

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

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.	Prof. dr. Kęstutis Aidas, <a href="mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt">kestutis.aidas@ff.vu.lt</a> , +370 5 223 4593	Joninių skysčių vandeniniai mišiniai: struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  Modelling structural and NMR properties of aqueous mixtures of ionic liquids	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.  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	Laisva

			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.	
2.	dr. Rokas Dobužinskas ( <a href="mailto:rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt">rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt</a> , 0 662 38767)	Kristalų formavimas iš augalinių riebalų rūgščių ir jų fizikinių savybių tyrimas  Formation 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 rūgščių gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančių ir mechaniškai kiečiausią kristalinę formą. Šios struktūros yra taikomos ne tik maisto (šokolado gamyboje), bet ir galėtų būti taikomos elektronikos ir sunkiojoje pramonėje. Šiame darbe formuosite riebalų rūgščių kristalus su optimizuotu temperatūriniu stendu ir analizuosite juos rentgeno spindulių difrakcijos metodais (naujuoju Rigaku SmartLab spektrometru).	Laisva
3.	dr. Rokas Dobužinskas ( <a href="mailto:rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt">rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt</a> , 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	Laisva

			<p>gero pasisavinimo. Didžiaja 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.</p>	
4.	<p>Habil. Dr. Gediminas Niaura (el-paštas <a href="mailto:gediminas.niaura@gmc.vu.lt">gediminas.niaura@gmc.vu.lt</a>; <a href="mailto:gediminas.niaura@ftmc.lt">gediminas.niaura@ftmc.lt</a>; +370 68645026</p>	<p>Gyvybės ir cheminė fizika: Ultravioletinė paviršiaus sustiprinta Raman spektroskopija: biomolekulių tyrimai</p> <p>Life and Chemical Physics: Ultraviolet surface-enhanced Raman spectroscopy: study of biomolecules</p>	<p>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 stiprinama ne tik paviršiaus nanostruktūrų bet ir rezonansiškai. Taigi, galima tikėtis nustatyti biomolekules esant itin mažoms koncentracijoms ir ištirti adsorbuotų biomolekulių struktūrą /</p> <p>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.</p>	Laisva
5.	<p>Vytautas Klimavičius <a href="mailto:Vytautas.klimavicius@ff.vu.lt">Vytautas.klimavicius@ff.vu.lt</a> +370 5 223 4588</p>	<p><math>\text{Na}_{3-x}\text{V}_{2-x}\text{Ti}_x(\text{PO}_4)_3</math> baterijų medžiagų ir baterijų kietojo kūno BMR tyrimas</p>	<p>Tirs baterijas ir baterijų medžiagas kietojo kūno BMR metodais</p> <p>Student will investigate batteries and battery materials using solid state NMR</p>	Užimta

		Solid state NMR investigation of $\text{Na}_{3-x}\text{V}_{2-x}\text{Ti}_x(\text{PO}_4)_3$ battery materials and batteries		
--	--	--	--	--