

Bakalauro Baigiamieji darbai:

Eil. Nr.	Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.)	Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis)	Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba)	Tema laisva/užimta
1.	Darius Abramavičius	Krūvininkų savybių modeliavimas puslaidininkiniuose jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriuose <i>Modeling of charged quasiparticle properties in semiconducting detectors of ionizing irradiation</i>	Si- kristaliniai jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai yra plačiai naudojami CERN eksperimente kaip dalelių detektoriai. Jonizuojančioji spinduliuotė dažnai sukelia negrįžtamus medžiagos pokyčius – įvairius defektus. Šiame projekte studentai modeliuoja defektus ir jų elektronines savybes kvantinės mechanikos metodais ir įvertina, kaip įvairūs defektai lemia laisvų krūvininkų judėjimą ir gyvavimo trukmę.	laisva
2.	Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt, Saulėtekio al. 3, A307, +370(5)223 4556	Spektrinio fotojautrio ir fotogeneracijos kvantinio našumo nustatymas fotovoltiniuose organiniuose sluoksniuose <i>Measurements of the quantum efficiency and spectral photosensitivity in organic layers for photovoltaic</i>	Saulės elementams ir, bendrai – fotovoltiniams prietaisams, sintetamos cheminės medžiagos tinkamumą įvertiname tada, kai nustatoma visa eilė fizikinių parametrų. Vieni iš tokių yra spektrinis fotojautris ir kvantinio našumo spektrinis pasiskirstymas. Šiame darbe atliekame matavimo metodikoje naudojamų prietaisų suderinimą bei išmatuojame naujai sintetintų cheminių medžiagų nurodytas charakteristikas.	laisva
3.	Prof. Gediminas Niaura gediminas.niaura@ftmc.lt ; mob.: 868645026 (VU Cheminės fizikos institutas)	Monosluoksnių suformuotų ant ITO paviršiaus tyrimas paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos metodu; <i>Surface-enhanced Raman spectroscopy probing the structure of monolayers on ITO substrate</i>	Modifikavimas organiniais monosluoksniais suteikia galimybę kryptingai keisti indžio-alavo oksido (ITO) paviršiaus fiziko-chemines savybes. Tai atveria naujas optoelektroninių prietaisų ir saulės elementų konstravimo galimybes. Formuosime monosluoksnius ir jų struktūrą tirsime virpesinės spektroskopijos metodais. Planuojame naudoti paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos metodą (ang. SERS). Tyrimus atliksime su moderniu inVia	laisva

			(Renishaw) Ramano spektrometru, spektrus žadinsime su 532, 633, 785 ir 830 nm lazerinėmis spinduliuotėmis.	
4.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>Įvairių baltymų modeliavimas su karotinoidais naudojant GROMACS paketą</p> <p><i>Modeling of Various Carotenoids with Protein using GROMACS package</i></p>	<p>Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose[1-3]. Karotinoidų savybės priklauso nuo baltyminės aplinkos, kuri yra kintanti laike, todėl reikalingas detalus sistemos aprašymas norint suprasti spektrines savybes, o tam reikalingi paketų našumo analizės tyrimai, tokių kaip GROMACS. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant GROMACS ir Gaussian 16 paketus. Reikės įdiegti GROMACS paketą, atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje su Gaussian 16 ir GROMACS paketais. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p> <p>Literatūra</p> <p>[1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014).</p> <p>[2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018)</p> <p>[3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022 (priimtas spausdinimui)</p>	laisva
5.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt</p>	<p>Kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų duomenų bazė ir informacinė sistema</p> <p><i>The Database and Information System for the results of the Quantum Chemical calculations</i></p>	<p>Superkompiuterių kvantinės chemijos panaudojimo efektyvumui naudojamos sistemos kaip WebMO, kurios skirtos uždavinių paruošimui ir vykdymui. Tuo tarpu labai svarbu tinkamai saugoti jau atliktus skaičiavimus. Tam, kad vartotojas galėtų lengviau pasiekti ir redaguoti tuos duomenis, yra naudojamos informacinės sistemos, kurios palengvina darbą su duomenų bazėmis –pateikiama</p>	laisva

