

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

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
1.	dr. Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt (05) 223 4661	Hidrodinamikos uždavinių nestabilių sprendinių vizualizavimas realiu laiku Real-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
2.	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 vakuomo 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
3.	Gytis Sliaužys, gytis.sliauzys@ff.vu.lt , (8 5) 223 4553	Mažamolekulinių krūvi pernešančių medžiagų garinimas ir charakterizavimas Evaporation 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 krūvi pernešančias medžiagas. Charakterizuoti gautų bandinių optines, fotoelektrines ir elektrines savybes.	Laisva

			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.”	
4.	Prof. dr. Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt , +370 5 223 4593	Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimas Modelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids	LT: Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulių 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 molekuliniam lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir vandens mišinių struktūra ir branduolių magnetinio rezonanso spektrai taikant modernius molekulių sistemų modeliavimo metodus – klasikinės 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	Laisva

			<p>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.</p>	
5.	<p>Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt, Saulėtekio al. 3, A327 +370 (5)223 4556</p>	<p>Krūvininkų dinamikos tyrimai dielektriniuose fotovoltinių prietaisų sluoksniuose dozuoto įelektrinimo-išelektrinimo metodu</p> <p>Studies of the dynamics of charge carriers in the dielectric layers of photovoltaic devices using the dosed charge-discharge method</p>	<p>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.</p>	Laisva
6.	<p>Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt, Saulėtekio al. 3, A327 +370 (5)223 4556</p>	<p>Drėgmės difuzija mikroceliuliozės dangose, paveikus jas elektrinio išlydžio ore jonais</p> <p>Diffusion of moisture in microcellulose coatings exposed to electric discharge</p>	<p>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</p>	Laisva

		ions in air	išlydžio ore jonų poveikio įtaka tokių dangų atsparumui vandens garų pralaidumui.	
7.	Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė sonata.adomaviciute@ff.vu.lt , +37052234596	Lakųjų organinių junginių spektrinis aptikimas ore naudojant SERS metodą Spectral Detection of Volatile Organic Compounds in Air Using SERS		Laisva
8.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	DNR kirpimo mechanizmo tyrimas tankio funkcionalių metodais su superkompiuteriu DNA 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 iširti 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 atliekami 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, 2022 The 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	Laisva

			<p>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].</p> <p>Literature [1] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022</p>	
9.	<p>dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767)</p>	<p>Kristalų formavimas iš augalinių riebalų rūgščių ir jų fizikinių savybių tyrimas</p> <p>Formation of Crystals from Vegetable Fatty Acids and Investigation of Their Physical Properties</p>	<p>Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas kambario temperatūroje yra vienos įdomiausių tyrimų objektų. Įvairūs riebalų rūgščių 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).</p>	Laisva
10.	<p>dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 0 662 38767)</p>	<p>Plonų sluoksnių gamyba iš organinių mažamolekulinių medžiagų ir jonizuojančios spinduliuotės poveikio tyrimas</p>	<p>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</p>	Laisva

		Fabrication of Thin Films from Organic Small Molecular Materials and Investigation of the Effects of Ionizing Radiation	santykinais maža molekuline mase, tačiau inkorporuojant į juos sunkiuosius elementus (pvz., F, Cl, Br, I), jie įgauna savybę geriau sugerti jonizuojančią spinduliuotę. Šios lietuvių chemikų sintetamos 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.	
11.	dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt , 0 662 38767)	Stilbenoidinių kristalinių struktūrų modeliavimas iš eksperimentinių rentgenostruktūrinių spektrų Modeling 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 rezultatai lyginami su eksperimentais. Darbas vykdomas kartu su modeliavimo moksline grupe skaičiavimams pasitelkiant superkompiuterį.	Laisva
12.	Vytautas Klimavičius (Vytautas.klimavicius@ff.vu.lt +370 5 223 4588)	Katecholio pagrindo polimerų kietojo kūno BMR tyrimas Solid State NMR study of Catechol based polymers	Tirs katecholio pagrindo polimerus kietojo kūno BMR metodais Student will investigate catechol based polymers using solid state NMR	Užimta

