**Magistrantūros Mokslo tiriamieji darbai:**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Tema laisva/užimta  |
|  | Vytautas Klimavičius (vytautas.klimavicius@ff.vu.lt, +370 5 223 4588) | Fukcinių medžiagų, skirtų vaistų pernašai į kietuosius audinius, kietojo kūno BMR spektroskopija*Solid-state NMR spectroscopy study of functional materials designed for drug delivery to hard tissues*  | Kietojo kūno BMR metodais bus tiriamos medžiagos, kurios yra savo chemine sudėtimi panašios į kaulinius audinius (kalcio fosfatai, silikatai ir kt.). Iš šių medžiagų yra planuojama gaminti porėtas mikrosferas, kurios gali būti panaudotos vaistų pernašai į kietuosius kaulinius audinius. | laisva |
|  |  Vytautas Klimavičius (vytautas.klimavicius@ff.vu.lt, +370 5 223 4588) |  Funkcinių medžiagų, skirtų naujo tipo baterijoms, kietojo kūno BMR spektroskopija*Solid-state NMR spectroscopy study of functional materials designed for novel batteries* |  Kietojo kūno BMR metodais bus tiriamos NASICON tipo ir hibridinės medžiagos, skirtos Na-parindo baterijoms gaminti. |  laisva |
|  | Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt,Saulėtekio al. 9, III, 622+37052366052, | Drėgmės difuzija dielektrinėse struktūrose, matuojant paviršiaus elektrinį laidumą*Moisture diffusion in the dielectric structures by measuring the electrical conductivity of a surface* | Šiuo metu kuriamos tokios technologijos, kuriose popierinėse pakuotėse nenaudojamas plastikas. Bet kartu tokia pakuotė turi apsaugoti nuo drėgmės poveikio. Vandens garų difuzijos nustatymo metodas, pagrįstas paviršinio elektrinio laidumo kinetikos matavimu, įgalina pakuotės gamybos metu greitai nustatyti dangos tinkamumą, kokybę ir kitus parametrus. Tiriamajame darbe matuojame difuzijos signalo kinetikas ir pagal jų ypatumus identifikuojame vykstančius vandens garų pernašos procesus popierinėse dangose. | laisva |
|  | Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt | Krūvininkų pernašos mechanizmų tyrimai dvinariuose organinių medžiagų dariniuose *Investigation of charge carriers transport in binary structures of organic materials* | Organinių medžiagų tarpe didžiausi krūvininkų judriai pasiekiami mažos molekulinės masės junginiuose, tačiau yra daug neišspręstų problemų formuojant jų sluoksnius. Kadangi polimerinių sluoksnių struktūra yra geriau kontroliuojama, tai mažamolekulinių junginių komponavimas su polimerine matrica laikomas perspektyvia kryptimi tobulinant organinius elektroninius prietaisus. Studentas turės savarankiškai dirbti tiek technologinėje laboratorijoje, tiek atlikti pasigamintų sluoksnių fotoelektrinius tyrimus.*In organic materials, the largest charge carriers’ mobility values have been achieved in the layers made of low molecular mass molecules, although still there are many problems associated with fabrication of these layers. The structure of polymer layers could be controlled much better, so combining low molecular mass and polymer materials into binary structure is a promising way to improve devices of organic electronics. The student will have to work in technological and experimental labs.* | laisva  |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  | Skersaryšinimo įtaka krūvininkų pernašai organinėse puslaidininkinėse medžiagose *Influence of cross-linking of organic semiconductor materials on charge carrier transport* | Organinių molekulių skersaryšinimas sumažina tirpumą, sulėtina degradacinius procesus ir padidina mechaninį atsparumą. Skersaryšinimo metu sudaromos papildomos cheminės jungtys keičia tarpmolekulinius atstumus bei molekulių išsidėstymo tvarką, neretai tokie pokyčiai stipriai pakeičia krūvininkų judrį.Sluoksnių gamyba iš tirpalų inertinių dujų kameroje, skersaryšinimo sąlygų parinkimas, judrio nustatymas lėkio trukmės metodu.*Cross-linking of organic molecules reduces solubility, slows down degradation processes and increases mechanical resistance. The additional chemical bonds formed during cross-linking change the intermolecular distances and the arrangment of the molecules. These changes often significantly affect the mobility of charge carriers after cross-linking. Fabrication of layers from solutions in a glovebox, optimisation of crosslinking, determination of mobility by the time-of-flight technique.* | laisva  |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  | Skersaryšinamų medžiagų panaudojimas tūrinėse heterosandūrose*Cross-linkable materials in organic bulk heterojunctions*  | Vienas iš pagrindinių tūrinės heterosandūros saulės elementų trūkumų yra morfologiniai pokyčiai mažinantys efektyvumą. Atlikus pilną ar dalinį tūrinės heterosandūros skersaryšinimą būtų galima tikėtis sulėtinti ne tik morfologinę bet ir cheminę degradaciją. Sluoksnių gamyba iš tirpalų inertinių dujų kameroje, tūrinės heterosandūros sudėties parinkimas, degradacinių procesų spartos įvertinimas.*One of the main drawbacks of bulk heterojunction solar cells is the morphological changes that reduce efficiency over time. Full or partial cross-linking of bulk heterojunction could be expected to slow down not only morphological, but also chemical degradation. Fabrication of layers from solutions in a glovebox, optimisation of bulk heterojunction composition, evaluation of degradation rates.*  | laisva  |
