

# MOKSLO TIRIAMOJO PROJEKTO (MTP) TEMOS

## 2026 rudens semestras

|    | Darbo vadovas  | Institutas | Tema lietuvių kalba                                                    | Tema anglų kalba                                                      | Aprašymas lietuvių kalba                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Aprašymas anglų kalba                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|----|----------------|------------|------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. | Kęstutis Aidas | ChFI       | Cholino lizinato ir vandens mišinių molekulinės dinamikos modeliavimas | Molecular Dynamics Simulation of Aqueous Mixtures of Choline Lysinate | <p>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 unikalėmis savybėmis, kurios atveria duris įvairialypiams jų taikymams cheminėje inžinerijoje, gyvybės moksluose ir nanotechnologijose. Siekiant suprasti ir kontroliuoti joninių skysčių fiziko-chemines savybes, būtina disponuoti detalios informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniam lygmenyje.</p> <p>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 detalios, taikant molekulių dinamikos simuliacijas. Visi modeliavimo darbai bus atliekami VU aukšto našumo</p> | <p>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.</p> <p>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 computations will be performed on the supercomputer at the High Performance</p> |

|    |                      |      |                                                                                                        |                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|----|----------------------|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|    |                      |      |                                                                                                        |                                                                                                                     | skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Computing Center “HPC Saulėtekis” of Vilnius University.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 2. | Mindaugas Mačernis   | ChFI | Opsinų baltymų spektrinių savybių skaičiuojamasis tyrimas taikant molekulinę dinamiką ir QM/MM metodus | Computational Investigation of the Spectral Properties of Opsin Proteins Using Molecular Dynamics and QM/MM Methods | <p>Rega yra vienas seniausių biologinių šviesos surinkimo mechanizmų, kurio veikimas grindžiamas opsinų baltymų ir retinalio chromoforo sąveika. Šių sąveikų nulemti spektrinio derinimo mechanizmai aktyviai tiriami eksperimentiniais ir skaičiuojamaisiais metodais [1,2].</p> <p>Šio darbo tikslas – ištirti opsinų baltymų struktūros ir dinamikos įtaką retinalio chromoforo spektrinėms savybėms taikant molekulinės dinamikos (MD), kvantinės mechanikos ir molekulinės mechanikos (QM/MM) bei tankio funkcionalo teorijos (DFT) metodus. Baltymo–chromoforo kompleksas bus modeliuojamas naudojant AMBER ir GROMACS, o iš molekulinės dinamikos trajektorijų atrinktos reprezentatyvios konformacijos bus analizuojamos Gaussian programiniu paketu taikant QM/MM metodiką. Gauti rezultatai bus lyginami su literatūroje pateiktais eksperimentiniais ir teoriniais duomenimis apie opsinų struktūrą, spektrinį derinimą ir retinalio sąveikas [1,2].</p> <p>[1] S. Ohashi, K. Katayama, A. Kojima, et al., Structural insights into spectral tuning and retinal exchange in cone visual pigments, Science 392 (2026),<br/> [2] M. Mačernis et al., Mechanism of proton transfer in bacteriorhodopsin, Lith. J. Phys. 62 (2022).</p> | <p>Vision is one of the oldest biological light-harvesting mechanisms and is based on the interaction between opsin proteins and the retinal chromophore. The molecular mechanisms responsible for spectral tuning have been extensively investigated using both experimental and computational approaches [1,2].</p> <p>The aim of this thesis is to investigate the influence of the structure and dynamics of opsin proteins on the spectral properties of the retinal chromophore using molecular dynamics (MD), quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM), and density functional theory (DFT). The protein–chromophore complex will be modeled using the AMBER and GROMACS software packages, while representative conformations extracted from MD trajectories will be analyzed using the Gaussian software package within the QM/MM framework. The computational results will be compared with experimental and theoretical data reported in the literature on opsin structure, spectral tuning, and retinal interactions [1,2].</p> <p>[1] S. Ohashi, K. Katayama, A. Kojima, et al., Structural insights into spectral tuning and retinal exchange in cone visual pigments, Science 392 (2026),<br/> [2] M. Mačernis et al., Mechanism of proton transfer in bacteriorhodopsin, Lith. J. Phys. 62 (2022).</p> |
