**Profesinė praktika** (IV k. 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 |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 8 662 38767) | Biologinių sistemų tyrimas veikiant jonizuojančia spinduliuote  *Ivestigation of Biological Systems Exposed to Ionising Radiation* | Gyvieji organizmai veikiami natūralaus radiacinio fono, kuris nuolat daro pažeidimus biologinėse sistemose. Ląstelės turi apsisaugojimo mechanizmus, kurie leidžia atstatyti sukurtus pokyčius. Mokslo šaka, tyrinėjanti jonizuojančios spinduliuotės veikimą gyvybei yra ganėtinai sena, tačiau tikslūs biologiniai ir fizikiniai mechanizmai vis dar nėra iki galo ištirti. Šiuo darbu bandysime taikyti naujus elektrinius metodus ir gilintis į fizikinius mechanizmus, kurie galėtų paaiškinti biologinių sistemų veikimą | laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 8 662 38767) | Riebalų rugščių kristalitų gamyba ir jų fizikinių savybių tyrimas  *Production of fatty acid crystallites and investigation of their physical properties* | Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas, šiuo metu plačiausiai pritaikomos maisto pramonėje – šokolado gamyboje. Šokolado gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančią ir mechaniškai kiečiausią kristalinę formą. Šiame darbe bus gaminami riebalų rūgščių kristalitai ir tiriamos jų fizikinės savybės. Pagaminti kristalai bus analizuojami rentgeno spindulių difrakcija (naujuoju Rigaku SmartLab prietaisu) | laisva |
|  | Dr. Vytautas Klimavičius, [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  (8 5) 223 4588 | NASICON tipo kompozitinių medžiagų, skirtų baterijų taikymams, kietojo kūno BMR spektroskopija  *Solid state NMR of NASICON based materials for sodium batteries* | Tirsime kietojo kūno BMR metodais medžiagas, kurios yra skirtos natrio baterijoms. Tokios baterijos gali būti panaudotos elektros tinklo stabilizavimo poreikiams tenkinti | laisva |
|  | Dr. Vytautas Klimavičius, [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  (8 5) 223 4588 | Kalcio fosfatų, skirtų kaulų audinių inžinerijai, kietojo kūno BMR spektroskopija  *Solid state NMR of calcium phosphates for bone tissue engineering* | Tirsime kietojo kūno BMR metodais kalcio fosfatų pagrindu pagamintas medžiagas. Jos yra skirtos kaulų inžinerijai, nes primena kietuosius kaulinius audinius | laisva |
|  | Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948 | Bipolinės išėjimo įtampos 4 kvadrantų keitiklio tyrimas  *Investigation of bipolar output four-quadrant converter* | 4 kvadrantų keitiklis, priklausomai nuo jame naudojamų raktų valdymo, gali dirbti kaip teigiamos ar neigiamos įtampos srovę tiekiantis ar paimantis(grąžinantis į prijungtą maitinimo šaltinį) prietaisas. Darbo metu reikės ištirti šio, LT8714 valdiklio pagrindu padaryto, naujoviškos topologijos keitiklio charakteristikas ir jų priklausomybes nuo grandinės parametrų | laisva |
|  | 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 | laisva |
|  | Gytis Sliaužys (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 |
|  | Vadovas J. Franukevičius, Konsultantas M. Mačernis.  [jonas.franukevicius@ff.stud.vu.lt](mailto:jonas.franukevicius@ff.stud.vu.lt), | BMR sukinių tarpusavio sąveikos J skaičiavimų metodų parinkimo tyrimas potencialiems kvantinio kompiuteriui skirtoms molekulėms  *Investigation of NMR spin coupling J computational methods of molecules required .for quantum computing* | Molekulėse esančių branduolių sukinių tarpusavio sąveikos J skaičiavimų metodikos tobulinimas atsižvelgiant į literatūroje esančius eksperimentinius duomenis. Tyrimo tikslas: rasti tinkamiausią tankio funkcionalo teorijos metodą, kurio rezultatai būtų su kuo mažesne paklaida lyginant su žinomais eksperimentiniais duomenimis. Skaičiavimai bus atliekamai su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Aleno karotinoidų krūvio pernašos būsenų modeliavimas  *Charge transfer state modeling for allene carotenoids* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  Aleno karotinoidai pasižymi papildoma krūvio pernašos būsena, kuri vizualiai priklauso nuo molekulės cheminė struktūros. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes. Reikės modeliuoti struktūras, atlikti kvantinę molekulių dinamiką. Atlikti MD skaičiavimus su naujausiu AMBER paketu ir ab initio skaičiavimus su Gaussian 16 ir NwChem ir kitais įsisavintais paketais. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių baltymų modeliavimas su karotinoidais panaudojant GROMACS paketą  *Modeling of Various Carotenoids with Protein using GROMACS package* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  Karotinoidų savybės priklauso nuo baltyminės aplinkos, kuri yra kintanti laike, todėl reikalingas detalus sistemos aprašymas norint suprasti spektrines savybes, o tam reikalingi paketų našumo analizės tyrimai, tokių kaip GROMACS. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant GROMACS ir Gaussian 16 paketus. Reikės įdiegti GROMACS paketą, atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje su Gaussian 16 ir GROMACS paketais. Reiks atlikit superkompiuterio našumo analizę ir paruošti GROMACS naudojimo instrukcijas. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | 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 bazė ir informacinė sistema  *The Database and Information System for the results of the Quantum Chemical calculations* | Superkompiuterių kvantinės chemijos panaudojimo efektyvumui naudojamos sistemos kaip WebMO, kurios skirtos uždavinių paruošimui ir vykdymui. Tuo tarpu labai svarbu tinkamai saugoti jau atliktus skaičiavimus. Tam, kad vartotojas galėtų lengviau pasiekti ir redaguoti tuos duomenis, yra naudojamos informacinės sistemos, kurios palengvina darbą su duomenų bazėmis –pateikiama paprasta aplinka duomenims įkelti, tvarkyti, trinti ir atvaizduoti. Skirtingi kvantinės chemijos programų paketai turi didelį kiekį skirtingų skaičiavimo algoritmų, iš kurių vieni sutampa, o kiti skiriasi. Darbo tikslas automatizuoti ir pritaikyta kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų leidimui, saugojimui, jų automatizuotai analizei ir turėtų informacinę sistemą, kurioje daugelis vartotojų (šiuo metu pritaikyta vienam vartotojui) gali lengvai pasiekti bei tvarkyti kvantinių skaičiavimų duomenis. Įdiegti vieną pasirinktą kvantinės chemijos paketą ir atlikti našumo testus. Skaičiavimai bus atliekamai superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis. | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių baltymų modeliavimas su karotinoidais panaudojant pasirinktą kantinės chemijos paketą  *Modeling of Various Carotenoids with Protein using chosen quantum chemistry package* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  Karotinoidų savybės priklauso nuo baltyminės aplinkos, kuri yra kintanti laike, todėl reikalingas detalus sistemos aprašymas norint suprasti spektrines savybes, o tam reikalingi paketų našumo analizės tyrimai, tokių kaip NwChem, Orca, Quantum ESPRESSO ir kt.. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant pasirinktą paketą. Reikės įdiegti paketą, įgyti kompiliavimo žinių su C++/FORTRAN/Java/Python ir atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje su pasiriktu paketais. Reiks atlikit superkompiuterio našumo analizę ir paruošti paketo naudojimo instrukcijas. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt), 8 5 223 4593 | Makromolekulinėse matricose inskapsuliuotų molekulių struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  *Modelling structural and NMR properties of molecules bound to supramolecular cavitands* | Supramolekulinių darinių tyrimai šiuo metu yra itin aktyvi mokslinės veiklos. Įdomu tai, kad molekulėms prisijungus vadinamųjų supramolekulinių kavitandų ertmėse, šių molekulių savybės gali pasikeisti drastiškai – gali būti stabilizuojamos įprastai energetiškai nepalankios konformacijos, inicijuojamos egzotiškos cheminės reakcijos, ar padidinamas šiaip vandenyje netirpių molekulių tirpumas. Šios molekulinės sistemos labai perspektyvios, nes gali būti panaudojamos, pavyzdžiui, kaip vaistinių junginių nešikliai arba kaip selektyvūs biomolekulių jutikliai. Norint plėsti supramolekulinių kavitandų taikymo galimybes, būtina detaliai suprasti molekulės-kavitando komplekso struktūrą bei kavitanduose inkapsuliuotų molekulių elgseną molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami molekulių, inkapsuliuotų supramolekuliniuose kavitanduose, 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 |
