

Baigiamasis darbas (IV k. Fizika, Šviesos technologijos, Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Aukštųjų technologijų fizika ir verslas)

Eil. Nr.	Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.)	Institutas	Temos pavadinimas (lietuvių kalba)	Temos pavadinimas (anglų kalba)	Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba)	Trumpas temos aprašymas (anglų kalba)
1.	Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt	CHFI	Aplinkos temperatūros įtaka sužadinimo vyksmams molekuliniuose rotoriuose	Thermal effects of electronic excitation processes in molecular rotors	Molekuliniai rotoriai tyrinėjami siekiant panaudoti juos kaip mikroskopinius aplinkos parametrų, pvz., klampos ir poliškumo, jutiklius. Tačiau junginių spektrinės savybės neišvengiamai priklauso ir nuo temperatūros. Tyrimo metu bus nagrinėjama ši priklausomybė ir jos poveikis kitų parametrų įvertinimo tikslumui. Uždaviniai -- optiškai aktyvių molekulių potencinės energijos paviršių modeliavimas kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos metodais.	Molecular rotors are being studied with a view to using them as microscopic sensors of environmental parameters such as viscosity and polarity. However, the spectral properties of compounds inevitably depend on temperature as well. This dependence and its effect on the accuracy of other parameter measurements will be investigated during the study. Tasks: modeling the potential energy surfaces of optically active molecules using quantum chemistry and molecular dynamics methods.
2.	Robertas Maldžius robertas.maldzius@ff.vu.lt	CHFI	Dielektrinių savybių tyrimai E Stilbeno ir polimero mišiniuose dozuoto įelektrinimo-išelektrinimo metodu	Studies of the dielectric properties in the E-Stilbene and polymer blends using the dosed charge-discharge method	Metodika leidžia tirti medžiagos įelektrinimą bei išelektrinimą, identifikuoti krūvininkų dinamiką bei išmatuoti visą eilę dielektrinių parametrų, pvz. tokių kaip ribinis įelektrėjimo potencialas, paviršinio krūvio injekcijos srovių dydis, efektinė dielektrinė skvarba bei dielektrinis storis ir kt.	The method allows to study the electrification and discharge of a material, identify the dynamics of charge carriers, and measure a lot of dielectric parameters, such as the limiting electrification potential, the magnitude of surface charge injection currents, the effective

					Darbo metu matuojame naujai sintetintų mišinių sluoksnių vortkulonines bei vortfaradines charakteristikas, analizuojame kreives ir rezultatus siejame su gamybos proceso ypatumais.	dielectric permittivity, and the dielectric thickness, etc. During the work, we measure the vortcoulomb and vortfarad characteristics of newly synthesized mixture layers, analyze the curves, and relate the results to the characteristics of the production process.
3.	Robertas Maldžius robertas.maldzius@ff.vu.lt	CHFI	Fotovoltinių sluoksnių vortamperinės charakteristikos ir jų spektriniai tyrimai	Voltammetric characteristics of photovoltaic layers and their spectral studies	Fotovoltinio prietaiso veikimas esmingai priklauso nuo jo vortamperinės charakteristikos formos bei jo spektrinio atsako į šviesą. Darbo metu matuojame vortamperines charakteristikas apšviečiant tiriamąjį sluoksnį pasirinkto bangos ilgio monochromatine šviesa. Sluoksnių struktūroje yra medžiagos, kurios yra skersaryšintos cheminėmis reakcijomis. Tokiu būdu ieškome šių reakcijų įtakos minėtų prietaisų spektrinėms savybėms, lemiančioms būsimo fotovoltinio prietaiso našumą.	The performance of a photovoltaic device depends fundamentally on the shape of its current-voltage characteristic and its spectral response to light. During the work, we measure the current-voltage characteristics by illuminating the tested layer with monochromatic light of a selected wavelength from a wide solar spectrum of a xenon lamp. The structure of the layers contains materials that are cross-linked by chemical reactions. In this way, we are looking for the influence of these reactions on the spectral properties of the layer, which determine the performance of the future photovoltaic device.