| 3. | Vytautas Klimavičius | ChFI | Zn-pagrindo baterijų elektrolitų BMR tyrimas                                                           | NMR investigation of electrolytes for                                                                               | Tirsime perspektyvių baterijų elektrolitus taikant BMR spektroskopiją. Bandysime susieti Mn tirpimą į elektrolitą ir                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | We will investigate electrolytes used in promising battery systems with NMR. We will relate dissolution of Mn into electrolyte with                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |

|    |                   |      |                                                                                                          | Zn-based batteries                                                                                      | užregistruotus relaksacijos parametrus.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | measured relaxation parameters.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|----|-------------------|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 4. | Stepas Toliautas  | ChFI | Klampos pokyčių lipidinėje membranoje modeliavimas                                                       | Modeling of viscosity changes in a lipid membrane                                                       | Kvantinės mechanikos, hidrodinamikos ir molekulių dinamikos skaičiavimai, siekiant suprasti stebimus reiškinius eksperimentinėse sistemose.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Combined computations of quantum mechanics, hydrodynamics and molecular dynamics with the aim to better understand experimentally-observed microscopic processes in real systems.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 5. | Stepas Toliautas  | ChFI | 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.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 6. | Rokas Dobužinskas | ChFI | Funkcinių sluoksnių auginimas vakuuminėje terpėje ir jų fizikinių savybių tyrimas                        | Growth of Functional Layers in a Under Vacuum Conditions and Investigation of Their Physical 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. |
| 7. | Rokas Dobužinskas | ChFI | Stilbeno ir jam giminingų darinių fizikinių savybių tyrimas                                              | 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |

|     |                        |      |                                                                      |                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----|------------------------|------|----------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                        |      |                                                                      | Compounds                                                                | <p>grupės iš 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.</p> | <p>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 lightemitting devices or sensors.</p> |
| 8.  | Tomas Šalkus           | TETI | Anodinių medžiagų, skirtų kuro gardelėms, elektrinių savybių tyrimas | Investigation of electrical properties of anode materials for fuel cells | <p>Kuro gardelėms naudojamos medžiagos yra cermetas, kurį sudaro cerio oksidas ir nikelis. Šiame kompozite elektros krūvį perneša deguonies jonai ir elektronai. Norint atskirti atskirų krūvininkų indėlį į bendrą laidumą, bus atliekami impedanso spektroskopijos tyrimai. Darbe reikės ruošti bandinius (suformuoti reikiamos geometrijos keramikas), atlikti matavimus ir specializuota programa atlikti rezultatų analizę.</p>                                                                                                                                  | <p>The materials used for fuel cells are cermets, which consist of cerium oxide and nickel. In this composite, the electric charge is carried by oxygen ions and electrons. In order to distinguish the contribution of individual charge carriers to the overall conductivity, impedance spectroscopy studies will be performed. The work will include samples preparation (shaping ceramics of the required geometry), performing measurements, and analyzing the results using a specialized program.</p>                                                                                                                            |