|  | 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 |
|  | 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* | Saulės elementams (fotovoltiniams prietaisams), sintetinamos cheminės medžiagos tinkamumą įvertiname tada, kai nustatoma visa eilė fizikinių parametrų. Vieni iš tokių yra spektrinis fotojautris ir fotogeneracijos kvantinio našumo spektrinis pasiskirstymas. Darbo metu tyrinėjame kaip medžiagos skersaryšinimo cheminės reakcijos įtakoja minėtų spektrinių charakteristikų pakitimus, lemiančius būsimo fortovoltinio prietaiso našumo augimą | laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,  Saulėtekio al. 9, III, 622  +370 (5)236 6052 | 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, ar susintetinta cheminė medžiaga gali būti tinkama saulės elemento (fotovoltinio prietaiso) gamyboje. 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 deriname prietaisus bei išmatuojame naujai sintetintų cheminių medžiagų voltkulonines bei voltfaradines charakteristikas | laisva |
|  | Robertas Maldžius, [robertas.maldzius@ff.vu.lt](mailto:robertas.maldzius@ff.vu.lt),  Saulėtekio al. 9, III, 622  +370 (5)236 6052 | Drėgmės difuzija dielektrinėse struktūrose, matuojant paviršiaus elektrinį laidumą *Moisture diffusion in the dielectric structures by measuring the electrical conductivity of a surface* | 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 tyrinėjami metodikos teoriniai aspektai bei atliekami daugiasluoksnių popierinių dangų atsparumo drėgmei tyrimai | laisva |
|  | Kristijonas Genevičius  kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  tel.: 85 233 4553 | Foto sužadintų krūvininkų ekstrakcija dariniuose metalas-dielektrikas – puslaidininkis  *Extraction of photogenerated charge carriers in metal-dielectric-semiconductor structures* | Puslaidininkyje fotogeneruoti krūvininkai elektriniu lauku bus pritraukiami prie izoliatoriaus ir po to ištraukiami tiesiškai kylančios įtampos impulsu. Planuojama tirti ambipolinių organinių puslaidininkių ar tūrinių heterosandūrų plonus sluoksnius. Darinių gamyba ir eksperimentas | laisva |
|  | Darius Abramavičius, [darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt),  Saulėtekio al. 3, A312,  Tel. (8 5) 223 4544 | Eksitonų dinamikos ir disociacijos modeliavimas organiniuose saulės elementuose  *Modeling of excitation dynamics and charge separation in organic solar cells* | Organiniai saulės elementai yra netvarkios medžiagos sudarytos iš donorinių ir akceptorinių molekulinių chromoforų. Naudojant fenomenologinį stipraus ryšio modelį bus modeliuojama sužadinimo kvantinė dinamika ir disociacija | laisva |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Skylių pernašos tyrimai organiniuose binarinės sandaros sluoksniuose  *Investigation of hole transport in organic binary-blend layers* | Pagrindiniai organinių elektronikos prietaisų trūkumai yra mažas krūvininkų judris juose (mažesnė greitaveika) bei menkas atsparumas aplinkos poveikiui. 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 | laisva |
|  | Justinas Čeponkus justinas.ceponkus@ff.vu.lt  +37052234595 | Vandens sąveikos su organinėmis molekulėmis tyrimas virpesinės spektroskopijos metodais  *Study of water interaction with organic molecules using vibrational spectroscopy* | Tyrimo tikslas tirti vandens sąveikos ypatybes su konjuguotomis pi elektronų sistemomis pvz. Benzenas. Tam bus taikomi keli skirtingi virpesinės spektrometrijos metodai. Studentas išmoks dirbti su dujiniais ir skystais bandiniai, susipažins su kriogeninės spektrometrijos technika | laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | Molekulių struktūros nustatymo skaičiavimų modeliais tikslumo ribos  *Accuracy limits of computationally modeled molecular structure* | LT: 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, kokio parametrų tikslumo verta tikėtis optimizuojant struktūros parametrus populiariais kvantinės chemijos paketais  *Numerical estimation of molecular structure is equal to multidimensional optimization problem w. r. t. energy, and differing parameters (e. g., bond lengths) may result in the same energy value. The goal of the study is to assess practical accuracy of the structural parameters obtained by commonly-used quantum chemistry packages* | laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 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  *Microscopic properties of fluids give rise to non-linear dynamics, such as self-organization and chaotic behavior. While such effects have analytical solutions, small-scale modeling of fluids is a non-trivial computational task. The goal of the study is to achieve “real-time” dynamics simulation, where 1 s of the solution is itself computed / presented in 1 s or less* | laisva |