13.	dr. Stepas Toliautas <i>stepas.toliautas@ff.vu.lt</i> (05) 223 4661	Terpės poliškumo poveikio BODIPY klasės molekulių struktūrai tyrimas Study 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
14.	Robertas Maldzius, <i>robertas.maldzius@ff.vu.lt</i> , Saulėtekio al. 3, A327 +370 (5)223 4556	Fotovoltinių sluoksnių voltamperinės charakteristikos ir jų spektriniai tyrimai Voltammetric characteristics of photovoltaic layers and their spectral studies	Fotovoltinio prietaiso (pvz. saulės elemento), įjungto į atitinkamą elektronikos grandinę, veikseną esmingai priklauso nuo jo voltamperinės bei voltkandelinės charakteristikų. Institute gaminami fotovoltiniai sluoksniai iš naujai sintetamų 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 skersaryšinio cheminės reakcijos įtakos minėtų prietaisų spektrinėms savybėms, lemiančioms būsimo fotovoltinio prietaiso našumą.	Užimta
15.	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
16.	Justinas Čeponkus <i>justinas.ceponkus@ff.vu.lt</i>	Virpesinės spektroskopijos ir statistinės analizės metodų	Tyrimo tikslas taikant Ramano ir Infraraudonosios sugerties spektrinius metodus, identifikuoti skirtingų	Užimta

		<p>taikymai archeologinių radinių tyrimams.</p> <p>Application of infrared spectroscopy with statistical analysis for the studies of archeological findings</p>	<p>kilmės vietų keramikas. Studentui bus keliama užduotis atlikti skirtingų dirbinių spektrinius tyrimus bei duomenų klasifikaciją naudojant statistinius metodus</p> <p>The 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.</p>	
17.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>Stilbeno ir kitų struktūrų galimų kompleksų modeliavimas taikant molekulių dinamiką.</p> <p>Modeling of possible complexes of stilbene and other structures using molecular dynamics.</p>	<p>Stilbenai pasižymi unikaliomis optinėmis ir biologinėmis savybėmis.</p> <p>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.</p> <p>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.</p>	Užimta
18.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>Karotinoidų struktūrų analizė panaudojant kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos metodus</p> <p>Carotenoid Structure Analysis Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics Methods</p>	<p>Karotinoidų molekulės plačiai paplitusios gyvojoje gamtoje, tačiau ne visos jų fizikinės savybės iki galo iširtos. 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</p>	Užimta

			<p>esminius struktūros ir funkcijos ryšius. Skaičiavimams bus naudojami Gaussian, Q-Chem ir AMBER paketai.</p> <p>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.</p>	
19.	<p>K. Genevičius kristijonas.genevicius@ff.vu.lt tel.: 85 233 4553</p>	<p>Krūvininkų prilipimo įtaka ekstracinių srovių kinetikoms</p> <p>The influence of charge carrier trapping on extraction current kinetics</p>	<p>Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos modeliavimas baigtinių skirtumų metodu.</p> <p>Charge carrier transport and recombination modeling by finite differences method</p>	Užimta
20.	<p>Liudas Tumonis</p>	<p>Elektrinio šiluminio raketinio variklio savitojo impulso vakuume tyrimas</p>		Užimta
21.	<p>Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948</p>	<p>Aktyvinio elektromagnetinės spinduliuotės filtro taikymo tyrimas. Investigation of active EMI filter application.</p>	<p>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.</p>	Užimta
22.	<p>Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948</p>	<p>Ličio jonų kondensatorių tyrimas. Investigation of Li-ion capacitors.</p>	<p>Ličio jonų kondensatorius pasižymi didžiausia tarp visų kondensatorių sukaupiama energija ir nedidele savaimine iškrova. Tačiau jis turi ir baterijoms būdingų savybių- minimalią įtampą, gana</p>	Užimta

			ribotą gabaritinę galią ir charakteristikų blogėjimą nuo persikrovimo ciklų kiekio. Šio darbo užduotis būtų iširti charakteristikas, kurios nėra normuojamos gamintojų dokumentacijoje, tačiau yra labai svarbios taikymuose- ypač darbo ribiniuose režimuose ir perkrovų pasekmes.	
23.	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
24.	Dr. Vygintas Jankauskas, vygintas.jankauskas@ff.vu.lt , 85 223 4557	Krūvio pernašos savybių tyrimas naujų organinių medžiagų sluoksniuose XTOF metodais Investigation of charge transport properties in layers of novel organic materials using XTOF methods	Greitaiegiais fotosignalo integratoriais bei stiprintuvais iširti 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
25.	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 –	Užimta

			sukurti lanksčias organines struktūras, skirtas mikroorganizmų stebėjimui, ištirti jų veikimą ir elektrines savybes.	
26.	Darius Abramavičius darius.abramavičius@ff.vu.lt	Molekulinių nanovamzdelių ir jų optinių spektrų modeliavimas Modeling 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