| 9.  | Kęstutis Ikamas        | TETI | Terahercinių šaltinių veikos žemose temperatūrose tyrimas            | Investigation of Terahertz Source Operation at Cryogenic Temperatures    | <p>Terahercinių šaltinių su lauko tranzistoriais paruošimas veikai ir charakterizavimas žemose temperatūrose</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | <p>Preparation and investigation of terahertz field-effect-transistor-based source operation at cryogenic temperatures</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| 10. | Jan Macutkevič         | TETI | Polimerinių kompozitų su nanodarinių dielektrinės savybės            | Dielectric properties of polymeric composites with nanoinclusions        | <p>Šiame darbe bus tiriamos kompozitų su įvairiais nanodarinių dielektrinės savybės. Bus nustatyta kokiomis sąlygoms esant kompozitai yra tinkami elektromagnetinių bangų slopinimui.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | <p>In this work will be investigated dielectric properties of composites with various nanoinclusions. It will be determined under what conditions the composites are suitable for electromagnetic wave attenuation.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 11. | Aleksejus Kononovičius | TFAI | Pirmo kirtimo laikai rinkėjo                                         | First-passage times in voter                                             | <p>Tikslas: ištirti pirmo kirtimo laikų statistiką rinkėjo modelyje su viešų-privačių būsenų</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | <p>Goal: explore first-passage time statistics within the voter model with public-private</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |

|     |                    |      |                                                  |                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|-----|--------------------|------|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                    |      | modelyje su<br>viešų-privačių<br>būsenų dinamika | model with<br>public-private<br>opinion dynamics        | <p>dinamika. Klasikinio rinkėjo modelio pirmojo kirtimo laikų statistinės savybės yra gerai žinomos. Įdomu, kaip jos pasikeičia įvedus privačias būsenas, atspindinčias išankstinį nusistatymą ar būsenų inerciją. Tokių būsenų įvedimas gali kokybiškai pakeisti tvarkos atsiradimo dinamiką ir statistiką. Ankstesnis darbas [Philos. Trans. A 380, 20210169] jau parodė, kad privačių būsenų mechanizmo įvedimas esmingai pakeičia modelio fazinį portretą - atsiranda papildomos metastabilios būsenos, kurios sulėtina tikros tvarkos būsenos nusistovėjimą. Šiuo darbu siekiam geriau suprasti, kaip mikroskopinių mechanizmų pokyčiai įtakoja tvarkos atsiradimą makroskopiniame lygmenyje.</p>                                                                                                                                                                 | <p>opinion dynamics. First-passage (consensus) time properties of the classical voter model are well-known. However, introducing a distinction between publicly expressed and privately held opinions can qualitatively alter the pathways and timescales to consensus, as hidden disagreement may persist even when public agreement appears complete. Recent work [Philos. Trans. A 380, 20210169] shows that such extensions lead to richer dynamical behavior, including delayed consensus and metastable states. Understanding how these effects manifest in first-passage statistics is therefore essential for connecting microscopic mechanisms with macroscopic emergence of order.</p>                                                                                                                                                                                    |
| 12. | Arnoldas Deltuva   | TFAI | Keistųjų dalelių<br>sąveikos ir<br>virsmas       | Interactions and<br>transitions of<br>strange particles | <p>Hiperonai yra barionai, sudaryti ne tik iš u ir d kvarkų, kaip protonai ir neutronai, bet turintys bent vieną keistąjį (s) kvarką. Lengviausi hiperonai, tokie kaip <math>\Lambda</math> ir <math>\Sigma</math>, yra nestabilūs ir skyla dėl silpnosios sąveikos, jų gyvavimo trukmė siekia apie <math>(10^{-10})</math> s. Kadangi hiperonai turi keistumo kvantinį skaičių, jų sąveikų tyrimai suteikia unikalią galimybę nagrinėti stipriąją sąveiką sistemoje, kurioje dalyvauja keistieji kvarkai. Hiperonai gali būti įterpti į atomų branduolius ir sudaryti hiperbranduolius, kurie yra svarbi laboratorija hiperonų–nukleonų bei hiperonų–hiperonų sąveikoms tirti. Šie tyrimai yra svarbūs ne tik siekiant geriau suprasti stipriąją sąveiką keistumo sektoriuje, bet ir aprašant tankią barioninę medžiagą, pavyzdžiui, neutroninių žvaigždžių vidų.</p> | <p>Hyperons are baryons containing one or more strange quarks in addition to the up and down quarks that constitute ordinary nucleons. The lightest hyperons, such as the <math>\Lambda</math> and <math>\Sigma</math> particles, are unstable and decay through the weak interaction with lifetimes of the order of <math>(10^{-10})</math> s. Since hyperons carry strangeness, their interactions provide a unique opportunity to study the role of strange quarks in hadronic and nuclear systems. Hyperons can be embedded in atomic nuclei to form hypernuclei, which serve as an important laboratory for investigating hyperon–nucleon and hyperon–hyperon interactions. These studies are relevant not only for understanding the strong interaction in the strangeness sector but also for describing dense baryonic matter, including the interior of neutron stars.</p> |
