

4 KURSO PROFESINĖS PRAKTIKOS TEMOS

2026 rudens semestras

Cheminės fizikos institutas

	Darbo vadovas	Tema lietuvių kalba	Tema anglų kalba	Aprašymas lietuvių kalba	Aprašymas anglų kalba
1.	Mindaugas Mačernis	Fukosantino ir kitų karotinoidų struktūros bei fotofizikinių savybių tyrimas taikant kvantinės chemijos ir molekulinės dinamikos metodus	Study of Fucoxanthin and Other Carotenoids: Structure and Photophysical Properties via Quantum Chemistry and Molecular Dynamics	Fukosantinas ir kiti karotinoidai yra svarbios bioaktyvios molekulės: farmacijoje jos naudojamos kaip maži kristaliniai junginiai ar kompleksuose su nešikliais, o gyvuosiuose organizmuose atlieka esminį vaidmenį šviesos sugerties ir perdavimo procesuose. Nepaisant to, jų fotofizikinės savybės, ypač susijusios su fotosintezės kompleksuose vykstančia dinamika, tebėra nepakankamai ištirtos. Šiame darbe bus nagrinėjami struktūros ir funkcijos ryšiai taikant kvantinės chemijos (ADC, DFT, TD-DFT) ir molekulinės dinamikos metodus. Analizuojami bus sugerties ir Ramano spektrai, ypatingą dėmesį skiriant sužadintų būsenų elgsenai. Naudojami skaičiavimų paketai: Gaussian, Q-Chem, AMBER.	Fucoxanthin and related carotenoids are important bioactive molecules: in pharmaceutical applications, they are used as small crystalline compounds or in carrier-bound complexes, while in living systems they play a critical role in light absorption and energy transfer. However, their photophysical properties—especially within photosynthetic complexes—remain insufficiently explored. This project will investigate structure–function relationships using quantum chemistry methods (ADC, DFT, TD-DFT) and molecular dynamics. The analysis will focus on absorption and Raman spectra with emphasis on excited-state behaviour. Software: Gaussian, Q-Chem, and AMBER.
2.	Mindaugas Mačernis	DNR kirpimo mechanizmo tyrimas taikant tankio funkcionalų teoriją ir QM/MM metodus su superkompiuteriu	DFT and QM/MM Study of DNA Cleavage Mechanism by Restriction Endonuclease Using a Supercomputer	BcnI baltymas atpažįsta specifines DNR sekas ir atlieka jų kirpimą, tačiau šio proceso molekulinis mechanizmas tebėra nepakankamai ištirtas. Šio darbo tikslas – taikant QM/MM metodus ir tankio funkcionalų teoriją (DFT), ištirti, kaip ir kurios DNR struktūrinės dalys sąveikauja su BcnI aktyviuoju centru. Modeliavimas leis patikslinti aktyviųjų centrų atominės pozicijas ir įvertinti susidarancius ryšius. Tyrimas apims ~2000 atomų sistemų paruošimą AMBER paketui bei DFT skaičiavimus su Gaussian 16. Skaičiavimai bus vykdomi Vilniaus universiteto superkompiuteryje „VU HPC Saulėtekis“, naudojant SLURM ir Webmo sistemas [1]. [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 specific DNA sequences and cleaves them, but the precise molecular mechanism of this process remains unclear. This project aims to investigate which DNA structural regions interact with BcnI's active site using QM/MM techniques and density functional theory (DFT). The modelling will refine atomic positions in the active site and reveal key interaction patterns. The system (~2000 atoms) will be prepared for the AMBER package, and DFT calculations will be performed using Gaussian 16. All simulations will be executed on the "VU HPC Saulėtekis" supercomputer using SLURM and Webmo [1]. [1] Macernis M. et al. Still Unsolved High-Performance Computing Challenges for up to Pre-Petascale Homogeneous Supercomputers, arXiv:2210.00934, 2022.

3.	Mindaugas Mačernis	Stilbeno ir jo darinių kompleksų sąveikų tyrimas taikant molekulinės dinamikos metodus	Investigation of Stilbene and Its Derivative Complexes Using Molecular Dynamics Methods	Stilbenas ir jo dariniai pasižymi unikaliomis optinėmis, fluorescencinėmis bei biologinėmis savybėmis, todėl yra plačiai tiriami medžiagų moksle, vaistų kūrime ir jutiklių technologijose. Šiame projekte bus modeliuojami galimi stilbeno ir jo darinių kompleksai su kitomis molekulėmis, siekiant įvertinti jų tarpusavio sąveikas, kompleksų struktūrinį stabilumą bei fizikochemines savybes. Tyrimui bus taikomi molekulinės dinamikos metodai naudojant Gaussian ir GROMACS programas.	Stilbene and its derivatives exhibit unique optical, fluorescent, and biological properties, making them highly relevant in materials science, drug design, and sensor technologies. This project will model potential complexes of stilbene and its derivatives with other molecules to evaluate interaction mechanisms, structural stability, and physicochemical characteristics. Molecular dynamics methods will be applied using Gaussian and GROMACS software.
