio funkcionalo teoriją papildytiUsing machine learning to augment density-functional molecular modeling | Tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai, duomenų analizė ir panaudojimas mašinų mokymo modeliams (įskaitant generatyvinius DI modelius), siekiant perkelti chemines įžvalgas į algoritmus | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Simvastatino sukeltų klampos pokyčių lipidinėje membranoje modeliavimasModeling of simvastatin-induced viscosity changes in a lipid membrane | Hidrodinamikos ir molekulių dinamikos skaičiavimai, siekiant suprasti stebimus reiškinius savito dizaino eksperimentinėje sistemoje | Laisva |
|  | Prof. dr. Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt, +370 5 223 4593 | Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimasModelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. 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 disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir vandens 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.Ionic liquids are modern and actively studied materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of aqueous mixtures of 3rd-generation ionic liquids using advanced molecular modelling methods, such as classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University. | Laisva |
|  | K. Genevičiuskristijonas.genevicius@ff.vu.lttel.: 85 233 4553 | Foto sužadintų krūvininkų ištraukimas dariniuose metalas-dielektrikas – puslaidininkisExtraction of photogenerated charge carriers in metal-dielectric-semiconductor structures | Fotogeneruotų elektronų ir (arba) skylių pernašos parametrų tyrimas MIS-CELIV metodika.Study of photogenerated electron and/or hole transport using MIS-CELIV method. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Struktūrizuotų lanksčių elektrodų gamyba ir jų taikymas biologinių objektų impedanso spektrometrijoje Fabrication of Structured Flexible Electrodes and Their Application in Impedance Spectrometry of Biological Objects | Organiniai biojutikliai yra naujos kartos jutikliai, kuriuose tradicinės neorganinės medžiagos keičiamos organinėmis. Šios organinės medžiagos, dažnai pasižyminčios unikaliomis elektroninėmis savybėmis, leidžia kurti lankstesnius, pigesnius ir jautresnius biojutiklius, kurie gali būti pritaikyti įvairioms biomedicinos ir aplinkosaugos sritims. Pagrindinis stebėjimo metodas – impedanso spektrometrija, leidžianti tiksliai analizuoti sąveikas tarp biologinių objektų ir jutiklių paviršiaus. Šio darbo tikslas – sukurti lanksčias organines struktūras, skirtas mikroorganizmų stebėjimui, ištirti jų veikimą ir elektrines savybes. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Kristalų formavimas iš augalinių riebalų rugščių ir jų fizikinių savybių tyrimasFormation of Crystals from Vegetable Fatty Acids and Investigation of Their Physical Properties | Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas kambario temperatūroje yra vienos įdomiausių tyrimų objektų. Įvairūs riebalų rugščių gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančią ir mechaniškai kiečiausią kristalinę formą. Šios struktūros yra taikomos ne tik maisto (šokolado gamyboje), bet ir galėtų būti taikomos elektronikos ir sunkiojoje pramonėse. Šiame darbe formuosite riebalų rūgščių kristalus su optimizuotu temperatūriniu stendu ir analizuosite juos rentgeno spindulių difrakcijos metodais (naujuoju Rigaku SmartLab spektrometru). | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Plonų sluoksnių gamyba iš organinių mažamolekulinių medžiagų ir jonizuojančios spinduliuotės poveikio tyrimasFabrication of Thin Films from Organic Small Molecular Materials and Investigation of the Effects of Ionizing Radiation | Organinės technologijos yra sparčiai besivystanti sritis, kurioje kuriamos naujos kartos elektronikos ir optoelektronikos priemonės (OLED, saulės elementai, organiniai tranzistoriai ir įv. jutikliai). Mažamolekuliniai organiniai junginiai, pasižymi santykinai maža molekuline mase, tačiau inkorporuojant į juos sunkiuosius elementus (pvz., F, Cl, Br, I), jie įgauna savybę geriau sugerti jonizuojančią spinduliuotę. Šios lietuvių chemikų sintetinamos medžiagos yra perspektyvios medicinos prietaisų ir radiacijos jutiklių srityse. Darbo metu formuosite organinius mažamolekulinius sluoksnius ir tirsite jų elektrines savybes, ypatingą dėmesį skiriant jonizuojančios spinduliuotės poveikiui. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Stilbenoidinių kristalinių struktūrų modeliavimas iš eksperimentinių rentgenostruktūrinių spektrųModeling of Stilbenoid Crystal Structures from Experimental X-ray Diffraction Spectra | Stilbeno kristalai pasižymi unikaliomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis. Tokios medžiagos dar besikuriant šiuolaikinei elektronikai buvo taikomos neutronų detektavimo prietaisuose. Pastaraisiais metais ypatingai išpopuliarėjo stilbenoidai - medžiagos randamos tam tikrų augalų šakniagumbiuose, vynuogėse ir vartojamos kaip maisto papildai, jomis domisi farmakologai dėl antioksidacinių savybių bei gero pasisavinimo. Didžiąja dalimi šios savybės yra nulemtos jų pakavimosi į kristalinius darinius. Šių kristalų spektrai ChFI laboratorijoje yra matuojami rentgeno difrakcijos matavimais, tačiau norint tiksliau nusakyti erdvinę struktūrą molekulių išsidėstymas turi būti modeliuojamas ir skaičiavimų resultatai lyginami su eksperimentais. Darbas vykdomas kartu su modeliavimo moksline grupe skaičiavimams pasitelkiant superkompiuterį. | Laisva |
|  | Valdas ŠablinskasValdas.sablinskas@ff.vu.lt, +37052234596 | Heterociklinių organinių molekulių konformaciniai tyrimai spektriniais metodaisConformational studies of organic heterocyclic molecules by means of spectroscopic methods | Bus atliekami heterociklinių organinių molekulių Ramano sklaidos ir IR sugerties spektriniai eksperimentai bei teoriniai struktūriniai skaičiavimai.Will be performed Raman and IR absorption spectroscopic experiments of heterocyclic organic molecules and their structures will be calculated theoretically. | Laisva |
|  | Jogilė Mačytėjogile.macyte@ff.vu.lt, +37052234596 | Cyclohexyltrifluorosilano struktūrinė analizė virpesinės spektroskopijos metodaisStructural analysis of Cyclohexyltrifluorosilane by means of vibrational spectroscopy | Bus atliekami Cyclohexyltrifluorosilano Ramano sklaidos ir IR sugerties spektriniai eksperimentai bei teoriniai struktūriniai skaičiavimai.Will be performed Raman and IR absorption spectroscopic experiments of Cyclohexyltrifluorosilane and its structure will be calculated theoretically. | Laisva |
|  | Habil. Dr. Gediminas Niaura (el-paštas gediminas.niaura@gmc.vu.lt; gediminas.niaura@ftmc.lt; +370 68645026 | Cheminė fizika:Nanostruktūrų paieška ultravioletinei paviršiaus sustiprintai Ramano spektroskopijai Chemical Physics: Searching for nanostructures for ultraviolet surface-enhanced Raman spectroscopy | UV-SERS metodas įgalina analizuoti itin mažas koncentracijas molekulių arba jonų pasižyminčių elektronine sugertimi UV spektro srityje dėl papildomo rezonansinio Ramano spektrų stiprinimo. Metodo jautris kritiškai priklauso nuo naudojamų nanostruktūrų paviršiaus stiprinimui. Taigi, mokslinio darbo metu bus tiriamas įvairių metalinių ir hibridinių nanostruktūrų tinkamumas UV-SERS, panaudojant standartines molekules (adeninas ir kitos)The UV-SERS method enables the analysis of extremely low concentrations of molecules or ions with electronic absorption in the UV spectral region due to additional resonance enhancement of Raman spectra. The sensitivity of the method critically depends on the nanostructures used for surface enhancement. Thus, the suitability of various metallic and hybrid nanostructures for UV-SERS will be investigated during the research work, using standard molecules (adenine and others). | Laisva |
|  | rimante.bandzeviciute@ff.vu.lt, +37052234595 | Šviesolaidinio zondo pritaikymas fluorescencijos in situ žadinimui ir detektavimui giliuose biologiniuose audiniuoseApplication of optical fiber probe for in situ excitation and detection of fluorescence signal from bulk biological tissue | Standartinis medicininis šviesolaidinis zondas, skirtas endoskopiniam audinių vaizdinimui operacijų metu, bus įdiegtas į fluorescencinį spektrometrą ir atliktas jo testavimas gyvulinės kilmės smegenų audinyje.Standard medical optical fiber probe, used for endoscopic tissue visualizing during a surgery, will be installed into a fluorescence spectrometer and tested on animal brain tissue. | Laisva |