| 13. | Rytis Kazakevičius | TFAI | Apibendrintojo<br>Hurto H indekso<br>sąryšio su  | Determination of<br>the Relationship<br>Between the     | <p>Koši procesui H ir D sąryšis <math>H(D)</math> yra žinomas. H apibūdina ilgalaikes koreliacijas, o D – trumpalaikes savybes. Tačiau kitiems</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | <p>For the Cauchy process, the relationship between H and D, denoted as <math>H(D)</math>, is known. H describes long-term correlations, while D</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |

|     |                     |      |                                                                                                                                   |                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----|---------------------|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                     |      | fraktaline<br>dimensija D<br>nustatymas<br>savipanašioms<br>procesams                                                             | Generalized Hurst<br>Parameter (H) and<br>Fractal Dimension<br>(D) in Self-<br>Similar Processes.                    | savipanašioms (fraktaliniams) procesams šis<br>ryšys nėra žinomas, todėl bandysime jį<br>nustatyti. Abu dydžiai (H ir D) gali būti<br>naudojami kaip anomalios difuzijos<br>pasireiškimo tiriamose sistemose įverčiai.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | characterizes short-term properties. However,<br>for other self-similar (fractal) processes, this<br>relationship remains unknown, and we aim to<br>determine it. Both parameters (H and D) can<br>be used as indicators of anomalous diffusion<br>manifestations in studied systems.                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 14. | Rytis Kazakevičius  | TFAI | Bistabilių sistemų<br>pasiskirstymo<br>funkcijos<br>aproksimavimas<br>parametriniais<br>modeliais                                 | Approximation of<br>the Probability<br>Distribution<br>Function in<br>Bistable Systems<br>Using Parametric<br>Models | Praktikos metu studentai supažindinami su<br>bistabilių sistemų stochastinėmis<br>diferencialinėmis lygtimis, parametrų<br>įvertinimo metodais, Fokkerio–Planko<br>aproksimacijomis ir analiziniais metodais,<br>aprašančiais triukšmo sukeltus perėjimus<br>tarp metastabilių būsenų. Kviečiami<br>dalyvauti studentai, besidomintys<br>stochastiniais procesais, statistiniu vertinimu<br>ir matematiniu modeliavimu.                                                                                                                           | The practice introduces students to stochastic<br>differential equations for bistable systems,<br>parameter estimation methods, Fokker–Planck<br>approximations, and analytical approaches to<br>noise-induced transitions. Students interested<br>in stochastic processes, statistical evaluation,<br>and mathematical modeling are welcome to<br>participate.                                                                                                                                                                                                         |
| 15. | Rytis Kazakevičius  | TFAI | Stochastinių<br>procesų<br>klasifikavimas<br>neuroniniais<br>tinklais                                                             | Machine Learning<br>for the<br>Identification of<br>Stochastic<br>Processes                                          | Praktikos metu tiriamas neuroninių tinklų<br>taikymas laiko eilučių, generuotų<br>kanoniniais stochastiniais procesais,<br>klasifikavimui. Nagrinėjami Ornsteino–<br>Uhlenbecko (OU), Coxo–Ingersollo–Rosso<br>(CIR), geometrinio Brauno judėjimo (GBM)<br>ir ne Gauso modeliai. Naudojant sintetinius<br>duomenis apmokyti klasifikatoriai taikomi<br>įvairių tipų duomenų rinkiniams, siekiant<br>nustatyti juos generuojančius dinaminis<br>mechanizmus ir įvertinti stochastinių<br>procesų modelių tinkamumą realiems<br>duomenims aprašyti. | This practice investigates the use of neural<br>networks for the classification of time series<br>generated by canonical stochastic processes,<br>including the Ornstein–Uhlenbeck (OU), Cox–<br>Ingersoll–Ross (CIR), geometric Brownian<br>motion (GBM), and non-Gaussian models.<br>Synthetic datasets are used to train and<br>evaluate machine-learning classifiers, which<br>are subsequently applied to heterogeneous<br>datasets to identify underlying dynamical<br>mechanisms and assess the suitability of<br>stochastic-process models for real-world data. |
