

Cheminės fizikos instituto siūlomos bakalauro baigiamųjų darbų temos 2021-2022 m. m. rudens semestru

Proposals for undergraduate student professional practice of Institute of Chemical Physics in Autumn semester of academic year 2021/2022

Eil. Nr.	Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) Supervisor (e-mail, work tel. no.)	Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) Name of topic (in Lithuanian and in English)
1.	Aidas Kęstutis, kestutis.aidas@ff.vu.lt , 8 5 223 4593, http://web.vu.lt/ff/k.aidas/lt/	Jonų asociacijos imidazolo joninių skysčių tirpaluose modeliavimas MD simuliacijomis <i>MD simulations of ion pairing in solutions of imidazolium ionic liquids</i>
2.	Čeponkus Justinas, justinas.ceponkus@ff.vu.lt	Neorganinių darinių susiformuojančių žmogaus organizme aptikimas virpesinės spektrometrijos metodais <i>Identification of inorganic substances in human body using vibrational spectroscopy</i>
3.	Čeponkus Justinas, justinas.ceponkus@ff.vu.lt	Mikroplastiko aptikimas ir identifikavimas gamtiniuose bandiniuose virpesinės spektrometrijos metodais <i>Detection and identification of microplastic substances in nature samples using vibrational spectroscopy</i>
4.	Čeponkus Justinas, justinas.ceponkus@ff.vu.lt	Vandens sąveikos su organinėmis molekulėmis tyrimas kriogeninės infraraudonosios sugerties spektrometrijos metodu <i>Study of water interaction with organic molecules by the means of cryogenic infrared absorption spectroscopy</i>
5.	Čeponkus Justinas, justinas.ceponkus@ff.vu.lt	Maistų produktų kokybės tyrimas infraraudonosios sugerties spektrometrijos metodu <i>Study of food product quality by the means of infrared absorption spectroscopy</i>
6.	Platakytė, Rasa (rasa.platakyte@ff.vu.lt , +37052234594)	Žemos koncentracijos alkoholio junginių aptikimas mišiniuose pasinaudojant virpesinės spektrometrijos metodais <i>Detection of low concentration of alcohol compounds in mixtures by the use of vibrational spectroscopy</i>
7.	Platakytė, Rasa (rasa.platakyte@ff.vu.lt , +37052234594)	Priešuždegiminių vaistų molekulių struktūros tyrimas žemų temperatūrų virpesinės spektroskopijos metodu <i>Structural analysis of non-steroidal anti-inflammatory drug molecules by the means of low temperature vibrational spectroscopy</i>
8.	Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948	Bipolinės išėjimo įtampos 4 kvadrantų keitiklio tyrimas <i>Investigation of bipolar output four-quadrant converter</i>
9.	Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948	Aktyvinio elektromagnetinės spinduliuotės filtro taikymo tyrimas <i>Investigation of active EMI filter application</i>
10.	Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt tel. 868728948	Ličio jonų kondensatorių tyrimas <i>Investigation of Li-ion capacitors</i>
11.	dr. Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt (85) 223 4661	Hidrodinamikos uždavinių sprendinių vizualizavimas realiu laiku <i>Real-time visualization of hydrodynamic process simulations</i>

12.	dr. Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt (85) 223 4661	Fotoaktyvios molekulės tirpiklio apvalkalo modeliavimas <i>Solvent shell modeling of the photoactive molecule</i>
13.	dr. Stepas Toliautas stepas.toliautas@ff.vu.lt (85) 223 4661	Molekulių struktūros palyginimas naudojant savąsias koordinates <i>True molecular structure comparison using internal coordinate system</i>
14.	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>
15.	Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt , Saulėtekio al. 9, 622, +37052366052	Drėgmės difuzija popieriaus struktūrose, matuojant paviršiaus elektrinį laidumą <i>Moisture diffusion in paper structures by measuring the electrical conductivity of a surface</i>
16.	Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt , Saulėtekio al. 9, 622, +37052366052	Krūvio pernaša daugiasluoksniuose popieriaus dariniuose ir jų dielektrinė spektroskopija <i>Charge transfer in multilayer paper derivatives and their dielectric spectroscopy</i>
17.	Gytis Sliaužys, Saulėtekio al. 3 A 304, A 331, A 332 kab., Tel. 223 4553 , gytis.sliauzys@ff.vu.lt	Organinių sluoksnių savybių tyrimas Rentgeno spindulių analizės metodais <i>Investigation of properties of organic films by means of X-ray aspectroscopy</i>
18.	Andrius Gelžinis, andrius.gelzinis@ff.vu.lt	Fluorescencijos koncentracinis gesimas dvimatėse ir trimatėse chlorofilų sistemose <i>Concentration quenching of fluorescence in 2D and 3D chlorophyll systems</i> Užimta: Sandra Barysaitė
19.	Andrius Gelžinis, andrius.gelzinis@ff.vu.lt	Elektroninio sužadinimo dinamikos dvimatėse sistemose aprašymas pasitelkiant dirbtinius neuroninius tinklus <i>Modeling of electronic excitation dynamics in 2D systems using artificial neural networks</i> Užimta: Pranas Juknevičius
20.	Grigaitis Tomas, tomas.grigaitis@ff.vu.lt +37068313830	Deimantinių sluoksnių auginimas karštos vielos cheminio garų nusodinimo technologija (CVD) <i>Deposition of diamond layers using hot wire chemical vapor deposition (CVD)</i>
21.	Dr. Feliksas Kuliešius FF404, 85 23 6604, feliksas.kuliesius@ff.vu.lt	Daiktų interneto sistemų saugos tyrimas <i>Investigation of Security in IoT systems</i>
22.	Nerijus Nekrašas, nerijus.nekrasas@ff.vu.lt	Krūvininkų pernašos organiniuose lauko tranzistoriuose tyrimai <i>Investigation of charge carriers transport in organic field effect transistors</i>
23.	Dr. Vygintas Jankauskas, A308, A328, 85 223 4557, vygintas.jankauskas@ff.vu.lt	Krūvio pernašos tyrimas XTOF metodu skersaryšiniuose organiniuose sluoksniuose <i>Investigation of charge transport by XTOF method in crosslinkabes organic layers</i>
24.	Darius Abramavičius Saulėtekio al. 9, III rūmai	Molekulinių agregatų antrosios eilės optinių ir spektroskopinių signalų modeliavimo metodų vystymas

