**Mokslo tiriamasis darbas** (M1 Teorinė fizika ir astrofizika)

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt), +370 5 223 4593 | Joninių skysčių mišiniai su tradiciniais tirpikliais: struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  Modelling structural and NMR properties of mixtures between ionic liquids and traditional solvents | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. Dėl savo išskirtinės sudėties šie skysčiai pasižymi unikaliomis savybėmis, kurios atveria duris įvairialypiams jų taikymams cheminėje inžinerijoje, gyvybės moksluose ir nanotechnologijose. Siekiant suprasti ir kontroliuoti joninių skysčių fiziko-chemines savybes, būtina disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir tradicinių tirpiklių mišinių struktūra ir branduolių magnetinio rezonanso spektrai taikant modernius molekulinių sistemų modeliavimo metodus – klasikines molekulinės dinamikos simuliacijas ir jungtinius kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos modelius. Visi modeliavimo darbai bus atliekami VU aukšto našumo skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu.  Ionic liquids are modern and actively researched materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of mixtures of 3rd-generation ionic liquids with traditional solvents using advanced molecular modelling methods, including classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University. | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | Simvastatino sukeltų klampos pokyčių lipidinėje membranoje modeliavimas  Modeling of simvastatin-induced viscosity changes in a lipid membrane | Hidrodinamikos ir molekulių dinamikos skaičiavimai, siekiant suprasti stebimus reiškinius savito dizaino eksperimentinėje sistemoje | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | Mikroskopinės ir makroskopinės klampos įvertinimas lipidinėje membranoje  Estimation of micro- and bulk viscosity in lipid membranes using molecular sensors | Molekulinių klampos jutiklių dinamikos supaprastintoje ląstelės membranoje skaitiniai eksperimentai kvantinės chemijos ir molekulių dinamikos metodais | Laisva |
|  | dr. Stepas Toliautas  *stepas.toliautas@ff.vu.lt*  (85) 223 4661 | Mašinų mokymo metodų taikymas tankio molekulių savybių tyrimams naudojant tankio funkcionalo teoriją papildyti  Using machine learning to augment density-functional molecular modeling | Tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai, duomenų analizė ir panaudojimas mašinų mokymo modeliams (įskaitant generatyvinius DI modelius), siekiant perkelti chemines įžvalgas į algoritmus | Laisva |

**Mokslo tiriamasis darbas** (M2 Elektronika ir telekomunikacijų technologijos, Fotonika ir nanotechnologijos, Gyvybės ir cheminė fizika, Lazerinė fizika ir optinės technologijos, Lazerinė technologija, Teorinė fizika ir astrofizika)

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Eil. Nr. | Vadovas (vadovo el. p., darbo tel. nr.) | Temos pavadinimas (lietuvių ir anglų kalbomis) | Trumpas temos aprašymas (lietuvių ir anglų kalba) | Tema laisva/užimta |
|  | Doc. dr. Kęstutis Aidas, [kestutis.aidas@ff.vu.lt](mailto:kestutis.aidas@ff.vu.lt), +370 5 223 4593 | Joninių skysčių mišiniai su tradiciniais tirpikliais: struktūros ir BMR spektrų modeliavimas  Modelling structural and NMR properties of mixtures between ionic liquids and traditional solvents | Joniniai skysčiai yra modernios, itin aktyviai tyrinėjamos medžiagos, sudarytos vien tik iš organinių molekulinių katijonų ir organinių arba neorganinių anijonų. Dėl savo išskirtinės sudėties šie skysčiai pasižymi unikaliomis savybėmis, kurios atveria duris įvairialypiams jų taikymams cheminėje inžinerijoje, gyvybės moksluose ir nanotechnologijose. Siekiant suprasti ir kontroliuoti joninių skysčių fiziko-chemines savybes, būtina disponuoti detalia informacija apie šių sistemų struktūrą ir dinamiką molekuliniame lygmenyje. Šiame darbe bus modeliuojami 3-ios kartos joninių skysčių šeimos joninių skysčių ir tradicinių tirpiklių mišinių struktūra ir branduolių magnetinio rezonanso spektrai taikant modernius molekulinių sistemų modeliavimo metodus – klasikines molekulinės dinamikos simuliacijas ir jungtinius kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos modelius. Visi modeliavimo darbai bus atliekami VU aukšto našumo skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu.  Ionic liquids are modern and actively researched materials composed solely of organic molecular cations and organic or inorganic anions. Due to their unique composition, these liquids exhibit distinctive properties that open doors to diverse applications in chemical engineering, life sciences, and nanotechnology. To understand and control the physicochemical properties of ionic liquids, detailed information about the structure and dynamics of these systems at the molecular level is of utmost importance. This work will involve modelling the structure and nuclear magnetic resonance spectra of mixtures of 3rd-generation ionic liquids with traditional solvents using advanced molecular modelling methods, including classical molecular dynamics simulations and combined quantum mechanics/molecular mechanics approaches. All modeling work will be performed using the supercomputer available at high-performance computing center "HPC Saulėtekis" of Vilnius University | Laisva |
|  | Vytautas Klimavičius  vytautas.klimavicius@ff.vu.lt | In-situ BMR zondo tyrimas  In-situ NMR probe investigation | Kursim ir testuosim in-situ BMR zondą. Design and investigation of in-situ NMR probe | Užimta |
|  | Mindaugas Viliūnas mindaugas.viliunas@ff.vu.lt  tel. 868728948 | Keturių kvadrantų keitiklio taikymai  Applications of four quadrant converter. | 4 kvadrantų keitiklis, priklausomai nuo jame naudojamų raktų valdymo, gali dirbti kaip teigiamos ar neigiamos įtampos srovę tiekiantis ar paimantis(grąžinantis į prijungtą maitinimo šaltinį) prietaisas. Darbo metu reikės ištirti šio, LT8714 valdiklio pagrindu padaryto, naujoviškos topologijos keitiklio taikymo galimybes. | Užimta |