

3 kurso Elektronikos ir telekomunikacijų technologijų Kursiniai darbai (elektronikos):

Eil. Nr.	Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.)	Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis)	Trumpas temos aprašymas (lietuvių kalba)	Tema laisva/užimta
1.	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>	Pasaulyje kuriamos technologijos, kuriose popieriaus pakuotėje nenaudojamas plastikas. Tuo pat metu tokia danga turi apsaugoti nuo drėgmės poveikio. Vandens garų difuzijos nustatymo metodas, pagrįstas paviršinio elektrinio laidumo kinetikos matavimu, įgalina popieriaus pakuotės technologinio gamybos proceso metu sparčiai nustatyti dangos tinkamumą, kokybę ir kitus parametrus. Kursiniame darbe bus tyrinėjami metodikos teoriniai aspektai bei atliekami popierinių dangų atsparumo drėgmei tyrimai.	laisva
2.	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 su superkompiuteriu <i>DNA Restriction endonuclease cleavage mechanisms DFT study using supercomputers</i>	BCNI baltymas atpažįsta ir nukerpa tam tikras DNR sekas. Atpažinimo ir kirpimo mechanizmas nėra suprstas, 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.	laisva
3.	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 <i>The Database and Information System for the</i>	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	laisva

		<i>results of the Quantum Chemical calculations</i>	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 atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.
--	--	---	---