

**Magistrantūros 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.	Prof. Gediminas Niaura <a href="mailto:gediminas.niaura@ftmc.lt">gediminas.niaura@ftmc.lt</a> ; mob.: 868645026	Magneto-plazmoninių nanodalelių taikymas biomolekulių tyrimuose paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos metodu  <i>Application of magneto-plasmonic nanoparticles for analysis of biomolecules by surface-enhanced Raman spectroscopy</i>	Hibridinės nanodalelės pasižyminčios magnetinėmis ir plazmoninėmis savybėmis atveria naujas biomolekulių tyrimo galimybes naudojant paviršiaus sutiprintą Ramano spektroskopiją (angl. SERS). Planuojame atlikti nanodalelių sintezę ir biomolekulių SERS tyrimus. Tyrimus atliksime su moderniu inVia (Renishaw) Ramano spektrometru, spektrus žadinsime su 532, 633, 785 ir 830 nm lazerinėmis spinduliuotėmis. Taip, pat naudosime labai šviesų Ramano spektrometrą su šviesolaidiniu zondų ir 785 nm lazerine spinduliuote.	laisva
2.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing. ff.vu.lt	Bis(diphenylphosphino)methane molekulės analizė panaudoti kvantiniame kompiuteryje ir molekulės modeliavimas tankio funkcionalo metodais  <i>Bis(diphenylphosphino)methane molecule analysis for quantum computing and modeling using Density functional theory</i>	Bis(diphenylphosphino)methane molekulės tyrimas, BMR parametrų analizė ir kubito paramtrų analizė panaudojant kvantinę chemijos metodikas.	užimta
3.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Karotenporfirino dyadų būsenų modeliavimas naudojant tankio funkcionalus ir molekulių dinamiką	Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose, kurie sudaro kompleksus su chlorofilais [1-3]. Viena tokių dirbtinių sistemų yra karotenporfirino dyados, kuriose vyksta analogiški fotofizikiniai procesai. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotenporfirino dyadų struktūrinę ir	užimta

	<p><a href="http://www.supercomputing.ff.vu.lt">http://www.supercomputing.ff.vu.lt</a></p>	<p><i>Carotenoporphyrin Dyad Modeling with DFT and Molecular Dynamics</i></p>	<p>spektrines savybes, naudojant tankio funkcionalo metodikas. Reikės atlikti ab initio skaičiavimus, kad įvertinti galimai susidarančias krūvio pernašos būsenas. 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>	
4.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt <a href="http://www.supercomputing.ff.vu.lt">http://www.supercomputing.ff.vu.lt</a></p>	<p>Bakteriorodopsino aktyvaus centro retinalio molekulės molekulių dinamikos skaičiavimai</p> <p><i>Bacteriorhodopsin active center Retinal molecule study with molecular dynamics</i></p>	<p>Kvantinės chemijos metodai, tokie kaip DFT, kartu su molekulių mechanika, panaudojant superkompiuterių resursus, leidžia modeliuoti dideles molekulinės struktūras, baltymus. Naudojant DFT metodiką galima modeliuoti retinalio molekulę ir Bakteriorodopsino baltymą. Bakteriorodopsino baltymas yra eksperimentiškai tiriamas vienas iš modelinių sistemų, kurią sudaro opsino baltymas ir retinalio molekulė. Baltymas pumpuoja protonus, po to kai retinalis sugeria matomą šviesą. Retinalio molekulė struktūriškai yra puse tipinės karotino (betakaroteno) molekulės, kurių spektrinės savybės daugiausia nulemtos polieninės grandinės. Visgi Retinalio sužadintos energijos visiškai skiriasi tiek nuo tipinių karotinoidų, tiek nuo polieno molekulių [1-2]. Darbo tikslas ištirti kaip ir kurios retinalio struktūrinės dalys nulemia kitokias spektrines savybes, bei kaip molekulei daro įtaką aplinkui esanti baltymo struktūra. Darbe reikės paruošti 2 tūkst.</p>	užimta

