**2021 metais M1 mokslo tiriamosios praktikos ChFI siūlomų temų sąrašas**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Eil. Nr.** | **Vadovas** | **Temos pavadinimas** | **Trumpas temos aprašymas** | **Temos statusas (2021 02 17)** |
|  | Darius Abramavičius [darius.abramavicius@ff.vu.l](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.l) | Molekulių kompleksų eksitoninio Hamiltoniano optimizavimas naudojant struktūrinius duomenis.  *Optimization of exciton hamiltonian based on structural data for molecular complexes.* | Tęstinis darbas | Jau pasirinkta |
|  | Darius Abramavičius [darius.abramavicius@ff.vu.lt](mailto:darius.abramavicius@ff.vu.lt) | Molekulių komplekso sužadintų būsenų dinamikos teorinis tyrimas naudojant variacinius metodus.  *Excitation dynamics in molecular complexes using variational approaches.* | Tęstinis darbas | Jau pasirinkta |
|  | Nerijus Nekrašas, [nerijus.nekrasas@ff.vu.lt](mailto:nerijus.nekrasas@ff.vu.lt) | Rekombinacijos mechanizmų tyrimai plonasluoksniuose organiniuose dariniuose.  *Investigation of recombination of charge carriers in thin organic films.* | Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos parametrų nustatymas skirtingais tyrimų metodais organiniuose sluoksniuose bei jų palyginimas tarpusavyje | Jau pasirinkta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  [mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt)  <http://www.supercomputing.ff.vu.lt> | Karotenporfirino dyados dimero modeliavimas tankio funkcionalų metodais.  *Carotenoporphyrin dyad of artificial photosynthesis modeling with DFT.* | Fotosintezė yra labai svarbus biologinis procesas, kurios aktyvacijai augaluose yra reikalinga šviesos energija. Ją padeda surinkti ir konvertuoti į šiluminę energiją trys pagrindinės pigmentų klasės fotosintezėje: (bakterijos) chlorofilai, karotinoidai, ir fikobilinai. Ir deja kiekvienas iš šių pigmentų sąveikaudamas su šviesa sugeria tik siaurą spektro ruožą. Norint supaprastinti fotosintezės procesą, yra dirbtinai kuriamos struktūros vadinamos dyadomis, kurios paprastai būna sudarytos iš chemiškai sujungtų karotinoido ir chorofilo dalių, kurios išsaugo karotinoidines savybes[1,2]. Ištirti dyados karotenporfirino dimero energetinius paviršius sus skirtinga DFT ir molekulių dinamikos metodikomis. | Jau pasirinkta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis [mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt)  <http://www.supercomputing.ff.vu.lt> | Bakteriorodopsino baltymo aktyvaus centro modeliavimas naudojant molekulių dinamika.  *Bacteriorhodopsin protein active center modeling using molecular dynamics.* | 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 karotinoido (betakaroteno) molekulės, kurių spektrinės savybes daugiausia nulemtos polyeninės grandinėlės. Visgi Retinalio sužadintos energijos visiškai skiriasi tiek nuo tipinių karotinoidų, tiek nuo polieno molekulių [1,2]. Kvantinės chemijos metodai, tokie kaip DFT, kartu su molekulių mechanika, panaudojant superkompiuterių resursus, leidžia modeliuoti dideles molekulines struktūras, baltymus. Naudojant kvantinės molekulių dinamikos metodikas galima modeliuoti retinalio molekulę ir Bakteriorodopsino baltymą. 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. atomų baltymų struktūras paketams. Atlikti molekulių dinamikos skaičiavimus su Gaussian 09 arba kitu įsisavintu paketu. Skaičiavimai bus atliekamai su superkompiuteriu Saulėtekio dalies „VU HPC“ . | Jau pasirinkta |
