**Profesinė praktika** (IV k. Šviesos technologijos)

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba) | Tema laisva/užimta |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 8 662 38767) | Biologinių sistemų tyrimas veikiant jonizuojančia spinduliuote  *Ivestigation of Biological Systems Exposed to Ionising Radiation* | Gyvieji organizmai veikiami natūralaus radiacinio fono, kuris nuolat daro pažeidimus biologinėse sistemose. Ląstelės turi apsisaugojimo mechanizmus, kurie leidžia atstatyti sukurtus pokyčius. Mokslo šaka, tyrinėjanti jonizuojančios spinduliuotės veikimą gyvybei yra ganėtinai sena, tačiau tikslūs biologiniai ir fizikiniai mechanizmai vis dar nėra iki galo ištirti. Šiuo darbu bandysime taikyti naujus elektrinius metodus ir gilintis į fizikinius mechanizmus, kurie galėtų paaiškinti biologinių sistemų veikimą | laisva |
|  | dr. Rokas Dobužinskas (rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt, 8 662 38767) | Riebalų rugščių kristalitų gamyba ir jų fizikinių savybių tyrimas  *Production of fatty acid crystallites and investigation of their physical properties* | 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 kiečiausią kristalinę formą. Šiame darbe bus gaminami riebalų rūgščių kristalitai ir tiriamos jų fizikinės savybės. Pagaminti kristalai bus analizuojami rentgeno spindulių difrakcija (naujuoju Rigaku SmartLab prietaisu) | laisva |
|  | Dr. Vytautas Klimavičius, [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  (8 5) 223 4588 | NASICON tipo kompozitinių medžiagų, skirtų baterijų taikymams, kietojo kūno BMR spektroskopija  *Solid state NMR of NASICON based materials for sodium batteries* | Tirsime kietojo kūno BMR metodais medžiagas, kurios yra skirtos natrio baterijoms. Tokios baterijos gali būti panaudotos elektros tinklo stabilizavimo poreikiams tenkinti. | laisva |
|  | Dr. Vytautas Klimavičius, [vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)  (8 5) 223 4588 | Kalcio fosfatų, skirtų kaulų audinių inžinerijai, kietojo kūno BMR spektroskopija  *Solid state NMR of calcium phosphates for bone tissue engineering* | Tirsime kietojo kūno BMR metodais kalcio fosfatų pagrindu pagamintas medžiagas. Jos yra skirtos kaulų inžinerijai, nes primena kietuosius kaulinius audinius | laisva |
|  | Gytis Sliaužys (gytis.sliauzys@ff.vu.lt, 8 5 223 4553) | Krūvininkų pernašos savybių tyrimas organiniuose lauko tranzistoriuose  *Investigation of charge carriers transport properties in organic field-effect transistors* | Šio darbo tikslas: pasigaminti organinius lauko tranzistorius naudojant skirtingus organinius puslaidininkius; skirtingomis metodikomis ištirti, šių puslaidininkių, krūvio pernašos savybes organiniuose lauko tranzistoriuose; iš gautų rezultatų nustatyti naudotų organinių puslaidininkių tinkamumą organiniams lauko tranzistoriams | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Aleno karotinoidų krūvio pernašos būsenų modeliavimas  *Charge transfer state modeling for allene carotenoids* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  Aleno karotinoidai pasižymi papildoma krūvio pernašos būsena, kuri vizualiai priklauso nuo molekulės cheminė struktūros. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes. Reikės modeliuoti struktūras, atlikti kvantinę molekulių dinamiką. Atlikti MD skaičiavimus su naujausiu AMBER paketu ir ab initio skaičiavimus su Gaussian 16 ir NwChem ir kitais įsisavintais paketais. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių baltymų modeliavimas su karotinoidais panaudojant GROMACS paketą  *Modeling of Various Carotenoids with Protein using GROMACS package* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  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. Reiks atlikit superkompiuterio našumo analizę ir paruošti GROMACS naudojimo instrukcijas. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų duomenų bazė ir informacinė sistema  *The Database and Information System for the results of the Quantum Chemical calculations* | 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 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 atliekamai superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis | laisva |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  Tel. +370 5 223 4659  El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt  http://www.supercomputing.ff.vu.lt | Įvairių baltymų modeliavimas su karotinoidais panaudojant pasirinktą kantinės chemijos paketą  *Modeling of Various Carotenoids with Protein using chosen quantum chemistry package* | Karotinoidai yra paplitę yra paplitę gyvojoje gamtoje, kurių savybės išnaudojamos įvairiuose procesuose.  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 NwChem, Orca, Quantum ESPRESSO ir kt.. Darbo tikslas skaičiuoti įvairių karotinoidų struktūrines ir spektrines savybes, naudojant pasirinktą paketą. Reikės įdiegti paketą, įgyti kompiliavimo žinių su C++/FORTRAN/Java/Python ir atlikti našumo tyrimus. Atlikti ab initio skaičiavimus karotinoidams esantiems baltyminėje aplinkoje su pasiriktu paketais. Reiks atlikit superkompiuterio našumo analizę ir paruošti paketo naudojimo instrukcijas. Skaičiavimai bus atliekami su superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis. | laisva |
|  | Darius Abramavičius, [darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt),  Saulėtekio al. 3, A312,  Tel. (8 5) 223 4544 | Eksitonų dinamikos ir disociacijos modeliavimas organiniuose saulės elementuose  *Modeling of excitation dynamics and charge separation in organic solar cells* | Organiniai saulės elementai yra netvarkios medžiagos sudarytos iš donorinių ir akceptorinių molekulinių chromoforų. Naudojant fenomenologinį stipraus ryšio modelį bus modeliuojama sužadinimo kvantinė dinamika ir disociacija | laisva |
|  | Kristijonas Genevičius  [kristijonas.genevicius@ff.vu.lt](mailto:kristijonas.genevicius@ff.vu.lt)  tel.: 85 233 4553 | HOMO lygmenų nustatymas organiniuose puslaidininkiuose PYS metodu  *Determination of the HOMO energy in organic semiconductors by PYS* | Fotoemisijos išeigos spektroskopijos būdų bus nustatomi naujų medžiagų skirtų saulės elementams HOMO energetiniai lygmenys ir molekulinės struktūros įtaka HOMO lygmens padėčiai | užimta |
|  | Kristijonas Genevičius  [kristijonas.genevicius@ff.vu.lt](mailto:kristijonas.genevicius@ff.vu.lt)  tel.: 85 233 4553 | Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos modeliavimas baigtinių elementų metodu  *Numerical modeling of charge carriers transport and recombination by finite element method* | Pasitelkus Matlab arba (ir) C++ baigtiniu elementų metodu (1D) bus skaitmeniškai modeliuojamas krūvininkų judėjimas bei rekombinacija, esant skirtingiems žadinimo intensyvumams, apkrovos varžai bei skirtingiems bimolekulinės rekobinacijos koeficientams | užimta |