| 16. | Andrius Juodagalvis | TFAI | Drell-Yan proceso<br>triukšmo įvykių<br>tyrimas elektronų<br>kanale naudojant<br>CMS<br>eksperimento<br>antrojo etapo<br>duomenis | Analysis of the<br>Drell-Yan process<br>background in the<br>electron channel<br>with the CMS<br>Run-2 data          | CERN CMS eksperimento 2016 metų<br>duomenų statistinė analizė. Foninių procesų<br>indėlio įvertinimas Drell-Yan proceso<br>elektronų kanalo ( $q\bar{q} \rightarrow e^+e^-$ ) diferencialinio<br>reakcijos skerspjūvio matavime naudojant<br>„Shears“ programinės įrangos paketą.                                                                                                                                                                                                                                                                 | Statistical analysis of proton-proton collision<br>data recorded with CERN CMS detector in<br>2016. Estimation of background contributions<br>using "Shears" software framework in the<br>context of differential Drell-Yan electron<br>production ( $q\bar{q} \rightarrow e^+e^-$ ) cross-section.                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 17. | Andrius Juodagalvis | TFAI | Sunkiųjų neutralių                                                                                                                | Search for neutral                                                                                                   | Elementariųjų dalelių standartinis modelis                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | The standard model of elementary particles                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |

|     |                  |      |                                                                                              |                                                                                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|-----|------------------|------|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                  |      | leptonų aptikimas<br>būsimoose<br>eksperimentuose                                            | heavy leptons in<br>future<br>experiments                                                   | aprašo žinomas daleles ir tris<br>fundamentaliąsias sąveikas, tačiau yra<br>eksperimentinių įrodymų, kad turėtų<br>egzistuoti daugiau dalelių. Viena teorijos<br>numatytų dalelių klasė - sunkieji neutralūs<br>leptonai. Kompiuterinių modeliavimų<br>pagalba stengiamasi įvertinti tokių dalelių<br>eksperimentinio aptikimo tikimybes, pvz.,<br>CERN FCC-ee ar SHiP eksperimentuose.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | describes known particles and three<br>fundamental interactions. However,<br>observations indicate possible existence of<br>additional particles. One class of hypothetical<br>particles is heavy neutral leptons. Computer<br>modeling aids estimations of experimental<br>discovery of such particles, e.g. in CERN<br>FCC-ee or SHiP experiments.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 18. | Saswati Nandan   | TFAI | -                                                                                            | Two Higgs decay<br>studies in CERN<br>CMS experiment                                        | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | CERN CMS experiment probes fundamental<br>properties of particles by recording data of<br>high-energy proton-proton collisions. On rare<br>occasions two Higgs bosons are produced at<br>the same time. The practice work will<br>introduce to experimental data analysis using a<br>computer with an aim of estimating the<br>probability to observe a simultaneous decay of<br>two Higgs bosons.                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 19. | Donatas Narbutis | TFAI | Planetų sistemos<br>tankiose<br>žvaigždinėse<br>aplinkose – arba<br>iš kur atsirado<br>Žemė? | Planetary systems<br>in dense stellar<br>environments – or<br>where did Earth<br>come from? | Tankioje žvaigždžių aplinkoje planetos<br>formuojasi esant labai dinamiškoms ir<br>trikdančioms sąlygoms, kai artimi<br>žvaigždžių susidūrimai, stiprios gravitacinės<br>perturbacijos ir intensyvūs spinduliuotės<br>laukai nuolat keičia protoplanetinės<br>medžiagos savybes. Šioje temoje<br>nagrinėjama, kaip tokios ekstremalios<br>aplinkos veikia jaunų planetinių sistemų<br>stabilumą ir evoliuciją, ir ar ankstyvoji<br>Saulės sistema galėjo atsirasti panašiam<br>tankiam žvaigždžių regione. Svarbi darbo<br>dalis - modeliuoti gravitacines sąveikas tarp<br>artimų žvaigždžių ir besiformuojančių<br>planetų, siekiant suprasti, kaip šios jėgos<br>formuoja, destabilizuoja ar net išstumia<br>besikuriančius pasaulius. | In dense stellar environments, planets form<br>under highly dynamic and disruptive<br>conditions, where close stellar encounters,<br>strong gravitational perturbations, and intense<br>radiation fields constantly reshape<br>protoplanetary material. This topic examines<br>how such extreme environments influence the<br>stability and evolution of young planetary<br>systems, and whether the early Solar System<br>could have originated in a similarly crowded<br>stellar region. A key part of the work involves<br>modeling gravitational interactions between<br>nearby stars and forming planets to understand<br>how these forces sculpt, destabilize, or even<br>eject emerging worlds. |