	314 kab., 236 6281, darius.abramavicius@ff.vu.lt	<i>Development of computational approaches of second order optical signals for molecular aggregates</i>
25.	Kamarauskas, Egidijus, A310, egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt	Aplinkos sąlygų įtaka jonizacijos potencialo nustatymui organinėse krūvio pernašos medžiagose <i>Influence of surrounding conditions on ionization potential in organic charge transport materials</i>
26.	Kamarauskas, Egidijus, A310, egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt	Aplinkos sąlygų įtaka jonizacijos potencialo nustatymui organinėse krūvio pernašos medžiagose <i>Influence of surrounding conditions on ionization potential in organic charge transport materials</i>
27.	Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt	Krūvininkų pernaša skystakristaliniuose trifenileno dariniuose <i>Transport of charge carriers in liquid crystalline compounds of triphenylene</i>
28.	Dr. Kristijonas Genevičius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt	Skersaryšiamų organinių medžiagų, skirtų Saulės elementų gamybai, fotoelektrinis charakterizavimas <i>Photoelectric characterization of crosslinkable organic molecules for solar cells applications</i>
29.	Arūnas Mršalka, FTMC, Saulėtekio al. 3 B 320 kab. Tel. 85 223 4593, arunas.marsalka@ff.vu.lt	Naujos kartos medžiagų, naudojamų šviesos technologijose, tyrimas branduolių magnetinio rezonanso spektroskopijos metodu <i>Investigation of a new generation of materials used in light technologies by nuclear magnetic resonance spectroscopy</i>
30.	Jevgenij Chmeliov, jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt , NFTMC B423 kab.	Sužadinių anihiliacija molekulinuose agregatuose <i>Excitation annihilation in molecular aggregates</i> Užimta: Gabrielė Rankelytė
31.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Karotinoidų molekulinų struktūrų ir jų spektrų modeliavimas tankio funkcionalų ir molekulių dinamikos metodais su superkompiuteriu <i>Carotenoid structure and spectral properties study using DFT and MD methods with supercomputers</i>
32.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	DNR kirpimo mechanizmo tyrimas tankio funkcionalų metodais ir molekulių dinamikos metodais su superkompiuteriu <i>DNA Restriction endonuclease cleavage mechanisms DFT and MD study using supercomputers</i>
33.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Retinalio molekulės energetinių paviršių modeliavimas ir molekulių dinamikos skaičiavimai baltyminėje bakteriorodopsino aplinkoje su superkompiuteriu <i>Retinal molecule potential energy surface DFT and MD study in protein environment using supercomputers</i>
34.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Kvantinės chemijos paketų testavimas ir našumų įvertinimas „HPC Saulėtekis“ superkompiuteryje <i>Quantum chemistry package testing and performance study of supercomputer in HPC Sauletekis</i>

Šviesos technologijų programos studentams

For Light Engineering students

Nr.	Profesinės praktikos vadovo pavardė, vardas, kontaktai	Temos pavadinimas lietuviškai ir angliškai
35.	Arūnas Maršalka, FTMC, Saulėtekio al. 3 B 320 kab. Tel. 85 223 4593, arunas.marsalka@ff.vu.lt	Naujos kartos medžiagų, naudojamų šviesos technologijose, tyrimas branduolių magnetinio rezonanso spektroskopijos metodu <i>Investigation of a new generation of materials used in light technologies by nuclear magnetic resonance spectroscopy</i>