4.	Mindaugas Mačernis	Vandeninių karbamido-biureto tirpalų struktūros ir spektroskopinių savybių tyrimas taikant kvantinę chemiją ir molekulinę dinamiką	Structural and Spectroscopic Investigation of Aqueous Urea–Biuret Solutions Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics	Karbamido ir biureto mišiniai vandenyje formuoja sudėtingas vandenilinių ryšių struktūras, kurių pobūdis priklauso nuo tirpalo sudėties ir temperatūros. Dėl to sugerties spektrai nukrypsta nuo Lamberto dėsnio, o įprasti daugiamatės kalibracijos metodai (MLR, PCR, PLS, MCR) tampa netikslūs. Šio darbo tikslas – taikant kvantinę chemiją (DFT) ir molekulinės dinamikos metodus (Amber), ištirti šių tirpalų struktūrinius pokyčius ir jų poveikį virpesiniams spektrams.	Urea–biuret aqueous mixtures form complex hydrogen-bonded networks that vary with solution composition and temperature. These variations lead to deviations from the Lambert–Beer law, making conventional multivariate calibration methods (MLR, PCR, PLS, MCR) unreliable. This project aims to study the structural changes and hydrogen bonding effects in such systems using quantum chemistry (DFT) and molecular dynamics (Amber). The goal is to understand their influence on vibrational spectra.
5.	Mindaugas Mačernis	Beta-ciklodekstrino ir likopeno karotinoido kompleksų modeliavimas naudojant molekulių dinamikos ir tankio funkcionalo teorijos metodus	Modeling of Beta-Cyclodextrin and Lycopene Complexes Using Molecular Dynamics and Density Functional Theory Methods	Likopenas – tai lipofilinis karotinoidas, turintis sudėtingą konjuguotą sistemą, o beta-ciklodekstrinas – hidrofilinis oligosacharidas, galintis formuoti įtraukiamuosius kompleksus su hidrofobiniais junginiais. Toks kompleksavimas svarbus farmacijoje, nes gali pagerinti likopeno tirpumą ir stabilumą. Šio darbo tikslas – ištirti beta-ciklodekstrino ir likopeno sąveiką, taikant molekulinės dinamikos (MD) modeliavimą bei tankio funkcionalo teoriją (DFT). Bus nagrinėjama kompleksų stabilumo, vandenilinių ryšių ir van der Waals sąveikų reikšmė. Skaičiavimai bus atliekami naudojant AMBER ir Gaussian programas, siekiant nustatyti optimalią kompleksavimo geometriją bei galimą poveikį likopeno spektroskopinėms savybėms.	Lycopene is a lipophilic carotenoid with an extended conjugated system, while beta-cyclodextrin is a hydrophilic oligosaccharide capable of forming inclusion complexes with hydrophobic molecules. Such interactions are of pharmaceutical interest, as they can improve lycopene's solubility and stability. This project aims to investigate the molecular interaction between beta-cyclodextrin and lycopene using molecular dynamics (MD) and density functional theory (DFT). The study will analyse the role of hydrogen bonding and van der Waals forces in complex stability. Calculations will be performed using AMBER and Gaussian to determine the optimal geometry and potential effects on the spectroscopic properties of lycopene.
6.	Robertas Maldžius	E Stilbeno ir polimero mišinių dielektrinių savybių tyrimai dozuoto įelektrinimo-išelektrinimo metodu	Studies of dielectric properties of E-Stilbene and polymer mixtures using the dosed charge-discharge method	Pastaruoju metu ypač domimasi mažamolekulinių medžiagų ir vidutinio dydžio molekulių junginių arba polimerų mišiniais, kuriuose galima pasiekti dielektrinių savybių anomalijų. Dozuoto įelektrinimo metodika įgalina tyrinėti bei identifikuoti krūvininkų dinamiką, išmatuoti visą eilę dielektrinių parametrų: ribinį	Recently, there has been particular interest in mixtures of low-molecular substances and medium-sized molecular compounds or polymers, in which anomalies in dielectric properties can be achieved. The dosed charging methodology enables the study and identification of the dynamics of charge carriers, the measurement of a whole

				įelektrėjimo potencialą, paviršinio krūvio injekcijos sroves, efektingą dielektrinę skvarbą bei dielektrinį storį ir kt. Darbo metu matuojame naujai pagamintų mišinių sluoksnių voltkulonines bei voltfaradines charakteristikas, analizuojame kreives ir rezultatus siejame su medžiagos molekulių struktūra bei gamybos proceso ypatumais.	range of dielectric parameters: the limiting charging potential, surface charge injection currents, the effective dielectric permeability and dielectric thickness, etc. During the work, we measure the voltculombic and voltfaradic characteristics of newly produced mixture layers, analyze the curves, and relate the results to the molecular structure of the material and the characteristics of the production process.
