

3 kurso Šviesos technologijų studijų programos Kursiniai 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.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>DNR kirpimo mechanizmo tyrimas tankio funkcionalių metodais su superkompiuteriu</p> <p><i>DNA Restriction endonuclease cleavage mechanisms DFT study using supercomputers</i></p>	<p>BCNI baltymas atpažįsta ir nukerpa tam tikras DNR sekas. Atpažinimo ir kirpimo mechanizmas nėra suprastas, tad reikalingas QM/MM modeliavimas. Darbo tikslas ištirti kaip ir kurios DNR struktūrinės dalys sudaro ryšius su BcnI baltymu. Darbo rezultatai patikslins apytiksliai žinomas BCNI aktyvių centrų atomų padėtis, bei kur ir kokie susidaro ryšiai tarp DNR ir BcnI baltymo. Darbe reikės paruošti apie 2 tūkst. atomų baltymų struktūras AMBER paketui. Atlikti DFT skaičiavimus su Gaussian 16 paketu. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p>	laisva
2.	<p>Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt</p>	<p>Kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatų duomenų bazė ir informacinė sistema</p> <p><i>The Database and Information System for the results of the Quantum Chemical calculations</i></p>	<p>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 pritaikyti 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 atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p>	laisva