	<p>http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>		<p>paprasta aplinka duomenims įkelti, tvarkyti, trinti ir atvaizduoti. Skirtingi kvantinės chemijos programų paketai turi didelį kiekį skirtingų skaičiavimo algoritmų, iš kurių vieni sutampa, o kiti skiriasi. Darbo tikslas automatizuoti ir pritaikyta kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų leidimui, saugojimui, jų automatizuotai analizei ir turėtų informacinę sistemą, kurioje daugelis vartotojų (šiuo metu pritaikyta vienam vartotojui) gali lengvai pasiekti bei tvarkyti kvantinių skaičiavimų duomenis. Įdiegti vieną pasirinktą kvantinės chemijos paketą ir atlikti našumo testus. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p>	
6.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>Aleno karotinoidų krūvio pernašos būsenų modeliavimas <i>Charge transfer state modeling for allene carotenoids</i></p>	<p>Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose[1,2]. Aleno karotinoidai pasižymi papildoma krūvio pernašos būseną, kuri vizualiai priklauso nuo molekulės cheminė struktūros. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrinės ir spektrinės savybes. Reikės modeliuoti struktūras, atlikti kvantinę molekulių dinamiką. Atlikti ab initio skaičiavimus su Gaussian 16 ir NwChem arba įsisavintais kitais paketais. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis. Literatūra [1] Macernis M; Sulskus J; Malickaja S Ruban A; Valkunas L, Resonance Raman Spectra and Electronic Transitions in Carotenoids: A Density Functional Theory Study, J. Phys. Chem. A, 118 (10), 1817–1825 (2014). [2] Macernis M, DFT functional analysis for the modeling Raman bands and absorption spectra of the lycopene structure, Open Acc. J. Chem., 1-10 (2018) [3] Macernis M. et al. Electronic and Vibrational properties of allene carotenoids, J. Phys. Chem. A, 2022 (priimtas spausdinimui)</p>	užimta

	Vygintas Jankauskas (vygintas.jankauskas@ff.vu.lt , 85 223 4557)	Paviršinio potencialo tyrimai virpančio zondo sistema <i>Investigation of a surface potential with a vibrating probe system</i>	Naudojant virpančio zondo sistemą, jautriai matuojančią paviršinių potencialą, bus tiriamas įvairių medžiagų paviršiaus kontaktinis potencialas bei tiriama jo koreliacija su tų medžiagų jonizacijos potencialu.	užimta
	Rasa Platakytė (rasa.platakyte@ff.vu.lt , 223 4594)	Priešuždegiminių vaistų molekulių struktūros ir kompleksų su vandeniu tyrimas žemos temperatūros virpesinės spektroskopijos metodais <i>Structural analysis of non-steroidal anti-inflammatory drug molecules and their complexes with water by the means of low temperature vibrational spectroscopy</i>	Darbo metu bus tiriamos priešuždegiminių vaistų aktyviųjų medžiagų molekulių ir jų kompleksų su vandeniu struktūra, molekulių konformacinė įvairovė pasinaudojant žemos temperatūros matricinės izoliacijos virpesinės spektroskopijos bei kvantinės cheminės metodus.	užimta
7.	Rasa Platakytė (rasa.platakyte@ff.vu.lt , 223 4594)	Žemos koncentracijos metanolio aptikimas mišiniuose su metanolio pasinaudojant virpesinės spektrometrijos ir kvantinės chemijos metodus <i>Detection of low concentration of methanol in mixtures with ethanol by the use of vibrational spectroscopy and quantum chemistry</i>	Darbo metu bus nustatoma, kokie virpesinės spektroskopijos metodai yra tinkami aptikti žemą metanolio koncentraciją mišiniuose su metanolio, koks mažiausias kiekis gali būti detektuotas. Taip pat analizei bus naudojami kvantinės chemijos bei statistiniai metodai.	užimta
8.	Justinas Čėponkus justinas.ceponkus@ff.vu.lt 852234595	Sviesto rūgšties monomerų, dimerų bei kompleksų su vandeniu struktūros tyrimas	Darbo idėja panaudojant Matricinės izoliacijos žemoje temperatūroje metodiką ir Infraraudonosios sugerties spektrometrija nustatyti Sviesto rūgšties galimas monomerų konformacijas, dimerų struktūra bei kompleksų	užimta