7.	Robertas Maldžius	Naujai sintetinamų organinių medžiagų fotovoltaiškai fotogeneracijos našumo ir spektrinio fotojautrio tyrimai	Studies on the photogeneration efficiency and spectral photosensitivity of newly synthesized organic materials for photovoltaics	Fotovoltinio prietaiso veikimas esmingai priklauso nuo jo gebėjimo efektyviai generuoti elektros krūvio nešėjus. Darbo metu matuojame krūvininkų fotogeneracijos kvantinio našumo koeficientą ir fotojautrį, kai tiriamąjį sluoksnį apšviečiame monochromatine šviesa iš plataus spektro: nuo ultravioletinės iki infraraudonos šviesos. Chemikų grupės naujai susintetintose medžiagose ieškome ryšio tarp gamybos proceso ypatumų bei minėtų spekt-rinių charakteristikų.	The operation of a photovoltaic device depends fundamentally on its ability to efficiently generate electric charge carriers. During the work, we measure the photogeneration quantum efficiency coefficient and photosensitivity of charge carriers when we illuminate the test layer with monochromatic light from a wide spectrum: from ultraviolet to infrared light. In the newly synthesized materials by the group of chemists, we are looking for a connection between the peculiarities of the production process and the mentioned spectral characteristics.
8.	Robertas Maldžius	Elektrinio išlydžio ore poveikis vandens garų difuzijai mikroceliuliozės dangose	Effect of electrical discharge in air on water vapor diffusion in microcellulose coatings	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.
9.	Vygintas Jankauskas	Krūvio pernašos tyrimas naujose organinėse elektronų pernašos medžiagose	Investigation of charge transport in novel organic electron transport materials	Išmokti daryti XTOF (kserografinio lėkio trukmės) bandinius iš nurodytų naujų organinių medžiagų, atlikti XTOF tyrimus, ištirti krūvio pernašą tose medžiagose.	Learn to make XTOF samples from the specified new organic materials, perform XTOF studies, and investigate charge transfer in these materials.
10.	Rokas Dobužinskas	Elektrai laidžių siūlinių bakterijų fizikinių savybių tyrimas	Investigation of the Physical Properties of Electrically Conductive Filamentous Bacteria	Pastaraisiais metais gyvybės ir fizinių mokslų bendruomenėje susidomėta specifiniu siūlinių bakterijų tipu, pasižyminčiu pailga, iki centimetrų ilgio daugialąste struktūra, gebančia perduoti elektros srovę išilgai gijos. Šios bakterijos oksiduoja sieros junginius ir geba perduoti krūvį dideliais atstumais tarp skirtingų terpių, erdviškai atskiriant oksidacijos ir redukcijos procesus. Šio darbo tikslas – ištirti siūlinių elektrai laidžių bakterijų sudėtį, jų fizikines savybes ir krūvio	In recent years, the life and physical sciences communities have shown increasing interest in a specific type of filamentous bacteria characterized by an elongated, multicellular structure that can reach up to centimeters in length and is capable of conducting electric current along the filament. These bacteria oxidize sulfur compounds and are able to transport charge over long distances between different environmental zones, spatially separating oxidation and reduction processes. The aim of this work is

				pernašos mechanizmus. Bus analizuojama, kaip gijinė struktūra ir sudedamosios dalys lemia fizikines savybes bei jų priklausomybes nuo aplinkos sąlygų.	to investigate the composition of electrically conductive filamentous bacteria, as well as their physical properties and charge transport mechanisms. The analysis will focus on how the filamentous structure and its components determine physical properties and how these properties depend on environmental conditions.
11.	Rokas Dobužinskas	Inovatyvių medžiagų taikymas vėžinių radiacinių terapijų sugertosios dozės stebėjimams	Application of Inovative Materials for Monitoring Absorbed Dose in Cancer Radiation Therapies	Organinės funkcinės medžiagos yra plačiai taikomos, automobilių pramonėje, elektrografijoje ir elektronikoje, jų pagrindu veikia ir buitiniai prietaisai, pavyzdžiui OLED vaizduokliai. Šios medžiagos mažai paplitusios medicinos priemonėse, ypač elektroninių elementų sistemose bei įvairiuose diagnostikos prietaisuose. Ši tema skirta organinių funkcinės medžiagų taikymui radiacinės terapijos metu. Darbo metu bus galimybė tyrinėti naujai patentuotas partnerių medžiagas ir išbandyti įvairias priemones jonizuojančios spinduliuotės detektavimui. Tyrimo tikslas – sukurti ar iširti medžiagas, kurios galėtų būti naudojamos vienaip ar kitaip įvertinti sugertąją dozę, leidžiantys tiksliai stebėti pacientų gydymo eigą. Tokie sprendimai palengvina darbą terapijos specialistams ir pagerina pacientų saugą.	Organic functional materials are widely used in various fields, including the automotive industry, electrophotography, and electronics. They are also the basis for household devices such as OLED displays. However, these materials are still relatively rarely applied in medical devices, especially in electronic systems and various diagnostic instruments. This work focuses on the application of organic functional materials in radiation therapy. During the study, there will be an opportunity to investigate newly patented materials developed by partners and to test various methods for detecting ionizing radiation. The aim of the research is to develop or investigate materials that could be used to simultaneously and directly measure the absorbed dose, enabling precise monitoring of the patient's treatment process in real time. Such solutions would facilitate the work of therapy specialists and significantly improve patient safety.