4.	Robertas Maldžius robertas.maldzius@ff.vu.lt	CHFI	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.	Technologies are being developed worldwide that do not use plastic in paper packaging, and the coating must protect against moisture. The method for determining water vapor diffusion, based on measuring the kinetics of surface electrical conductivity, enables rapid determination of the suitability, quality and other parameters of the coating during the technological production process of paper packaging. The work will investigate the influence of the effect of ions in the air from an electric discharge on the resistance of such coatings to water vapor permeability.
5.	Rokas Dobužinskas rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt	CHFI	Kakavos sviesto riebalų žydėjimo kristalinių savybių tyrimas maisto produktuose	Investigation of the Crystalline Properties of Cocoa Butter Fat Bloom in Food Products	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 kietiausią kristalinę formą. Šios struktūros yra taikomos ne	Fatty acids obtained from living nature, which are able to form solid crystalline forms at room temperature, are one of the most interesting objects of research. Various fatty acid products are obtained by special tempering technologies to obtain the most stable, highest melting and mechanically hardest crystalline form. These structures are applied not only in food (chocolate

					tik maisto (šokolado gamyboje), bet ir galėtų būti taikomos elektronikos ir sunkiojoje pramonėje.	production), but could also be applied in electronics and heavy industry.
6.	Kęstutis Aidas kestutis.aidas@ff.vu.lt	CHFI	Hidrotropinių medžiagų vandeninių tirpalų struktūros ir BMR spektrų modeliavimas QM/MD metodais	Modeling of the structure and NMR Spectra of aqueous solutions of hydrotropic agents using QM/MD methods	Natrio salicilatas ir cholino salicilatas veikia kaip hidrotropai, ženkliai padidinantys gryname vandenyje netirpių ar mažai tirpių medžiagų tirpumą. Tokios hidrotropinės medžiagos galėtų būti panaudotos vaistų tirpumui ir įsisavinimui gyvuose organizmuose pagerinti. Šiame darbe bus modeliuojami natrio salicilato ir cholino salicilato vandeninių tirpalų H-1 BMR spektrai, siekiant geriau suprasti hidrotropijos molekulinį mechanizmą. Molekulių dinamikos simuliacijos ir BMR cheminių poslinkių skaičiavimai QM/MM metodais bus atliekami VU FF superkompiuteriu.	Sodium salicylate and choline salicylate act as hydrotropes that significantly increase the solubility of substances that are insoluble or poorly soluble in pure water. Such hydrotropic agents could be used to improve the solubility and bioavailability of drugs in living organisms. In this work, the H-1 NMR spectra of aqueous solutions of sodium salicylate and choline salicylate will be modeled in order to gain a better understanding of the molecular mechanism of hydrotrophy. Molecular dynamics simulations and calculations of NMR chemical shifts using QM/MM methods will be performed on the supercomputer at the Faculty of Physics, Vilnius University.

7.	Vincas Tamošiūnas vincas.tamosiunas@ff.vu.lt	FNI	Anizotropiškai ėsdintų trimačių kristalinio silicio struktūrų savybės terahercų dažnių ruože	Properties of anisotropically etched crystalline silicon structures in the terahertz frequency range	Šio baigiamojo darbo tikslas – įsisavinti baigtinių skirtumų laiko skalėje (FDTD) metodą elektromagnetinių laukų modeliavimui, šiam tikslui skirtą MIT Meep programinę įrangą, bei sumodeliuoti kelių tipų trimačių struktūrų, kurias būtų galima gauti kristalinio Si padėkluose anizotropinio ėsdinimo būdu, savybes THz dažnių ruože.	The aim of this work is to master the application of finite-difference time- domain (FDTD) method for simulating electromagnetic fields using MIT Meep software and to investigate the expected optical properties of several anisotropically etched crystalline Si structures in the THz frequency range.
8.	Edvardas Kazakevičius edvardas.kazakevicius@ff.vu.lt	TETI	LLTO keramikos elektrinių savybių tyrimai.	Electrical properties of LLTO ceramics.	Kietakūnių ličio jonų baterijos yra svarbios dėl veikimo plačiame temperatūrų intervale, didelio energijos tankio ir saugumo. Tinkama medžiaga elektrolitui būtų Ličio Lantano Titanatas (LLTO). LLTO keramikų elektrinės savybės būtų tiriamos plačiajuostės pilnutinės varžos spektroskopijos pagalba ir pagrindinė studento užduotis būtų įsigilinti į šio tyrimo metodiką ir rezultatų analizės būdus. Pagrindiniai analizės būdai - ekvivalentinių grandinių sudarymas ir relaksacijos trukmių paisiskirstymo gavimas ir interpretavimas.	Solid-state lithium-ion batteries are important due to their wide temperature range, high energy density and safety. A suitable material for the electrolyte would be Lithium Lanthanum Titanate (LLTO). The electrical properties of LLTO ceramics would be investigated using broadband impedance spectroscopy and the main task of the student would be to delve into the methodology of this study and the methods of analyzing the results. The main methods of analysis are the ones of equivalent circuits and the distribution relaxation times.