|  | Doc. dr. Mindaugas Mačernis  [mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt)  <http://www.supercomputing.ff.vu.lt> | Kvantinio kompiuterio kubitų simuliavimas superkompiuteryje.  *Qubits Simulations for the quantum computer with supercomputer.* | Kvantiniai kompiuteriai jau kuriami nuo keliasdešimties iki kelių tūkstančių kubitų sistemomis. Visgi, jų fizikinis realizavimas ir panaudojimo algoritmai vis dar nėra iki galo suprasti. Vienas kvantinių kompiuterių tyrimo metodas pasinaudojant kvantinių stimuliatoriais, kurie vykdomi superkompiuteriais, tokiu būdu tikintis išvystyti kvantinių kompiuterių galimybes bei suprasti vykstančius fizikinius procesus. Darbo tikslas simuliuoti ir analizuoti kvantinio kompiuterio kubitus su superkompiuteriu Saulėtekio dalies „VU HPC“. | Jau pasirinkta |
|  | Jevgenij Chmeliov [jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt](mailto:jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt) | Fotosintetinio FCP komplekso chlorofilų tarpusavio sąveikos modeliavimas.  *Modeling of inter-chlorophyll couplings in the photosynthetic FCP complex.* | Pasinaudojant kristalografiniais duomenimis ir kvantinės chemijos metodais paremtais skaičiavimais bus nustatomos fotosintetinio šviesorankos komplekso FCP chlorofilų tarpusavio sąveikos energijos | Jau pasirinkta |
|  | Jevgenij Chmeliov [jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt](mailto:jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt) | Fotosintetinių kompleksų chlorofilų krūvio pernašos būsenų charakterizavimas.  *Characterization of the chlorophyll–chlorophyll charge transfer states in the photosynthetic light-harvesting complexes.* | Bus charakterizuojamos kvantinės chemijos metodais paremtais skaičiavimais nustatytos chlorofilų krūvio pernašos būsenos fotosintetiniuose šviesorankos kompleksuose: šių būsenų energijos, krūvio tankiai, dipoliniai momentai bei aplink esančio baltymo įtaka šiems dydžiams | Jau pasirinkta |
|  | Valdemaras Aleksa ([valdemaras.aleksa@ff.vu.lt](mailto:valdemaras.aleksa@ff.vu.lt);  Tel: +370 5 223 4597 | XIX a. Ikonos gruntinio sluoksnio struktūrinių pokyčių tyrimas virpesinės spektroskopijos metodu.  *Investigation of structural changes in the ground layer of a 19th century icon by vibrational spectroscopy.* | Pirminių ikonos spektrinių tyrimų metu nustatyta, kad grunto sluoksnyje dominuoja anhidritas (CaSO4), tačiau aptinkamas ir dihidratis gipsas (CaSO4·2H2O).  Darbo metu bus paruošti nauji ikonos bei etaloninių gruntinio sluoksnio bandiniai ir užregistruoti jų virpesiniai spektrai, iš kurių bus siekiama nustatyti ikonos grunto dedamųjų medžiagų koncentraciją bei ištirti struktūrinius kalcio sulfato pokyčius. | Jau pasirinkta |
|  | Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt), http://web.vu.lt/ff/k.aidas/lt/ | Joninių skysčių tirpalų BMR spektrų modeliavimas taikant integruotą molekulių dinamikos/kvantinės mechanikos artinį.  *Modelling NMR spectra of ionic liquid solutions by combined molecular dynamics/quantum mechanics approaches.* | Šiame darbe bus atliekamos joninio sksyčio 1-butil-3metil-imidazolo nitrato ir vandens mišinių molekulinės dinamikos simuliacijos ir BMR spektrų modeliavimas jungtiniais kvantinės mechanikos ir molekulinės mechanikos metodais. | Jau pasirinkta |