12.	Rokas Dobužinskas	Funkcinių sluoksnių auginimas vakuuminėje terpėje ir jų kristalinių savybių tyrimas	Growth of Functional Layers in a Under Vacuum Conditions and Investigation of Their Crystalline Properties	Vakuuminio nusodinimo metodai yra plačiai naudojami plonų sluoksnių gamybai. Šiais metodais galime pagaminti aukšto grynumo ir kontroliuojamos struktūros darinius. Proceso metu reagentai dujinėje fazėje reaguoja ir nusėda ant pasirinkto pagrindo, pavyzdžiui, kvarcinio stiklo ar monokristalinio silicio. Plonų sluoksnių savybės priklauso nuo temperatūros, slėgio, reagentų sudėties, o formuojamus darinius siekiama pagaminti aukštos kristalinės kokybės. Kristalinių savybių tyrimui dažniausiai naudojami rentgeno difrakcija (XRD) ir mikroskopija. Šie tiriamieji metodai padeda optimizuoti gamybos principą siekiant gauti pageidaujamas dangų savybes aukštųjų technologijų vystymo sektoriuose.	Vacuum deposition methods are widely used for the fabrication of thin films. These methods allow the production of compounds with high purity and controlled structure. During the process, reagents in the gas phase react and deposit onto a chosen substrate, such as quartz glass or single-crystal silicon. The properties of thin films depend on temperature, pressure, and reagent composition, while the formed structures are aimed to achieve high crystalline quality. X-ray diffraction (XRD) and microscopy are most commonly used to study crystalline properties. These research methods help optimize the manufacturing process in order to obtain coatings with desired properties for advanced technology sectors.
13.	Rokas Dobužinskas	Stilbeno ir jam giminingų darinių fizikinių savybių	Investigation of the Physical Properties of Stilbene and Related	Stilbenas ir jo dariniai pasižymi įdomiomis optinėmis bei elektroninėmis savybėmis, todėl yra plačiai tiriami organinėje elektronikoje ir fotonikoje. Šiuo metu susitelkus šias medžiagas tyrinėja mokslinės grupės iš	Stilbene and its derivatives exhibit interesting optical and electronic properties, making them widely studied in organic electronics and photonics. Currently, research groups from the Institute of Chemical Physics are actively

		tyrimas mišiniuose su polimerais	Compounds in Mixtures with Polymers	Cheminės fizikos instituto. Medžiagos įdomios tuo, kad susidarydamos į stabilius kristalinius darinius šimtus kartų padidina dielektrinę skvarbą, o tai sukuria didelį taikymų spektrą organinėje elektronikoje. Šio darbo tikslas – ištirti stilbeno ir jam giminingų medžiagų kristalines savybes, kai jos yra įmaišytos į įvairias polimerines matricas. Bus analizuojama, kaip polimerinė aplinka veikia kristalizacijos procesus, medžiagų morfologiją ir galimas taikymo sritis, pavyzdžiui, šviesą skleidžiančiuose įtaisuose ar jutikliuose.	investigating these materials. These materials are of particular interest because, when forming stable crystalline structures, they can increase dielectric permittivity by several orders of magnitude, which opens up a wide range of applications in organic electronics. The aim of this work is to investigate the crystalline properties of stilbene and related materials when they are incorporated into various polymer matrices. The study will analyze how the polymer environment affects crystallization processes, material morphology, and potential application areas, such as light-emitting devices or sensors.
14.	Rokas Dobužinskas	Plonų organinių elektrodų gamyba ir jų taikymas biologinių objektų impedanso spektrometrijoje	Fabrication of Thin Organic Electrodes and Their Application in Impedance Spectrometry of Biological Objects	Organiniai biojutikliai yra naujos kartos jutikliai, kurių gamyboje tradicinės neorganinės medžiagos keičiamos organinėmis. Šios medžiagos pasižymi unikaliomis elektroninėmis savybėmis, o jas taikant yra galimybė sukurti lankstesnius, pigesnius ir jautresnius prietaisus, kurie gali būti pritaikyti įvairioms biomedicinos ir aplinkosaugos sritims. Pagrindinis stebėjimo metodas – impedanso spektrometrija, leidžianti vienalaikiai stebėti elektrocheminius procesus skystoje biologinių objektų fazėje. Šio darbo tikslas – suformuoti lanksčias plonasluoksnes struktūras, skirtas mikroorganizmų stebėjimui, ištirti jų veikimą ir elektrines savybes.	Organic biosensors are a new generation of sensors in which traditional inorganic materials are replaced with organic ones. These materials exhibit unique electronic properties, and their application enables the development of more flexible, cost-effective, and sensitive devices that can be adapted to various fields of biomedicine and environmental monitoring. The primary measurement technique is impedance spectroscopy, which allows simultaneous monitoring of electrochemical processes in the liquid phase of biological systems. The aim of this work is to develop flexible thin-film structures for monitoring microorganisms, as well as to investigate their performance and electrical properties.
15.	Gytis Sliaužys	Krūvio parnašos savybių tyrimas TiO ₂ /P3HT/Au bandiniuose	Investigation of charge transport properties in TiO ₂ /P3HT/Au samples	Tyrimo tikslas ištirti pusiausvyrinių ir foto generuotų krūvininkų generacijos ir parnašos savybes TiO ₂ /P3HT struktūrose.	The aim of the study is to investigate the generation and transport properties of equilibrium and photogenerated charge carriers in TiO ₂ /P3HT structures.
