



TEMOS PAVADINIMAS:

MOKSLO KRYPTIS:

Šilumos ir masės mainų procesų tyrimas
Molekulinės dinamikos metodais

Energetika ir termoinžinerija (T 006)

TRUMPAS APRAŠAS:

Kviečiame studentus rinktis doktorantūros studijas, orientuotas į šilumos ir masės mainų procesų skaitinį modeliavimą Molekulinės dinamikos (MD) metodu. MD metodas naudojamas skaitiniu būdu spręsti atskirų atomų / molekulių judėjimą nagrinėjamoje sistemoje, o tai gali padėti susieti molekulinį judėjimą su makroskopiniais parametrais ir suteikti naudingos informacijos apie procesus mažose skalėse, dar sunkiai pasiekiamose eksperimentiniais metodais. Studentai turės galimybę taikyti MD metodą ir dirbti vienoje iš šių temų:

- garavimo/kondensacijos procesų nanoskalėse tyrimas;
- šilumos ir masės mainų procesų nanokanaluose tyrimas;
- didesnio masto molekulinį struktūrų atsiradimo ir skilimo dėl vandenilinių jungčių sąveikos tarp kelių vandens molekulių tyrimas.
- vandenilio ir helio įtakos medžiagų struktūrai ir savybėms tyrimas;
- katalizinių cheminių reakcijų prie katalizatoriaus paviršiaus, pvz., vandenilio susidarymo metano pirolizės metu, tyrimas.

Doktorantas atliks MD modeliavimus, analizuos gautus duomenis ir viešins gautus rezultatus tarptautinėse konferencijose užsienyje bei mokslo žurnaluose. Studijų metu doktorantas tobulins problemų sprendimo, duomenų analizės, mokslinio rašymo ir rezultatų sklaidos įgūdžius. Be to, studentas taip pat turės galimybę tobulinti arba išmokti programavimo įgūdžių pasirinkta programavimo kalba, nes tai naudinga modeliavimo duomenų analizei.

Tyrimus siūlanti komanda šioje srityje dirba jau daugiau nei 10 metų, todėl iškilus klausimams visada galės padėti, patarti ir motyvuoti.

Jauni mokslininkai, norintys pradėti doktorantūros studijas šiose temose, kviečiami kreiptis į projekto mokslinį vadovą dėl išsamesnės informacijos.

MOKSLINIO TYRIMO VADOVAS:

Dr. Gediminas Skarbalius
Šiluminių įrengimų tyrimo ir bandymų laboratorija

Lietuvos energetikos institutas
Breslaujos 3, 44403 Kaunas
Lietuva

Gediminas.Skarbalius@lei.lt

Daugiau informacijos ir pilną disertacijų tyrimų tematikų sąrašą rasite adresu

<https://www.lei.lt/doktorantura/>