			<p>atomų baltymų struktūras molekulių dinamikai, išskirti aktyvų centrą. Atlikti DFT skaičiavimus su Gaussian 16 arba kitu įsisavintu paketu. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p> <p>Literatūra  [1] Kietis BP, Macernis M, Sulskus J, Valkunas L, Estimation of the permanent dipole moment of Bacteriorhodopsin, Lith. J. Phys. 50, 451–462 (2010).  [2] Macernis et al. Mechanism of Proton Transfer in Bacteriorhodopsin, Frontiers in Physics (2022), recenzuojamas</p>	
	<p>Čeponkus Justinas,  <a href="mailto:justinas.ceponkus@ff.vu.lt">justinas.ceponkus@ff.vu.lt</a></p>	<p>Navikinių darinių diagnostika šlapimo pūslės nuoplavose SERS metodu</p> <p><i>Diagnostics of tumors in bladder washouts using SERS method</i></p>	<p>Darbo idėja, pritaikyti SERS spektroskopija, navikinių spektrinių žymenų aptikimui šlapimo pūslės nuoplavose. Darbo metu bus ieškoma tinkamiausio metodo SERS signalo stiprinimui. Užregistravus SERS spektrus bus identifikuojami navikams būdingi spektriniai žymenys</p>	užimta
5.	<p>Kęstutis Aidas.  <a href="mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt">kestutis.aidas@ff.vu.lt</a>,  tel. 8 5 223 4593</p>	<p>Molekulinių sužadinių relaksacijos modeliavimas kvantiniais variaciniais metodais</p> <p><i>Modeling and simulations of molecular excitation relaxation using quantum variational approaches</i></p> <p>Vaistinio junginio glibenklamido BMR parametrų modeliavimas vandeniniuose</p>	<p>Molekuliniai sužadiniai yra trumpai gyvojančios kvantinės kvazidalelės. Dėl sąveikos su virpesiais jos energiją perduoda molekuliniam virpesiams. Kai keletas molekulių yra arti viena kitos, gaunama sudėtingas koherentinis relaksacijos procesas, kuris tiesiogiai stebimas netiesinėje spektroskopijoje. Studentas šiame projekte atliks sužadinių dinamikos modeliavimą ir skaičius spektrus.</p>	užimta

6.	Kęstutis Aidas. <a href="mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt">kestutis.aidas@ff.vu.lt</a> , tel. 8 5 223 4593	<p>bioaktyvių joninių skysčių tirpaluose</p> <p><i>Modelling NMR parameters of glibenclamide drug in aqueous solution of bioactive ionic liquid</i></p> <p>Joninio skysčio [C4mim][NO<sub>3</sub>] ir jo mišinių su vandeniu tarpmolekulinės struktūros ir BMR parametrų modeliavimas</p>	užimta	
7.	Nerijus Nekrašas	<p><i>Modelling intermolecular structure and NMR parameters of the [C4mim][NO<sub>3</sub>] ionic liquid and of its mixtures with water</i></p> <p>Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos tyrimai skersaryšintose organiniuose sluoksniuose</p>	užimta	
8.	dr. Rokas Dobužinskas ( <a href="mailto:rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt">rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt</a> , 8 662 38767)	<p><i>Investigation of charge carriers transport and recombination in crosslinked organic layers</i></p> <p>Riebalų rūgščių kristalinių tyrimas rentgenostruktūrine difraktometriniu analize</p>	<p>Gyvoje gamtoje išgaunamos riebalų rūgštys, kurios geba sudaryti kietas kristalines formas, šiuo metu plačiausiai pritaikomos maisto pramonėje – šokolado gamyboje. Šokolado gaminiai yra išgaunami specialiomis temperavimo technologijomis išgaunant stabiliausią, kuo aukštesnėje temperatūroje besilydančią ir mechaniškai</p>	užimta

9.	Jevgenij Chmeliov jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt	<p><i>Investigation of fatty acid crystallites by X-ray diffraction analysis</i></p> <p>Fotosintetinių fukoksantinų ir chlorofilų baltyminių kompleksų pigmentų rezonansinės sąveikos modeliavimas</p>	<p>kiečiausią kristalinę formą. Rentgeno spindulių difrakcijos tyrimai naudojami nustatyti riebalų rūgščių polimorfizmui – kristalitų įvairovei ir formų apibrėžimui.</p> <p>Remiantis FCP kompleksų struktūriniais duomenimis įvairiais artiniais suskaičiuoti šių kompleksų chlorofilo molekulių rezonansines sąveikas</p>	užimta
10.	Jevgenij Chmeliov jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt	<p><i>Modeling of inter-pigment resonance interactions in the photosynthetic fucoxanthin–chlorophyll protein complexes</i></p> <p>Krūvio pernašos būsenų fotosintetiniuose šviesorankos kompleksuose modeliavimas</p> <p><i>Modeling of molecular charge transfer states in the photosynthetic light-harvesting complexes</i></p>	<p>Remiantis kvantinės chemijos metodais sumodeliuoti tarp molekulinės krūvio pernašos būsenas fotosintetiniuose kompleksuose ir įvertinti baltyminės aplinkos poveikį jų savybėms</p>	užimta