|  | Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt),  http://web.vu.lt/ff/k.aidas/lt/ | Binarinių acto rūgšties ir dimetilsulfoksido mišinių tarpmolekulinių sąveikų ir BMR spektrų modeliavimas molekulių dinamikos ir kvantinės mechanikos metodais.  *A molecular dynamics/quantum mechanics study of intermolecular interactions and NMR spectra in binary mixtures of acetic acid and dimethyl sulfoxide.* | Tęstinis darbas | Jau pasirinkta |
|  | Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt),  http://web.vu.lt/ff/k.aidas/lt/ | Binarinių karboksi rūgščių ir N,N-dimetilformamido mišinių tarpmolekulinės struktūros ir BMR parametrų modeliavimas molekulių dinamikos ir kvantinės mechanikos metodais.  *A molecular dynamics/quantum mechanics study of intermolecular structure and NMR spectra in binary mixtures of carboxylic acids and N,N-dimethylformamide.* | Tęstinis darbas | Jau pasirinkta |
|  | dr. Stepas Toliautas [stepas.toliautas@ff.vu.lt](mailto:stepas.toliautas@ff.vu.lt) | Molekulinių vyksmų reakcijos koordinatės nustatymas mašininės duomenų analizės metodais  *Reaction coordinate estimation of molecular processes using machine-learning based data* | Šviesai jautrių molekulių struktūros kitimas neretai modeliuojamas kaip vienos ar kelių savųjų koordinačių (ryšių ilgių ir kampų) pokytis, bet realios molekulės kelias dažnai apima ir likusias jos dalis. Šio darbo metu bus bandoma išsiaiškinti, ar mašinų mokymo metodais galima patikslinti BODIPY molekulinio rotoriaus reakcijos kelio aprašymą.  Bus galimybė atliekant tyrimą naudoti „HPC Saulėtekis“ superkompiuterių resursus. | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas [stepas.toliautas@ff.vu.lt](mailto:stepas.toliautas@ff.vu.lt) | Acetilcholino dimero susidarymo neuronuose modeliavimas kvantinės chemijos metodais.  *Quantum chemical modeling of acetylcholine dimer formation in neural matter.* | Acetilcholinas (ACh) yra molekulė, dalyvaujanti signalų perdavimo nervų sistemoje vyksmų metu. Atskira stabili ACh molekulė turi elektrinį krūvį, tačiau egzistuoja ir neutrali molekulės forma, kurios stabilumas nėra iki galo ištirtas ir teoriškai galėtų būti padidintas molekulėms jungiantis į dimerus su neįprastomis savybėmis, kurios tinkamos kvantinės informacijos saugojimo tikslams. Šio darbo tikslas bus išsiaiškinti, ar ACh dimerai gali susidaryti gamtinio neurono viduje, ir patikslinti tokių dimerų savybes.  Skaičiavimams bus naudojami „HPC Saulėtekis“ superkompiuterių resursai. | Laisva |
|  | Nerijus Nekrašas, [nerijus.nekrasas@ff.vu.lt](mailto:nerijus.nekrasas@ff.vu.lt) | Skylių pernašos organiniuose lauko tranzistoriuose tyrimai.  *Investigation of hole transport in the organic field effect transistors.* | Skylių pernašos modeliavimas ir tyrimai organiniuose lauko tranzistoriuose tiek besiformuojant kanalui, tiek ir tekant stacionariai srovei. Organinio sluoksnio ir dielektriko sandūros defektų įtaka krūvininkų pernašai, tuo pačiu ir tekančiai srovei. | Laisva |
|  | Valdas Šablinskas  [Valdas.sablinskas@ff.vu.lt](mailto:Valdas.sablinskas@ff.vu.lt) | Optinės spektroskopijos metodų taikymas alyvuogių aliejaus kokybės nustatymui.  *Application of optical spectroscopy for studies of quality of olive oil.* | Maistinių aliejų kokybė yra susijusi su jų oksidaciniu stabilumu. Aliejų oksidaciniuose procesuose aktyviausiai dalyvauja lipidai. Lipidų oksidacijos preoduktai – tai molekulės, turinčios charakteringus optinius spektrus. Darbo metu bus registruojami aliejų optiniai spektrai ir ieškoma koreliacijos tarp spektrų ypatumų ir aliejų kokybės. | Laisva |