|  | Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt  | Šviesos sugerties gylio įtaka bimolekulinės rekombinacijos nustatymui lėkio trukmės metodu *Influence of absorption depth to the precision of bimolecular recombination estimated from time-of-flight* | Daugumoje organinių medžiagų vyraujantis rekombinacijos mechanizmas yra Langevin tipo bimolekulinė rekombinacija, kuri dažnai ir apriboja organinių saulės elementų efektyvumą. Vienas paprasčiausių būdų nustatyti bimolekulinės rekombinacijos koeficientą yra lėkio trukmės metodo panaudojimas, kuris reikalauja, kad šviesos sugertis būtų tūrinė. Jei sugerties gylis yra palyginamas ar mažesnis nei sluoksnio storis, rekombinacijos koeficientas nustatomas netiksliai. Bandinių gamyba inertinių dujų kameroje, bimolekulinės rekombinacijos koeficiento nustatymas bei krūvininkų judrių nustatymas, rezultatų palyginimas su skaitmeninio modeliavimo rezultatais.*The dominant recombination mechanism in most organic materials is Langevin-type bimolecular recombination, which often limits the efficiency of organic solar cells. One of the simplest ways to determine the bimolecular recombination coefficient is to use the time-of-flight method, which requires the light absorption in the bulk. If the absorption depth is comparable to or less than the thickness of the layer, the recombination coefficient is not accurately determined. Production of samples in glovebox, determination of the bimolecular recombination coefficient and determination of the mobility of the charge carriers, comparison of results with numerical simulations.* | laisva  |
|  | Laura Baliulytė (laura.baliulyte@ff.vu.lt, (8 5) 223 4662) | Molekulių agregatų modeliavimas molekulinės mechanikos ir kvantinės mechanikos metodais*Molecular mechanics and quantum chemical study on molecular aggregates* | Yra žinoma, jog TPPS4 molekulės vandenyje formuoja J-ir H-agregatus priklausomai nuo koncentracijos ir pH. Darbe numatoma ištirti TPPS4 J- ir H-struktūrų (dimerų, trimerų ir didesnių) susidarymą molekulinės mechanikos ir kvantinės chemijos metodais.*It is well know that TPPS4 efficiently self-associate from monomers into J-aggregates and H-aggregates. In order to understand how these aggregates form, we aim to determine formation process of TPPS4 J- and H-structures (dimers, trimers and larger) with molecular mechanics and quantum chemical methods.* | laisva |
|  |  Doc. dr. Mindaugas Mačernis,(+ 370) 5 223 4659 mindaugas.macernis@ff.vu.lt | DNR kirpimo mechanizmo tyrimas tankio funkcionalų 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 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, 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 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 |
|  | Doc. dr. Mindaugas MačernisTel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių karotinoidų modeliavimas baltymuose su superkompiuteriu*Modeling of various Carotenoids with Protein using supercomputer*  | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose[1-3]. 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, NwChem, QChem ir kt. paketus. Reikės įdiegti atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje. Skaičiavimai bus atliekamai su Fizikos fakultete esančiu superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [4].Literatūra[1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014).[2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018)[3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022.[4] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022*Carotenoids are widespread in living nature, whose properties are exploited in various processes[1-3].**The properties of carotenoids depend on the protein environment, which is time-varying, so a detailed description of the system is required to understand the spectral properties, which requires batch performance analysis studies such as GROMACS. The aim of the work is to calculate the structural and spectral properties of various carotenoids using GROMACS and Gaussian 16, NwChem, QChem, etc. packages. Performance studies will need to be implemented. To perform ab initio calculations for carotenoids in a protein environment. Calculations will be performed with the "VU HPC" Saulėtekis supercomputer at the Faculty of Physics, using SLURM and Webmo systems [4].*Literature[1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014).[2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018)[3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022.[4] 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, 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 kristalai, kurie bus tyrinėjami rentgeno spindulių difrakcija (naujuoju Rigaku SmartLab prietaisu), temperatūriniais bei elektriniais metodais.*Fatty acids, which are able to form solid crystalline forms, are extracted in living nature and are currently most widely used in the food industry - in the production of chocolate. Chocolate products are extracted using special tempering technologies to obtain the most stable crystalline form that melts at the highest possible temperature and is mechanically the hardest. In this work, fatty acid crystals will be produced, which will be studied by X-ray diffraction (with the new Rigaku SmartLab device), temperature and electrical methods.* | laisva |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 14. | Doc. dr. Mindaugas MačernisTel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių karotinoidų modeliavimas baltymuose su superkompiuteriu*Modeling of various Carotenoids with Protein using supercomputer*  | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose[1-3]. 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, NwChem, QChem ir kt. paketus. Reikės įdiegti atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje. Skaičiavimai bus atliekamai su Fizikos fakultete esančiu superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [4].Literatūra[1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014).[2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018)[3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022.[4] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022 | Laisva (tema skirta M1 TFA studentui) |