		Infraraudonosios sugerties matricinės izoliacijos metodu <i>Study of Butyric acid monomer, dimer and water complex structure using Matrix isolation infrared spectroscopy</i>	su vandeniu struktūrą. Tyrimo metu tiriamoji molekulė atskiedžiama dideliu kiekiu inertiniu dujų ir užšaldoma. Paruoštas bandinys tiriamas infraraudonosios sugerties spektrometru. Spektrai analizuojami pasitelkiant kvantinės chemijos skaičiavimus.	
9.	Čeponkus Justinas, justinas.ceponkus@ff.vu.lt	Mikroplastiko aptikimas ir identifikavimas gamtiniuose bandiniuose Infraraudonosios ATR spektroskopijos metodu <i>Detection and identification of microplastic substances in nature samples using ATR infrared spectroscopy</i>	Darbo idėja atlikti, gryną plastikų, bei gamtinių bandinių galimai užterštų plastiko atliekomis tyrimus. Remiantis statistinės analizės metodais sukurti metodiką, mikro plastiko aptikimui gamtiniuose bandiniuose (pvz. dirvožemyje, gruntiniuose vandenyse ir pan.)	užimta
10.	Valdemaras Aleksa, valdemaras.aleksa@ff.vu.lt	XIX a. ikonų gruntinio sluoksnio spektrinė analizė <i>Spectral analysis of the 19th century icons ground layer</i>	Ikonų restauratoriams svarbu žinoti ikonų gruntinio sluoksnio, ant kurio vėliau buvo tapoma, cheminę sudėtį, o taip pat ir kokia buvo IX a. naudoto anhidrito iškaitinimo temperatūra. Šios problemos sprendžiamos taikant virpesinės spektroskopijos metodus.	užimta
11.	Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948	Transporto taršos tyrimas Vilniaus mieste <i>Transport pollution research in Vilnius</i>	Apdoroti automobilių išmetamųjų dujų matavimo duomenis.	užimta
12.	dr. Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt 852234661	Tirpiklio sąveikos su fotoaktyvia molekule įskaitymas naudojant mišrų supermolekulinį – kontinuumo modelį	Poliarizuojamo kontinuumo modelis dažnai naudojamas įskaityti vidutinę („lauko“) tirpinio ir tirpiklio sąveiką, bet jis iš esmės nepritaikytas atsižvelgti į orientuotų polinio tirpiklio molekulių įtaką tirpiniui. Darbe nagrinėjama, kaip orientuotų molekulių apvalkalas kontinuumo fone keičia fotoaktyvios molekulės savybių skaičiavimų rezultatus.	užimta

13. Rimantė Bandzevičiūtė
rimante.bandzeviciut@ff.vu.lt
85 223 4595

Analysis of solvent effects on the photoactive molecule using hybrid solvent shell – continuum model

Šlapimo nuosėdų tyrimas infraraudonosios sugerties spektroskopiniu metodu

Study of urinary deposits by means of infrared spectroscopy

Šlapimo takų akmenligė (urolitiazė) yra plačiai paplitusi liga. Šlapimo takų akmenys gali formuotis iš skirtingų medžiagų. Siekiant efektyvaus gydymo, yra svarbu nustatyti susiformavusio akmens sudėtį. Šiuo metu pasaulyje yra įprasta, jog siekiant nustatyti akmens sudėtį, yra tiriamas akmens gabalėlis, tačiau vis plačiau yra taikomos endoskopinės operacijos, kurių metu akmuo organizmo viduje yra susmulkinamas iki smulkių fragmentų. Tokiu būdu operacijos metu akmuo nėra ištraukiamas ir nėra panaudojamas analizei. Dėl šios priežasties nukenčia tolimesnė paciento priežiūra bei yra sunku parinkti profilaktikos priemones. Šio tyrimo metu siekiama nustatyti infraraudonosios sugerties spektroskopinio metodo galimybes tikslios akmens sudėties nustatymui iš šlapimo nuosėdų.