|  | Sonata Adomavičiūtė-Grabusovėsonata.adomaviciute@ff.vu.lt, +37052234596 | Vabzdžių feromonų detekcija ore spektriniu SERS metodu Detection of Insect Pheromones in Air Using Spectral SERS Method |  | Laisva |
|  | Sonata Adomavičiūtė-Grabusovėsonata.adomaviciute@ff.vu.lt, +37052234596 | Nanodalelių sintezės optimizavimas siekiant geresnio SEIRA efektoOptimization of Nanoparticle Synthesis for Enhanced SEIRA Effect |  | Laisva |
|  | Sonata Adomavičiūtė-Grabusovėsonata.adomaviciute@ff.vu.lt, +37052234596 | Dviejų šviesolaidžių sistemos modeliavimas taikymui SERS spektroskopijojeModeling of a Dual Optical Fiber System for Application in SERS Spectroscopy |  | Laisva |
|  | Vytautas KlimavičiusVytautas.klimavicius@ff.vu.lt+370 5 223 4588 | Cholino lizinato DOSY tyrimasDOSY investigation of Choline Lysinate | Tirs joninius skysčius BMR metodaisNMR investigation of Ionic Liquids  | Užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų injekcijos tyrimai naujose organinėse medžiagose, skirtose lauko tranzistoriamsInvestigation of charge carrier injection in new organic materials designed for field-effect transistors | Šiame darbe bus tiriama krūvininkų injekcija į organines medžiagas ir ekstrakcija iš jų. Bus analizuojami injekcijos efektyvumo klausimai ir kylantys iššūkiai pritaikant šias medžiagas organiniams lauko tranzistoriams.This work will investigate the injection of charge carriers into organic materials and their extraction from them. The study will analyze issues related to injection efficiency and the challenges that arise when using these materials for organic field-effect transistors. | Užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos tyrimai organinių donorinių – akceptorinių medžiagų mišiniuoseInvestigation of charge carrier transport and recombination in organic donor-acceptor material blends | Gaminant donorinių-akceptorinių medžiagų mišinius saulės elementams, iškyla daug problemų, tokių, kaip kai kurių medžiagų kristalizacija, suderinamumas tarpusavyje ir mišinio sudėties optimizavimas. When producing donor-acceptor material blends for solar cells, numerous challenges arise, such as the crystallization of certain materials, compatibility between them, and optimization of the blend composition.  | Užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Naujų skersaryšinamų organinių medžiagų taikymas perovskitinėse saulės celėseThe application of new cross-linkable organic materials in perovskite solar cells | Ši tema skirta atskleisti naujai susintetintų organinių medžiagų pritaikymo galimybes perovskitinėse saulės celėse.This work will explore the potentional use of innovative cross-linkable organic materials to enhance the performance and stability of perovskite solar cells. | Užimta |
|  | Vytautas KlimavičiusVytautas.klimavicius@ff.vu.lt+370 5 223 4588 | Halofosfatų 35,37Cl kietojo kūno BMR tyrimas35,37Cl NMR investigation of halophosphates | Tirs BMR metodais halofostatusHalophosphate investigation using NMR | Užimta |
|  | Justinas Čeponkusjustinas.ceponkus@ff.vu.lt | Mažai lakių molekulių matricinės izoliacijos spektroskopijos tyrimaiMatrix isolation Spectroscopy of low-volatility molecules  | Tyrimo tikslas, išmokti vykdyti matricinės izoliacijos eksperimentus dirbant su mažą sočių garų slėgį turinčiomis molekulėmis. Nustatyti galimybe taikyti šį metodą, vaistuose naudojamų molekulinių darinių struktūros, stabilumo ir sąveikos su aplinkos molekulėmis tokiomis kaip vanduo CO2 ir panašiai, tyrimams. The aim of the study is to learn how to conduct matrix isolation experiments when working with molecules with low saturated vapor pressure. To determine the possibility of applying this method to the studies of the structure, stability and interaction of molecular derivatives used in medicines with environmental molecules such as water, CO2 and the like. | Užimta |

