



**VILNIAUS UNIVERSITETO
FIZIKOS FAKULTETO TARYBA**

**NUTARIMAS
DĖL FIZIKOS FAKULTETO CHEMINĖS FIZIKOS INSTITUTO MOKSLINĖS
TEMINĖS GRUPĖS PATVIRTINIMO**

Vadovaudamasi Vilniaus universiteto Statutu bei Fizikos fakulteto nuostatais, Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto taryba

n u t a r i a patvirtinti Fizikos fakulteto Cheminės fizikos instituto mokslinę teminę grupę pavadinimu „Biomolekulinių sistemų modeliavimo grupė“.

Grupės pavadinimas: Biomolekulinių sistemų modeliavimo grupė

Vadovas: doc. dr. K. Aidas [48 WoS publikacijos, h indeksas – 19]

Grupės nariai: dr. Dovilė Lengvinaitė, dokt. Žyginta Einorytė, dokt. Einaras Sipavičius, du bakalaurantai.

Grupės tematika: molekulinų sistemų, svarbių biologijoje, biochemijoje ir gyvybės moksluose, struktūrinių, spektrinių ir termodinaminių parametru modeliavimas, taikant klasikinės molekulių dinamikos simuliacijas, kvantinės chemijos metodus, tokius kaip jungtinis QM/MM metodas. Šiuo metu ypač didžioji dalis grupės pastangų sutelkta modeliuojant bioaktyvių joninių skysčių tarpmolekulinę struktūrą ir BMR spektrinius parametrus.

Grupės vykdomi projektai: LMT mokslininkų grupių projektas "Bioaktyvių joninių skysčių struktūrinių ir BMR spektrinių parametru modeliavimas", 2022-2025, biudžetas 150000 eur.

Grupės narių praeityje vykdyti projektai: LMT mokslininkų grupių projektas " BMR kvadrupolinės relaksacijos teorinių modelių vystymas ir taikymai", 2017-2020, biudžetas 100000 eur. K. Aidas nuo 2013 m. vadovavo arti dešimties LMT finansuojamų studentų mokslinių tyrimų/praktikų projektams.

Artimiausiu metu planuojamos teikti paraiškos: LMT dvišalių Lietuvos-Ukrainos bendradarbiavimo projekto paraiška (pateikta š.m. gegužės 3 d.), LMT studentų mokslinės praktikos vasaros atostogų metu paraiška, LMT studentų mokslinių tyrimų mokslo metų metu paraiška.

Bendradarbiavimas:

Prof. Francesca Mocchi, Kaljario universitetas, Italija.

Prof. Aatto Laaksonen, Stokholmo universitetas, Švedija.

Prof. Andres Cedillo, UAM universitetas, Meksiko m., Meksika.

Prof. Vytautas Balevičius, dr. Vytautas Kilmavičius, VU FF Cheminės fizikos institutas, Magnetinių rezonansų laboratorija

Dr. Mantas Šimėnas, VU FF TETI.

Prof. Edvinas Orentas, VU ChGF.

Dalyvavimas tarptautiniuose mokslininkų bendradarbiavimo tinkluose: grupės nariai dalyvau ES COST veikloje nr. CA21101 Confined Molecular Systems: from a New Generation of Materials to the Stars. K. Aidas yra šios COST veiklos valdymo komiteto narys.

Grupės narių dėstomi dalykai: K. Aidas dėsto grupės mokslinei temai artimus dalykus Vilniaus universitete:

Kvantinė chemija – 2-ojo kurso ChGF biochemijos ir nanomedžiagų chemijos bakalaurantams.

Cheminė fizika – 1-ojo kurso FF gyvybės ir cheminės fizikos magistrantams.

Molekulinių sistemų modeliavimas – 1-ojo kurso FF gyvybės ir cheminės fizikos magistrantams.

DETALŪS METADUOMENYS

Dokumento sudarytojas (-ai)	Fizikos fakultetas, tel. 2366000, faks. 2366003, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius, el. p.: ff@ff.vu.lt
Dokumento pavadinimas (antraštė)	DĖL FIZIKOS FAKULTETO CHEMINĖS FIZIKOS INSTITUTO MOKSLINĖS TEMINĖS GRUPĖS PATVIRTINIMO
Dokumento registracijos data ir numeris	2023-05-11, (1.2 E) 120000-TPN-15
Adresatas	–
Dokumentą pasirašė	Instituto direktorius Egidijus Anisimovas
Veiksmo atlikimo data ir laikas	2023-05-11 11:09:02
Registratorius	Studijų administratorė Andželika Jankauskytė
Veiksmo atlikimo data ir laikas	2023-05-11 11:11:22
Dokumento nuorašo atspausdinimo data ir jį atspausdinęs darbuotojas	2023-05-11 atspausdino Studijų administratorė Andželika Jankauskytė

Nuorašas tikras
Vilniaus Universitetas
2023-05-11