|  | Feliksas Kuliešius,  Feliksas.kuliesius@ff.vu.lt | Blokų grandinių taikymo daiktų internete modeliavimas  *Modeling of the Application of Blockchains in the IoT* | Daiktų interneto (DI) tinklų saugos užtikrinimui vis dažniau taikomos blokų grandinių technologijos, kaip paskirstytųjų sistemų atvejis. Blokų grandinių taikymas DI dar nėra pakankamai ištyrinėtas. Tyrimai realiose sistemose būtų per daug brangūs ir sudėtingi, todėl būtinos kompiuterinės simuliacijos. Šio darbo tikslas yra sukurti kompiuterinę blokų grandinių tinklo modeliavimo sistemą, kuri padėtų įvertinti blokų grandinių taikymo galimybes dideliuose DI įrenginių tinkluose | laisva |
|  | Dr. Vytautas Klimavičius, [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  (8 5) 223 4588 | Bioaktyviųjų joninių skysčių BMR spektroskopija  *NMR spectroscopy of bioactive ionic liquids* | Aukštosios skyros metodais tirsime bioaktyviuosius joninius skysčius | užimta |
|  | Darius Abramavičius, [darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt),  Saulėtekio al. 3, A312,  Tel. (8 5) 223 4544 | Elektron-fononiniai procesai kietame kūne  *Coupled electron-phonon processes in solid state* | Elektron-fononinės sklaidos procesai apsprendžia elektronų ir skylių termalizaciją ir rekombinaciją. Naudojant stipraus ryšio modelį bus skaičiuojamos elektroninės ir fononinės charakteristikos puslaidininkiuose | užimta |
|  | Darius Abramavičius, [darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt),  Saulėtekio al. 3, A312,  Tel. (8 5) 223 4544 | Elektron-fononiniai procesai makromolekuliniuose chromoforuose  *Coupled electron-phonon processes in macromolecular chromophores* | Optiškai sužadintos molekulės dalyvauja šviesos konversijos procesuose organinėje elektronikoje. Darbe bus modeliuojami sužadinimo dinamikos ir rekombinacijos procesai | užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Naujų monomolekulinių sluoksnių įtaka organinių lauko tranzistorių charakteristikoms  *Influence of new monomolecular layers on OFET characteristics* | 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. Atliekant šį kursinį darbą reikėtų išmokti dirbti technologinėje laboratorijoje, patiems pasigaminti OFET ir su, ir be papildomo monomolekulinio sluoksnio bei ištirti jų charakteristikas. | užimta |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų pernašos tyrimai skersaryšinamose organinėse medžiagose  *Investigation of charge carriers transport in crosslinkable organic material* | 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. Žinoma, tokiuose sluoksniuose pasikeičia ir krūvio pernaša, todėl reikalingi papildomi tyrimai siekiant jas pritaikyti prietaisuose. Atliekant šį kursinį darbą reikėtų ir išmokti dirbti technologinėje laboratorijoje liejant sluoksnius, ir įsisavinti krūvio pernašos tyrimų aparatūrą | užimta |
|  | Justinas Čeponkus [justinas.ceponkus@ff.vu.lt](mailto:justinas.ceponkus@ff.vu.lt)  +37052234595 | Sočiųjų karboksirūgščių struktūros ir tarpusavio sąveikos tyrimas Matricinės izoliacijos virpesinės spektrometrijos metodais  *Study of saturated monocarboxylic acids structure and association 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 | Spektrinių metodų taikymas mikroplastiko identifikavimui  *Application of spectroscopic methods for the identification of micro-plastics* | 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 | Skirtingų mikroorganizmų identifikavimas virpesinės spektrometrijos metodais  *Identification of microorganisms using vibrational 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 struktūrinėje konformacinėje analizėje  *Application of matrix isolation vibrational spectroscopy in structural and conformational analysis of the molecules* | 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 |