16.	Kristijonas Genevičius	Krūvininkų parnaša bei rekombinacija tūrinėse heterosandūrose su nefulereniniais akceptoriais	Charge carrier transport and recombination in bulk heterojunctions with non-fullerene acceptors	Bus gaminami bandiniai, naudojant skirtingas donoro–akceptoriaus sistemas, ir vertinama jų morfologijos bei sudėties įtaka elektrinėms savybėms. Krūvininkų parnašos mechanizmai bei rekombinacija bus analizuojami taikant CELIV, TOF ir kitus charakterizavimo metodus. Gauti rezultatai leis įvertinti judrį, krūvininkų gyvavimo trukmę ir dominuojančius nuostolių mechanizmus.	Samples will be fabricated using different donor–acceptor systems, and the influence of their morphology and composition on electrical properties will be evaluated. Charge carrier transport mechanisms and recombination processes will be analyzed using CELIV, TOF, and other characterization techniques. The results obtained will allow to evaluate mobility, the lifetime of carriers, and the dominant loss mechanisms
17.	Kristijonas Genevičius	Rekombinacijos procesų bei krūvininkų ištraukimo modeliavimas	Modeling of recombination processes and charge carrier extraction using the finite element method	Bus modeliuojamas foto-CELIV (fotogeneruotų krūvininkų ištraukimas tiesiškai kylančia įtampa) eksperimentas tūrinėse heterosandūrose. Modeliavimas leis išanalizuoti krūvininkų pasiskirstymo, gyvavimo trukmės bei rekombinacijos mechnizmo įtaką	The photo-CELIV (photogenerated charge extraction by linearly increasing voltage) experiment in bulk heterojunctions will be modeled. The modeling will enable analysis of how charge carrier distribution, lifetime, and recombination mechanism influence the kinetics of the

		baigtinių element metodu		ekstracinės srovės kinetikai. Skaičiavimai bus atliekami programavimo kalbas JULIA arba C++.	extraction current. The calculations will be implemented using the Julia or C++ programming languages.
18.	Stepas Toliautas	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.	The microscopic properties of fluids give rise to the nonlinear phenomena observed in them, such as self-organization and chaos, which can be described through analytical solutions but are not that straightforward to model numerically, on an individual-particle scale. In this study, problems of fluid dynamics will be attempted to be solved in “real time,” i.e., calculating/rendering 1 second of the time-dependent solution in 1 second of real time (or faster).
19.	Stepas Toliautas	Šviesai jautrių molekulių sužadavimo vyksmų modeliavimas	Modeling of excited-state pathways in photoactive molecules	Optiškai aktyvių molekulių potencinės energijos paviršių ir spektrinių savybių modeliavimas kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos metodais, naudojant Vilniaus universiteto superkompiuterius. Tyrimo tema tikslinama suderinus su studentu, nurodant konkretų junginį.	Quantum-chemical and molecular-dynamics modeling of the potential-energy surfaces and spectral properties of optically active molecules, performed using Vilnius University supercomputing facilities. Research topic is updated after choosing a certain molecular compound together with the student.
20.	Romualdas Jonas Čepas	Organinių ir neorganinių krūvio pernašos sluoksnių formavimas bei pritaikomumo tyrimas saulės elementų struktūroms	Formation of Organic and Inorganic Charge Transport Layers and Study of Their Suitability for Solar Cell Structures	Šio bakalauro praktikos darbo metu būtų formuojami ir tiriami organiniai bei neorganiniai krūvio pernašos sluoksniai, skirti organinių saulės elementų struktūroms. Darbe būtų siekiama įvertinti skirtingos prigimtės tarpsluoksnių optines, morfologines ir elektrines savybes, jų tinkamumą krūvininkų pernašai bei galimą įtaką rekombinaciniams nuostoliams organinėse fotovoltinėse struktūrose. Tyrimų metu būtų nagrinėjami sluoksnių formavimo iš tirpalų metodai, vertinama jų paviršiaus kokybė, optinis pralaidumas, suderinamumas su aktyviaisiais organiniais puslaidininkiniais sluoksniais ir įtaka organinių saulės elementų charakteristikoms. Tokie tyrimai leistų palyginti skirtingų medžiagų klasių privalumus ir ribojimus bei įvertinti jų pritaikomumą organinėms saulės celėms.	During this bachelor’s internship project, organic and inorganic charge transport layers intended for organic solar cell structures would be formed and investigated. The aim of the work would be to evaluate the optical, morphological and electrical properties of charge transport layers based on different material classes, as well as their suitability for charge carrier transport and their possible influence on recombination losses in organic photovoltaic structures. The study would focus on solution-based methods for forming these layers, including the evaluation of their surface quality, optical transmittance, compatibility with active organic semiconductor layers, and influence on the characteristics of organic solar cells. Such studies would help compare the advantages and limitations of different material classes and assess their potential use in organic solar cells.
