

Magistrantūros 1 kurso Mokslo tiriamieji darbai:

Eil. Nr.	Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.)	Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis)	Trumpas temos aprašymas (lietuvių ir anglų kalbomis)	Tema laisva/užimta
1.	Darius Abramavičius	Krūvininkų savybių modeliavimas puslaidininkiniuose jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriuose <i>Modeling of charged quasiparticle properties in semiconducting detectors of ionizing irradiation</i>	Si- kristaliniai jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai yra plačiai naudojami CERN eksperimente kaip dalelių detektoriai. Jonizuojančioji spinduliuotė dažnai sukelia negrįžtamus medžiagos pokyčius – įvairius defektus. Šiame projekte studentai modeliuoja defektus ir jų elektronines savybes kvantinės mechanikos metodais ir įvertina, kaip įvairūs defektai lemia laisvų krūvininkų judėjimą ir gyvavimo trukmę.	laisva
2.	Prof. Gediminas Niaura gediminas.niaura@ftmc.lt ; mob.: 868645026 (VU Cheminės fizikos institutas)	Biomolekulių tyrimas in-situ elektrocheminėje fazių riboje naudojant paviršiaus sustiprintą infraraudonąją sugerties spektroskopiją <i>Surface-enhanced infrared absorption spectroscopy (SEIRAS) for probing of biomolecules in-situ at electrochemical interface</i>	Paviršiaus sustiprinta infraraudonoji sugerties spektroskopija (angl. SEIRAS) šiuo metu yra viena efektyviausių in-situ elektrocheminės fazių ribos tyrimo metodų gebančių suteikti molekulinio lygmens informaciją. Planuojame tirti elektrinio potencialo įtaka įtaką dirbtinių membranų struktūrai ir baltymų įsiterpimo ir sąveikos su membraną dėsningumus. Naudosime modernų vakuuminį Vertex 80v (Bruker) FTIR spektrometrą su ATR priedu paviršiaus tyrimams.	užimta
3.	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</i>	BCNI baltymas atpažįsta ir nukerpa tam tikras DNR sekas. Atpažinimo ir kirpimo mechanizmas nėra supastas, tad reikalingas QM/MM modeliavimas. Darbo tikslas iširti 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	užimta

4.	Dr. Kristijonas Genevicius, A304, 85 233 4553, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt	<p><i>mechanisms DFT study using supercomputers</i></p> <p>Krūvininkų rekombinacijos mechanizmo nustatymas heterostruktūrose</p> <p><i>Identification of carrier recombination mechanism in heterostructures</i></p>	<p>su Gaussian 16 paketu. Skaičiavimai bus atliekami superkompiuteriu „VU HPC“ Saulėtekis.</p> <p>Hibridinių sluoksnių gamyba (heterosandūros ir dvisluoksnės struktūros), judrio bei rekombinacijos tyrimai lėkio trukmės bei i-CELIV metodika.</p>	laisva
----	---	--	--	--------