9.	Jan Macutkevič jan.macutkevic@ff.vu.lt	TETI	Kompozitai su nanodalelėmis elektromagnetinių bangų slopinimui.	Composites with nanoparticles for electromagnetic shielding applications.	Šiame darbe bus tiriami kompozitai su įvairios prigimtės nanodalelėmis. Bus nustatyta nanodalelių formos ir cheminės sudėties įtaka kompozitų dielektrinėms savybėms plačiame dažnių diapazone. Bus nustatytos optimalios sąlygos elektromagnetiniam slopinimui.	In this work will be investigated properties of composites with nanoparticles of various nature. The influence of the shape and chemical composition of the nanoparticles on the dielectric properties of the composites in a wide frequency range will be determined. The optimal conditions for electromagnetic shielding will be established.
10.	Aleksejus Kononovičius aleksejus.kononovicius@tfai.vu.lt	TFAI	Vėlinimo mechanizmų įtaka rinkėjo modelio spektrinei ir stacionariai statistikai	Spectral and stationary statistics of the noisy voter model with delay mechanisms	Tikslas: ištirti, kaip skirtingi vėlinimo mechanizmai paveikia rinkėjo modelio stacionarias statistines savybes ir galios spektrinį tankį. Lyginsime Lambiotte et.al. [Phys.Rev.E 79, 046107] pasiūlytą vėlinimo mechanizmą (kai vėlinami pavienių individų būsenų pokyčiai) su vadovo ir bendraautorių [Physica A 652, 130062] pasiūlytu vėlinimo mechanizmu (kai vėlinami globalios būsenos stebėjimai). Pagrindinis darbo klausimas būtų ar įmanoma atskirti šiuos mechanizmus?	Goal: to investigate how different delay mechanisms affect the stationary statistical properties and power spectral density of the voter model. We will compare the delay mechanism proposed by Lambiotte et al. [Phys.Rev.E 79, 046107] (delay is applied to individual particle transitions) with the delay mechanism proposed by the author and co-authors [Physica A 652, 130062] (delay is applied to the observations of the global state). The primary question of the work is whether it is possible to distinguish between these mechanisms.