21.	Stepas Toliautas	Mašinų mokymo metodų taikymas molekulių savybių tyrimams naudojant kvantinės chemijos modelius papildyti	Using machine learning to augment quantum-chemical molecular modeling	Tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai naudojant superkompiuterius, duomenų analizė ir rezultatų panaudojimas mašinų mokymo modeliams (įskaitant generatyvinius dirbtinio intelekto modelius), siekiant perkelti chemines įžvalgas į dirbtinio intelekto algoritmus.	Density-functional theory computations using supercomputing facilities, data analysis and the application of results to machine-learning models (including generative AI models), with the aim of translating chemical insights into algorithms of artificial intelligence.

22.	Liudas Tumonis	Elektrinio šiluminio raketinio variklio gamybos netikslumų įtaka jo parametrų išsibarstymui	The influence of manufacturing inaccuracies in a resistojet nozzle on the dispersion of its parameters	Kritinių geometriškai sudėtingų kvarcinių variklio dalių gamyba taikant lazerinio pjovimo technologiją lemia gamybos netikslumus, dėl ko atsiranda variklio darbinio parametrų, tokių, kaip darbinės medžiagos debito, išmetimo greičio ar varos jėgos išsibarstymai. Studentui(-ei) reikės išbandyti kelis komplektus variklių ir išmatuoti svarbiausių parametrų išsibarstymą.	The production of critical geometrically complex fused silica engine parts using laser cutting technology leads to manufacturing inaccuracies, which leads to dispersion of engine operating parameters, such as working material flow rate, specific impulse or thrust force. The student will need to test several sets of engines and measure the dispersion of the most important parameters.
23.	Liudas Tumonis	Elektrinio šiluminio raketinio variklio pritaikymo skirtingoms darbinėms medžiagoms tyrimas	Feasability study of application of different propellants for resistojet thruster	Medžiagos kambario temperatūroje turinčios didesnį sočiųjų garų slėgį, nei vanduo turi potencialo būti panaudotos kaip elektrinio šiluminio variklio darbinė medžiaga. Studentas(-ė) darbo metu išmatuos variklio darbinės savybes jam veikiant su tiriamosiomis medžiagomis.	Liquids that have a higher saturated vapor pressure than water at room temperature have the potential to be used as resistojet thruster propellants. During the work, the student will measure the performance of the thruster when it is operating with the test materials.
24.	Mindaugas Viliūnas	Dvikryptiškumo įtakos GaN raktinių darinių charakteristikoms tyrimas.	Investigation into the Impact of Bidirectionality on the Characteristics of GaN Switching Structures.	Idealaus puslaidininkinio jungiklio sukūrimas išlieka vienu esminių šiuolaikinių komutavimo technologijų tikslų. Šioje srityje dabar pirmauja GaN lauko tranzistoriai, tačiau įprasti jų dariniai turi esminį apribojimą – gebėjimą valdyti srovę tik viena kryptimi. Siekiant įveikti šį barjerą, pastaruoju metu buvo sukurti dviejų konfigūracijų dvikrypčiai GaN raktai: su atskirais ir su bendru valdymo elektrodu. Šio darbo tikslas – remiantis gamintojų pateiktais duomenimis ir atliktų eksperimentinių matavimų rezultatais, atlikti šių dvikrypčių struktūrų lyginamąją analizę bei įvertinti jų charakteristikas standartinių vienkrypčių GaN lauko tranzistorių atžvilgiu.	The creation of an ideal semiconductor switch remains one of the fundamental goals of modern switching technologies. Currently, GaN field-effect transistors lead this field, but their conventional structures have a major limitation – the ability to control current in only one direction. To overcome this barrier, two configurations of bidirectional GaN switches have recently been developed: with separate and with a common gate. The aim of this work is to perform a comparative analysis of these bidirectional structures and evaluate their characteristics against standard unidirectional GaN field-effect transistors, based on manufacturer data and experimental measurement results.
25.	Mindaugas Viliūnas	Energiją surenkančių valdiklių su didžiausios galios taško sekimu (MPPT) ir perjungiamųjų talpų keitikliais tyrimas.	Investigation of Energy Harvesting Controllers with Maximum Power Point Tracking (MPPT) and Switched-Capacitor Converters.	Efektyvūs energiją surenkantys valdikliai yra įtampos keitikliai, valdomi pagal didžiausios galios taško sekimo algoritmą. Didžioji dalis šių prietaisų elektronikos komponentų gali būti integruojama į vieną itin mažų gabaritų puslaidininkinį lustą, išskyrus energijos transformacijai būtinus reaktyvinius elementus. Šiuo metu rinkoje, ypač didesnės galios sistemose, dominuoja induktyvumo ritės ir transformatoriai. Alternatyvus sprendimas – perjungiamųjų talpų keitikliai. Nors jų valdymo topologija yra sudėtingesnė, jie leidžia pasiekti žymiai didesnį galios tankį ir užima mažesnę tūrį. Esant aukštam darbo dažniui ir nedidelei galiai, mažos talpos kondensatorius galima integruoti tiesiogiai į valdiklio mikroschemą. Šio darbo tikslas –	Efficient energy harvesting controllers are voltage converters controlled by a maximum power point tracking (MPPT) algorithm. Most of the electronic components in these devices can be integrated into a single ultra-small semiconductor chip, except for the reactive elements required for energy transformation. Currently, inductors and transformers dominate the market, particularly in higher power systems. An alternative solution is switched-capacitor converters. Although their control topology is more complex, they allow for a significantly higher power density and occupy a smaller volume. At high operating frequencies and low power levels, small-capacitance capacitors can be integrated directly into the controller chip. The aim of this work is to review existing

				atlikti esamų technologinių sprendimų apžvalgą šioje srityje bei eksperimentiškai ištirti pasirinktus komerciškai prieinamus perjungiamųjų talpų valdiklius.	technological solutions in this field and to experimentally investigate selected commercially available switched-capacitor controllers.