|  | Vytautas Balevičius  [vytautas.balevicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.balevicius@ff.vu.lt) | BMR (branduolių magnetinio rezonanso) metodo taikymai medžiagų struktūros tyrimuose.  *NMR applications in the material structure studies.* | Išmokti dirbti su modernia magnetinių rezonansų įranga ir atlikti naujai susintetintų medžiagų struktūros ir dinaminių vyksmų tyrimus | Laisva |
|  | Vytautas Klimavičius  [Vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:Vytautas.klimavicius@ff.vu.lt) | Bio-keraminių mikrosferų kietojo kūno BMR (branduolių magnetinio rezonanso) tyrimas.  *NMR study of bio-ceramic microspheres.* | Išmokti dirbti su modernia magnetinių rezonansų įranga ir atlikti naujai susintetintų medžiagų struktūros ir dinaminių vyksmų tyrimus | Laisva |
|  | Arūnas Maršalka [arunas.marsalka@ff.vu.lt](mailto:arunas.marsalka@ff.vu.lt) | EPR (elektronų paramagnetinio rezonanso) metodo taikymai naujų medžiagų struktūriniuose tyrimuose.  *EPR applications for structural studies of new materials.* | Išmokti dirbti su modernia magnetinių rezonansų įranga ir atlikti naujai susintetintų medžiagų struktūros ir dinaminių vyksmų tyrimus | Laisva |
|  | Arūnas Maršalka [arunas.marsalka@ff.vu.lt](mailto:arunas.marsalka@ff.vu.lt) | Fotovaistų ir vitamino C fotovirsmų tyrimai optinės ir EPR spektroskopijos metodais.  *Studies of phototransitions in photo-medicaments and vitamin C by means of optical and EPR spectroscopy.* | Tyrimai – su AlPcS4, HP dimetilo esteriu, TPPS4, tiriant vandeninėse buferinėse terpėse bei natūraliuose aliejuose, vertinant baltymo ir sunkiųjų metalų bei antioksidantų – antocianinų, beta-tokoferolio poveikį radikalų susidarymui ir fotosensibilizatorių bei antioksidantų spektrinių savybių pokyčiams | Laisva |
|  | Arūnas Maršalka [arunas.marsalka@ff.vu.lt](mailto:arunas.marsalka@ff.vu.lt) | Fotooksidacinių procesų natūralios kilmės aliejuose tyrimai optinės ir EPR spektroskopijos metodais.  *Studies photooxidation in natural oils by means of optical and EPR spectroscopy.* | Tyrimai – su AlPcS4, HP dimetilo esteriu, TPPS4, tiriant vandeninėse buferinėse terpėse bei natūraliuose aliejuose, vertinant baltymo ir sunkiųjų metalų bei antioksidantų – antocianinų, beta-tokoferolio poveikį radikalų susidarymui ir fotosensibilizatorių bei antioksidantų spektrinių savybių pokyčiams | Laisva |
|  | Justinas Čeponkus  [justinas.ceponkus@ff.vu.lt](mailto:justinas.ceponkus@ff.vu.lt) | Molekulių su silicio pakaitalais struktūros tyrimas žemųjų temperatūrų virpesinės spektroskopijos metodu.  *Study of the Silicon cointaing molecules by the means of low temperature vibrational spectroscopy.* | Tyrimo idėja nustatyti naujai susintetintų Silicio pakaitalų turinčių molekulių struktūras, jų konformacinę įvairovę. Tyrimai bus atliekami izoliuojant molekules žemos temperatūros inertinėse terpėse naudojant Infraraudonosios spinduliuotės spektroskopija bei kvantines chemijos modeliavimus. | Laisva |
|  | Justinas Čeponkus  [justinas.ceponkus@ff.vu.lt](mailto:justinas.ceponkus@ff.vu.lt) | Navikinių audinių identifikavimas Infraraudonosios spektroskopijos metodu.  *Identification of tumorous tissues by the means of infrared spectroscopy.* | Tyrimo idėja pritaikyti infraraudonosios spektrometrijos ir statistinės analizės metodus sparčiam navikinių ir sveikų audinių atskyrimui. Tyrimo metu reikės surinkti statistiškai reikšmingus duomenų kiekius ir pritaikyti statistinės analizės metodus (Klasterių analizė, Regresinė PLS analizė ir kt.)duomenų apdorojimui. | Laisva |