11.	Aleksejus Kononovičius aleksejus.kononovicius@tfai.vu.lt	TFAI	Konkurencijos statistikos taikymas rinkėjo modeliui	Competition statistics in the noisy voter model	Tikslas: nustatyti kokio pobūdžio konkurencijos statistika pasižymi rinkėjo modelis. Konkurencijos statistika pasiūlyta Pal et al. darbe [Phys. Rev. Lett. 134, 017401] teigiant, kad demokratiniai rinkimai pasižymi universalia konkurencijos statistika. Šios statistikos pobūdis gali būti paašškintas atsitiktinio balsavimo modeliu. Lyg šiol pagrindinis nuomonių dinamikos modelis buvo rinkėjo modelis, tad kyla natūralus klausimas - kokio pobūdžio konkurencijos statistika pasižymi rinkėjo modelis?	Goal: to investigate the nature of the competition statistics characteristic of the noisy voter model. Competition statistics were proposed by Pal et al. in their work [Phys. Rev. Lett. 134, 017401]. Reportedly, many democratic elections exhibit universal competition statistics. Pal et al. have shown that a random voting model explains the observed competition statistics. Until now, the noisy voter model has been the cornerstone model of opinion dynamics; thus, a natural question arises: What kind of competition statistics can be reproduced by the noisy voter model?
12.	Aleksejus Kononovičius aleksejus.kononovicius@tfai.vu.lt	TFAI	Giliojo mašininio mokymosi taikymas rinkėjo modelio perėjimo tikimybės funkcijai nustatyti	Deep-learning-assisted analysis of the transition probability function in the noisy voter model	Rinkėjo modelis yra vienas kertinių sociofizikos modelių. Nors šis modelis gali būti suvestas į gana paprastą generacijos-rekombinacijos procesą, daugelis šio modelio savybių dar nėra gerai suprastos analitiškai. Viena pagrindinių kliūčių yra tai, kad šiam netiesiniam modeliui nėra žinoma paprasta perėjimo tikimybės funkcijos forma. Nors difuzija (Gauso skirstiniu) grįsti apytikriai	The noisy voter model is a cornerstone model in sociophysics. While this model reduces to a rather simple generation-recombination process, many of its properties have not yet been derived analytically. One of the roadblocks is that the transition probability is not explicitly known for this nonlinear model. While diffusion-based (Gaussian) approximations are well-

					metodai yra žinomi, bet jie nėra naudingai jei norime nagrinėti modelio statistines savybes vidutiniuose laiko masteliuose. Perėjimo tikimybės funkcijos žinojimas atvertų naujas galimybes analitiškai tirti rinkėjo modelį, bei leistų pagreitinti skaitmeninį modeliavimą vidutiniuose laiko masteliuose.	known, they are not helpful when intermediate time scales are considered. Knowing the transition probability function would enable more extensive analysis of the model, as well as speed up its numerical simulation.
13.	Gediminas Gaigalas gediminas.gaigalas@tfai.vu.lt	TFAI	Antrosios eilės Relėjaus ir Šrėdingerio trikdžių teorija, skirta konfigūracijų superpozicijos metodui	Second-Order Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory for the Configuration Interaction Method	Šiame darbe pirmiausiai bus susipažindinama su Raylėjau ir Šrėdingerio trikdžių teorija, konfigūracijos superpozicijos metodu atomo teorijoje ir atitinkamomis kompiuterinėmis programomis. Remiantis šiais metodais ir programomis, planuojama apskaičiuoti lengvųjų atomų energijos spektrą.	This work will first introduce the Rayleigh-Schrödinger perturbation theory, the configuration superposition method in atomic theory, and the corresponding computer programs. Based on these methods and programs, calculations of the energy spectrum of light atoms are planned.
14.	Rytis Kazakevičius rytis.kazakevicius@tfai.vu.lt	TFAI	Bistabilių sistemų parametrinių modelių analizė ir įvertinimas	Estimation of Optimal Parametric Models for Bistable Systems	Bistabilios sistemos — tai sistemos, galinčios persijungti tarp dviejų stabilių būsenų — sutinkamos fizikoje, biologijoje, inžinerijoje ir agentais grįstuose modeliuose. Norint tiksliai aprašyti jų elgseną, būtina parinkti parametrinius modelius, kurie geriausiai atspindi pagrindinę dinamiką ir triukšmo sukeltą perėjimą. Šiame	Bistable systems—systems that can switch between two stable states—appear in physics, biology, engineering, and agent-based models. Accurately capturing their behavior requires selecting parametric models that best represent the underlying dynamics and noise-driven transitions. This thesis focuses on developing and evaluating methods for

					baigiamajame darbe bus kuriami ir vertinami metodai, skirti optimaliausių parametrinių bistabilių sistemų modelių įvertinimui, naudojant skaitmeniškai sugeneruotus duomenis. Analizuojant modelių tikslumą ir jų gebėjimą atkurti stacionarių skirstinių statistines savybes, bus siekiama nustatyti, kurios parametrinės formos efektyviausiai aprašo bistabilų elgesį skirtinguose režimuose.	estimating optimal parametric models of bistable systems using numerically simulated data. By comparing model performance and accuracy, the study aims to identify which parametric steady-state distributions most effectively describe bistable behavior across different regimes.
--	--	--	--	--	---	---