| 20. | Donatas Narbutis | TFAI | Tamsiosios<br>medžiagos ir<br>juodųjų skylių<br>poveikis tankioms                            | The effects of<br>dark matter and<br>black holes on<br>dense stellar                        | Tamsioji medžiaga ir juodosios skylės<br>tankiose žvaigždžių sistemose kelia<br>klausimą, ar jos yra egzotiški teoriniai<br>papildymai, ar realūs, dinamiškai reikšmingi                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Dark matter and black holes in dense stellar<br>systems raise the question of whether they are<br>exotic theoretical additions or real,<br>dynamically significant components of these                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

|     |                  |      |                                                                                                                                 |                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-----|------------------|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                  |      | žvaigždžių sistemoms - ar jį galime matyti?                                                                                     | systems - can we observe it?                                                                                             | šių aplinkų komponentai. Regionuose, kuriuose yra daug žvaigždžių, tamsioji medžiaga gali palikti subtilius gravitacinius pėdsakus, o žvaigždės masės ir vidutinės masės juodosios skylės gali stipriai paveikti sistemos struktūrą ir ilgalaikę evoliuciją. Šioje temoje nagrinėjama, kaip tokie veiksniai formuoja žvaigždžių judėjimus ir sistemos stabilumą, modeliuojant gravitacines sąveikas tarp žvaigždžių, juodųjų skylių ir galimų tamsiosios medžiagos sancaupų, siekiant atskleisti jų tikrąjį poveikį.                                                                                   | environments. In regions where stars are packed tightly together, dark matter may leave subtle gravitational signatures, while stellar-mass and intermediate-mass black holes can strongly influence the system's structure and long-term evolution. This topic examines how these elements shape stellar motions and system stability, using modeled gravitational interactions between stars, black holes, and potential dark-matter concentrations to reveal their actual impact.                                                                                                                            |
| 21. | Donatas Narbutis | TFAI | Kaip sukurti „kišeninę“ galaktiką – mažiausios struktūros Visatoje ir jų modeliavimas                                           | How to create a “pocket galaxy” – modeling the smallest structures in the Universe                                       | Tai tyrimas apie mažiausias galaktines struktūras Visatoje: trapias, mažos masės sistemos, esančias ties riba tarp žvaigždžių spiečių ir tikrų galaktikų. Tokie objektai formuojasi ir vystosi ekstremaliomis sąlygomis, kur net menki masės, tankio ar tamsiosios medžiagos pokyčiai gali lemti, ar jie išliks, ar išsisklaidys aplinkoje. Tema nagrinėja, kaip šios miniatiūrinės galaktikos atsiranda, nyksta ir sąveikauja su aplinka, pasitelkiant modeliuotas gravitacines sąveikas tarp žvaigždžių, dujų ir tamsiosios medžiagos, siekiant suprasti, kas lemia jų struktūrą ir ilgalaikę raidą. | Topic examines the smallest galactic structures in the Universe - fragile, low-mass systems that lie on the boundary between star clusters and true galaxies. These objects form and evolve under extreme conditions, where even minor changes in mass, density, or dark-matter content can determine whether they persist or disperse into their surroundings. The topic explores how such miniature galaxies emerge, fade, and interact with their environment, using modeled gravitational interactions among stars, gas, and dark matter to understand what shapes their structure and long-term evolution. |