26.	Nerijus Nekrašas	Organinių lauko tranzistorių su polikristalinėmis medžiagomis gamyba ir tyrimas	Fabrication and Characterization of Organic Field-Effect Transistors with Polycrystalline Materials	Organiniai lauko tranzistoriai (OFET) yra perspektyvūs elektronikos komponentai, kuriuos galima gaminti pigiau ir paprasčiau nei įprastus silicio tranzistorius. Jie gali būti naudojami lanksčioje elektronikoje, jutikliuose, išmaniosiose pakuotėse ir kituose naujos kartos elektronikos įrenginiuose. Šiame darbe bus tirama nauja polikristalinė organinė medžiaga, kuri galėtų tapti aktyviuoju OFET sluoksniu. Tikimasi, kad ši medžiaga išlaikys vieną svarbiausių organinių puslaidininkių privalumų – nebrangią gamybą iš tirpalų, tačiau pasižymės geresniu krūvininkų judriu nei daugelis šiuo metu naudojamų polimerinių medžiagų. Didesnis judris leistų sukurti greitesnius ir efektyvesnius elektroninius prietaisus. Studentas gamins tranzistorinius darinius ir matuos elektrines prietaisų charakteristikas. Darbo metu bus analizuojama, kaip tranzistoriaus charakteristikos priklauso nuo medžiagos struktūros ir gamybos sąlygų, bei vertinama naujos medžiagos perspektyva organinėje elektronikoje. Darbas tinka studentams, kurie domisi elektronika, medžiagų mokslu, ar puslaidininkių fizika, bus reikalingas pagrindinių fizikos principų supratimas, kruopštumas ir noras dirbti laboratorijoje.	Organic field-effect transistors (OFETs) are promising electronic components that can be manufactured more cheaply and simply than conventional silicon-based transistors. They can be used in flexible electronics, sensors, smart packaging, and other next-generation electronic devices. This project will investigate a novel polycrystalline organic material that could serve as the active layer in OFETs. Such materials are expected to retain one of the key advantages of organic semiconductors - the ability to be processed from solution using low-cost fabrication methods, while exhibiting higher charge-carrier mobility than many of the polymer-based materials currently in use. Increased mobility would enable the development of faster and more efficient electronic devices. The student will prepare transistor devices and measure their electrical characteristics. The project will involve analysis of how transistor performance depends on the material's structure and fabrication conditions, as well as evaluating the potential of the new material for applications in organic electronics. The project is suitable for students interested in electronics, materials science, or semiconductor physics. A basic understanding of physics, attention to detail, and a willingness to work in a laboratory environment will be important.
27.	Nerijus Nekrašas	Organiniai scintiliaciniai kompozitai trans-stilbeno pagrindu rentgeno spinduliuotės registravimui	Trans-Stilbene-Based Organic Scintillation Composites for X-Ray Detection	Rentgeno spinduliuotės detektoriai naudojami medicinoje, pramonėje ir moksliniuose tyrimuose, tačiau daugelis jų yra brangūs arba sudėtingai gaminami. Šiame darbe bus kuriama nauja organinė kompozitinė medžiaga, sudaryta iš trans-stilbeno kristalitų ir specialaus krūvį pernešančio polimero. Trans-stilbenas sugerdamas rentgeno spinduliuotę spinduliuoja matomą šviesą, o polimeras pavers ją elektriniu atsaku. Studentas gamins skirtingos sudėties mėginius, tirs jų savybes bei vertins jų tinkamumą rentgeno spinduliuotės registravimui. Darbo metu bus galima	X-ray detectors are widely used in medicine, industry, and scientific research; however, many existing detector technologies are expensive or require complex fabrication processes. This project will focus on the development of a novel organic composite material consisting of trans-stilbene crystallites embedded in a specialized charge-transporting polymer. Upon absorbing X-ray radiation, trans-stilbene emits visible light, while the polymer converts this optical signal into an electrical response. The student will prepare samples with different compositions, investigate their properties, and evaluate their suitability for X-ray detection. The project will

				susipažinti su modernių funkcinų medžiagų gamyba, elektrinių tyrimų metodais ir rentgeno detektorių veikimo principais. Šis darbas yra eksperimentinio pobūdžio, todėl studentas įgis praktinės patirties dirbdamas tiek technologinėje laboratorijoje, tiek su matavimo įranga. Darbas labiausiai tinka studentams, kurie domisi medžiagų mokslu, elektronika arba naujų jutiklių kūrimu.	provide hands-on experience in the fabrication of advanced functional materials, electrical characterization techniques, and the operating principles of X-ray detectors. This experimental project will involve acquiring practical skills both in a technology laboratory and in the use of measurement equipment. It is particularly suitable for students interested in materials science, electronics, or the development of novel sensing technologies.