**Mokslo tiriamasis darbas II** (Ik. Teorinė fizika ir astrofizika)

**Research work II (for Theoretical physics and astrophysics students)**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta  |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Mašinų mokymo metodų taikymas molekulių savybių tyrimams naudojant tankio funkcionalo teoriją papildytiUsing machine learning to augment density-functional molecular modeling | Tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai, duomenų analizė ir panaudojimas mašinų mokymo modeliams (įskaitant generatyvinius DI modelius), siekiant perkelti chemines įžvalgas į algoritmus | Laisva  |
|  | dr. Stepas Toliautas*stepas.toliautas@ff.vu.lt*(05) 223 4661 | Simvastatino sukeltų klampos pokyčių lipidinėje membranoje modeliavimasModeling of simvastatin-induced viscosity changes in a lipid membrane | Hidrodinamikos ir molekulių dinamikos skaičiavimai, siekiant suprasti stebimus reiškinius savito dizaino eksperimentinėje sistemoje | Laisva |
|  | Prof. dr. Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt, +370 5 223 4593 | Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimasModelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. 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 disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir vandens 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.Ionic liquids are modern and actively studied materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of aqueous mixtures of 3rd-generation ionic liquids using advanced molecular modelling methods, such as classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University. | Laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767) | Stilbenoidinių kristalinių struktūrų modeliavimas iš eksperimentinių rentgenostruktūrinių spektrųModeling of Stilbenoid Crystal Structures from Experimental X-ray Diffraction Spectra | Stilbeno kristalai pasižymi unikaliomis optinėmis ir elektrinėmis savybėmis. Tokios medžiagos dar besikuriant šiuolaikinei elektronikai buvo taikomos neutronų detektavimo prietaisuose. Pastaraisiais metais ypatingai išpopuliarėjo stilbenoidai - medžiagos randamos tam tikrų augalų šakniagumbiuose, vynuogėse ir vartojamos kaip maisto papildai, jomis domisi farmakologai dėl antioksidacinių savybių bei gero pasisavinimo. Didžiąja dalimi šios savybės yra nulemtos jų pakavimosi į kristalinius darinius. Šių kristalų spektrai ChFI laboratorijoje yra matuojami rentgeno difrakcijos matavimais, tačiau norint tiksliau nusakyti erdvinę struktūrą molekulių išsidėstymas turi būti modeliuojamas ir skaičiavimų resultatai lyginami su eksperimentais. Darbas vykdomas kartu su modeliavimo moksline grupe skaičiavimams pasitelkiant superkompiuterį. | Laisva |
|  | Darius Abramavičiusdarius.abramavičius@ff.vu.lt | Kvantinių sistemų variacinės teorijos vystymasDevelopment of variational theory for quantum systems | Atvirųjų kvantinių sistemų relaksacija gali būti modeliuojama įvairiais metodais. Variacinė teorija atvirosioms kvantinėms sistemoms yra stochastinis metodas, kuris gali būti taikomas relaksacijos modeliavimui. Darbe bus susipažįstama su variaciniu dinaminiu metodu ir jis taikomas modeliuoti kvantinės sistemos tankio matricą. The relaxation of open quantum systems can be modeled by various methods. Variational theory for open quantum systems is a stochastic method that can be applied to simulations of relaxation problems. The project will focus on the variational dynamical method and application of it to a model quantum system. | Laisva |
|  | Darius Abramavičiusdarius.abramavičius@ff.vu.lt | Kvantinių sistemų poliaronų teorijos vystymasDevelopment of polaron theory for quantum systems | Atvirųjų kvantinių sistemų relaksacija gali būti modeliuojama įvairiais metodais. Poliaronų teorija galimai yra tikslesnis metodas nei tiesioginė trikdžių teorija. Darbe bus susipažįstama su poliaronų transformacija ir ji pritaikoma modeliuoti modelinės sistemos tankio matricą. The relaxation of open quantum systems can be modeled by various methods. Polaron theory is potentially a more accurate method than direct perturbation theory. The project will focus on introducing the polaron transformation and applying it to model the density matrix of a model system. | Užimta |