| 22. | Donatas Narbutis | TFAI | Dūmai ir veidrodžiai: žvaigždžių asociacijų atkūrimas gravitaciškai lęšiuotose galaktikose naudojant JWST ir mašininių mokymąsi | Smoke and Mirrors: Reconstructing Stellar Associations in Gravitationally Lensed Galaxies with JWST and Machine Learning | Žvaigždžių asociacijos gravitaciškai lęšiuotose galaktikose yra tikras dūmų ir veidrodžių galvosūkis: JWST pagaliau „sudegino“ dulkių ekstinkciją, kuri ilgai slėpė jaunas žvaigždes, tačiau priekyje esanti lęšiuojanti masė vis dar veikia kaip veidrodžių salė, tempianti ir laužanti foninę galaktiką. Norint tirti žvaigždžių asociacijas tokiose iškraipytose galaktikose, pirmiausia reikia atkurti nelęšiuotą, tikrąją galaktikos struktūrą. Tai reiškia, kad lęšio masės pasiskirstymą būtina sumodeliuoti taip                                                                               | Stellar associations in gravitationally lensed galaxies are the ultimate smoke-and-mirrors problem: JWST finally burns away the dust extinction that used to hide young stars, but the foreground lensing mass still acts like a hall of mirrors, stretching and twisting the background galaxies. To study newly formed stellar groups within such lensed galaxies, the first task is to reconstruct the unlensed, intrinsic galaxy. This means modeling the lens mass distribution with enough precision to flatten magnification gradients and shear                                                         |

|     |                    |      |                                                                                                       |                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-----|--------------------|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     |                    |      |                                                                                                       |                                                                                                | <p>tiksliai, kad būtų galima ištiesinti didinimo gradientus ir šlyties raštus. Mašininio mokymosi metodai šį procesą dar labiau palengvina: jie „išmoksta“ lęšį, invertuoja iškraipymą ir atkuria smulkias struktūras. Tik tada galime atsekti, kaip žvaigždžių asociacijų savybės kinta priklausomai nuo raudonojo poslinkio - kaip evoliucionuoja jų dydžiai, tankiai ir išsisklaidymo tempai per kosminį laiką.</p> | <p>patterns. Machine-learning methods push this further: they learn the lens, invert the distortion, and recover the fine-grained structure. Only then can we trace how the properties of stellar associations change with redshifted galaxies - how their sizes, densities, and dispersal rates evolve as star-forming environments shift across cosmic time.</p>          |
| 23. | Gediminas Gaigalas | TFAI | Antrosios eilės Relėjaus ir Šrėdingerio trikdžių teorija, skirta konfigūracijų superpozicijos metodui | Second-Order Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory for the Configuration Interaction Method | <p>Šiame darbe, naudojant Raylėjaus ir Šrėdingerio trikdžių teoriją, bus sukurtos naujos konfigūracijos superpozicijos metodo skaičiavimo schemos. Tai leistų ateityje pagerinti įvairių atominių charakteristikų tikslumą, kuris yra labai svarbus atominėje spektroskopijoje, plazmos fizikoje, astrofizikoje, įskaitant žvaigždžių ir jų evoliucijos tyrimus.</p>                                                   | <p>In this research, new computational schemes for the configuration superposition method will be developed using Rayleigh-Schrödinger perturbation theory. This would enable future improvements in the accuracy of various atomic characteristics, which are crucial in atomic spectroscopy, plasma physics, astrophysics, and research on stars and their evolution.</p> |
| 24. | Darius Jurčiukonis | TFAI | Multi Higgs dubletų modelių tyrimas                                                                   | Study of the multi-Higgs-doublet models                                                        | <p>Studentai susipažins su atitinkamais multi-Higgs dubletų modeliais ir pritaikys teorinius apribojimus, tokius kaip unitarumo ir vakuumo stabilumo sąlygos, kurios užtikrina modelių fizikinį nuoseklumą ir stabilumą.</p>                                                                                                                                                                                           | <p>The students will become familiar with relevant multi-Higgs-doublet models and will apply theoretical constraints such as unitarity and vacuum stability conditions, which ensure the physical consistency and stability of the models.</p>                                                                                                                              |
| 25. | Darius Jurčiukonis | TFAI | Mašininio mokymosi taikymas standartinio modelio plėtinių tyrimams                                    | Machine learning application for studying extensions of the Standard Model                     | <p>Nagrinėjamų modelių skaitmeninių skaičiavimų optimizavimui, studentai pritaikys ir tobulins mašininio mokymosi metodus.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                         | <p>The students will apply and further develop machine learning techniques to optimize the numerical calculations of the models under study.</p>                                                                                                                                                                                                                            |