Urinary stone disease (urolithiasis) is a widespread disease. Urinary stones form out of different minerals. In order to choose an effective treatment, it is important to identify the composition of the stone. Usually, a piece of the stone is required for the examination of the composition of the stone. However, endoscopic surgeries are more and more widely applied for the treatment. During this procedure, the stone is shredded into small fragments thus the stone is not removed from the body and is not used for the examination. Consequently, the further care of the patient and prevention of the disease becomes less effective.

užimta

14.	Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė sonata.adomaviciute@ff.vu.lt	Sidabro nanodalelių sintezės optimizavimas ir taikymas paviršiaus sustiprintoje virpesinėje spektroskopijoje	The goal of this study is to determine the suitability of the infrared spectroscopy for the accurate identification of the composition of urinary stones from the urinary deposits. Sidabro nanodalelių sintezė ir substratų paruošimas. Substratų taikymas paviršiaus sustiprintoje virpesinėje spektroskopijoje – SERS ir SEIRA. Gautų SERS ir SEIRA signalų įvertinimas.	užimta
15.	Nerijus Nekrašas	Injektuotų krūvininkų pernašos tyrimai OFET dariniuose	Tęsimas darbas	užimta
16.	Dr. Kristijonas Genevicius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt	<i>Investigation of transport of injected charge carriers in OFET structures</i> Skystakristalių trifenileno darinių struktūros įtaka krūvininkų judriui	Krūvininkų judrio nustatymas lėkio trukmės metodu skystakristaliuose trifenileno dariniuose. Struktūros bei skystakristalės fazės įtaka krūvininkų judriui.	užimta
17.	Dr. Kristijonas Genevicius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt	<i>Influence of the structure of liquid-crystalline triphenylene derivatives on the charge carrier mobility</i> Organinių puslaidininkinių medžiagų skersaryšinimo įtaka krūvininkų pernašai	Krūvininkų judrio skyles pernešančiose medžiagose įvertinimas prieš ir po skersaryšinimo, skersaryšinimo priedų įtaka judriui.	užimta
18.	Andrius Gelžinis, andrius.gelzinis@ff.vu.lt	<i>Impact of crosslinking of organic semiconductor materials on charge carrier transport</i> Molekulinių sistemų fluorescencijos kinetikų koncentracinio gesimo modeliavimas	Bus modeliuojamos molekulinių sistemų fluorescencijos kinetikų koncentracinis gesimas.	užimta
		<i>Modeling of concentration quenching of fluorescence</i>		

19.	Andrius Gelžinis, andrius.gelzinis@ff.vu.lt	<p><i>decay kinetics of molecular systems</i> Elektroninio sužadavimo dinamikos modeliavimas molekulinėse sistemose: neuroninių tinklų taikymas sprendžiant atvirkštinių uždavinių</p>	<p>Bus taikomi neuroniniai tinklai sprendžiant atvirkštinių uždavinių modeliuojant elektroninio sužadavimo dinamiką molekulinėse sistemose.</p>	užimta
20.	Tomas Grigaitis, tomas.grigaitis@ff.vu.lt	<p><i>Modeling of electronic excitation dynamics in molecular systems: application of neural networks for inverse problem</i> Organinių medžiagų įtaka deimantų paviršiniam laidumui</p>	<p>Tęsiama tema.</p>	užimta
21.	Jevgenij Chmeliov jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt	<p><i>Influence of organic materials on diamond surface conductivity</i> Elektroninių sužadavimų anihiliacijos molekulinuose agregatuose modeliavimas</p> <p><i>Modeling of exciton annihilation in molecular aggregates</i></p>	<p>Sužadavimų anihiliacijos vienmatėse, dvimatėse ir trimatėse molekulių gardelėse modeliavimas Monte Carlo metodu</p>	užimta