28.	Valdas Šablinskas	Lakių feromoninių molekulių charakterizavimas spektriniu SERS metodu	Characterisation of volatile pheromone molecules by means of spectroscopic SERS method	Vabzdžiai išskiria įvairias feromonines molekules, kurių struktūra dažnai nėra tiksliai žinoma, nes tai dujiniai labai mažos koncentracijos molekuliniai junginiai. SERS spektroskopija yra labai jautrus metodas molekulių struktūros nustatymui, tačiau ji panaudoti dujiniams bandiniams sunku, nes taikant šį metodą būtina tiriama molekules adsorbuoti ant plazmoninio paviršiaus. Ši problema ir bus sprendžiama šioje rudens semestro praktikoje.	Insects in their signalling system use various pheromone molecules, but in many cases exact structure of such molecules is unknown since pheromones usually are in gaseous low concentration state. SERS is known as very sensitive method for structural analysis of molecules, but it is difficult to apply this method for pheromone molecules since the method requires to have molecules of interest absorbed on plasmonic surfaces. The student work is dealing with problem of obtaining of SERS spectra of pheromone molecules.
29.	Kęstutis Aidas	Cholino lizinato ir vandens mišinių molekulinės dinamikos modeliavimas	Molecular Dynamics Simulation of Aqueous Mixtures of Choline Lysinate	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 detalio informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliname lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninio skysčio cholino lizinato ir vandens mišinių struktūra ir dinamika taikant modernius molekulių sistemų modeliavimo metodus - klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijas. Neseniai parodėme, kad cholino katijono, lizinato anijono ir vandens molekulių difuzijos koeficientams būdingi "greitos difuzijos" ir "lėtos difuzijos" režimai, ir nuo vieno prie kito įvyksta šuoliškas perėjimas, kuomet cholino lizinato molinė dalis pasiekia 11%. Šiame darbe šis reiškinys bus nagrinėjamas detalio, taikant molekulių dinamikos	Ionic liquids are modern materials that currently are the subject of intensive research. They are composed exclusively of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Owing to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that enable a wide range of applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information on the structure and dynamics of these systems at the molecular level is essential. In this study, the structure and dynamics of mixtures of the 3rd-generation ionic liquid choline lysinate and water will be investigated using modern molecular modeling techniques, specifically classical molecular dynamics simulations. We have recently demonstrated that the diffusion coefficients of choline cations, lysinate anions, and water molecules exhibit distinct "fast-diffusion" and "slow-diffusion" regimes, with an abrupt transition occurring when the mole fraction of choline lysinate reaches 11%. This phenomenon will be examined in detail through molecular dynamics simulations in this work. All

				simuliacijas. Visi modeliavimo darbai bus atliekami VU aukšto našumo skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu.	computations will be performed on the supercomputer at the High Performance Computing Center “HPC Saulėtekis” of Vilnius University.
30.	Jogilė Mačytė	Valerijono rūgšties kompleksų tyrimai spektroskopijos metodais	Spectroscopic studies of Valeric Acid complexes	Šio tyrimo tikslas – naudojant matricinės izoliacijos FTIR spektroskopiją ir kvantinės chemijos skaičiavimus išanalizuoti valerijono rūgšties dimerų bei jos kompleksų su vandeniu struktūrinės savybės ir tarp molekulinės sąveikas. Kadangi ši rūgštis pasižymi didele konformacine įvairove, tyrimas žemoje temperatūroje leidžia išskirti ir identifikuoti susiformavusias struktūras. Eksperimentinių ir teorinių virpesių spektrų palyginimas suteikia fundamentalių žinių apie šių sistemų erdvinę sandarą ir molekulinės charakteristikas.	The aim of this study is to analyze the structural properties and intermolecular interactions of valeric acid dimers and its complexes with water using matrix isolation FTIR spectroscopy and quantum chemical calculations. Due to the high conformational diversity of this acid, low-temperature investigation allows for the isolation and identification of the formed structures. A comparison of experimental and theoretical vibrational spectra provides fundamental knowledge about the molecular structure and molecular characteristics of these systems.
31.	Dovilė Lengvinaitė	Molekulinės dinamikos simuliacijos cholino glicinato joninio skysčio ir vitamino B2 vandens tirpiklyje.	Molecular dynamics simulations of choline glycinate ionic liquid and vitamin B2 in aqueous solvent.	Šios praktikos metu būtų siekiama įvertinti III kartos joninio skysčio, konkrečiai - cholino glicinato galimybes padidinti vitamino B2 tirpumą vandenyje.	The aim of this internship would be to evaluate the potential of a third-generation ionic liquid, specifically choline glycinate, to enhance the solubility of vitamin B2 in water.