Cheminės fizikos instituto siūlomos temos 2020-2021 m. m. rudens semestre

Nr.	Mokslo tiriamojo darbo vadovo pavardė, vardas, kontaktai	Temos pavadinimas lietuviškai ir angliškai
1.	Genevičius Kristijonas, Saulėtekio al. 3, A304, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt tel. +370 5 2234553	Tūrinės heterosandūros struktūros įtaka krūvininkų pernašai ir rekombinacijai *Influence of the structure of bulkheterojunction on carrier transport and recombination*
2.	Genevičius Kristijonas, Saulėtekio al. 3, A304, kristijonas.genevicius@ff.vu.lt tel. +370 5 2234553	Rekombinacinių procesų tyrimai dvisluoksniuose hibridiniuose dariniuose *Investigations of recombination in two layered hybrid films*
3.	Toliautas Stepas, dr. stepas.toliautas@ff.vu.lt NFTMC (Saulėtekio al. 3), B424 kab.	Molekulinių vyksmų reakcijos koordinatės nustatymas mašininės duomenų analizės metodais *Reaction coordinate estimation of molecular processes using machine-learning based data analysis*
4.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Karotinoidų molekulinių struktūrų ir jų spektrų modeliavimas tankio funkcionalų ir molekulių dinamikos metodais *Carotenoid structure and spectral properties study using DFT and MD methods*
5.	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 ir molekulių dinamikos metodais *DNA Restriction endonuclease cleavage mechanisms DFT and MD study*
6.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Retinalio molekulės energetinių paviršių modeliavimas ir molekulių dinamikos skaičiavimai baltyminėje bakteriorodopsino aplinkoje *Retinal molecule potential energy surface DFT and MD study in protein environment*
7.	Doc. dr. Mindaugas Mačernis Tel. +370 5 223 4659 El.p. mindaugas.macernis@ff.vu.lt http://www.supercomputing.ff.vu.lt	Alicino molekulės kompleksų modeliavimas ir molekulių dinamikos skaičiavimas baltyme *Complex of allicin molecules molecular dynamics study*
8.	Kęstutis Aidas, kestutis.aidas@ff.vu.lt 8 5 223 4593, http://web.vu.lt/ff/k.aidas/lt/	Joninių skysčių tirpalų BMR spektrų modeliavimas taikant integruotą molekulių dinamikos/kvantinės mechanikos artinį *Modelling NMR spectra of ionic liquid solutions by combined molecular dynamics/quantum mechanics approaches*
9.	Darius Abramavičius Tel. +370 5 236 6281, darius.abramavicius@ff.vu.lt	Netiesinių spektrų ir relaksacinių reiškinių modeliavimas J agregatuose *Modeling of nonlinear spectra and relaxation processes in linear aggregates*

10.	Darius Abramavičius Tel. +370 5 236 6281, darius.abramavicius@ff.vu.lt	Netiesinių spektrų ir relaksacinių reiškinių modeliavimas fotosintetiniuose agregatuose: elektroniniai ir virpesiniai reiškiniai *Modeling of nonlinear spectra and relaxation processes in photosynthetic aggregates: electronic and vibrational properties*
11.	Darius Abramavičius Tel. +370 5 236 6281, darius.abramavicius@ff.vu.lt	Netiesinių spektrų ir relaksacinių reiškinių modeliavimas variaciniais metodais: elektroniniai ir virpesiniai reiškiniai *Modeling of nonlinear spectra and relaxation processes by variational approaches: electronic and vibrational properties*
12.	Robertas Maldžius, robertas.maldzius@ff.vu.lt, +37052366052, VU FF 622	Drėgmės difuzija popieriaus struktūrose, matuojant paviršiaus elektrinį laidumą *Moisture diffusion in paper structures by measuring the electrical conductivity of a surface*
13.	Kęstutis Arlauskas, kestutis.arlauskas@ff.vu.lt	Naujų biciklinių junginių sluoksnių formavimas ir savybių tyrimas *Deposition of layers of a new byciclic compounds and research of features*
14.	Andrius Gelžinis andrius.gelzinis@ff.vu.lt	[Tema jau pasirinkta] Molekulinio dimero sugerties Štarko spektrų modeliavimas *Simulations of Stark absorption spectra of a molecular dimer*
15.	Jevgenij Chmeliov, NFTMC B423 kab., jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt	Fotosintetinių pigmentų tarpusavio sąveikos modeliavimas kvantinės chemijos metodais *Modeling interaction between photosynthetic pigments by using quantum chemical methods*
16.	Vytautas Balevičius vytautas.balevicius@ff.vu.lt	Naujų medžiagų optinėms technologijoms tyrimas BMR (branduolių magnetinio rezonanso) metodu *NMR study of novel optical materials*
17.	Arūnas Maršalka arunas.marsalka@ff.vu.lt	Naujų medžiagų optinėms technologijoms tyrimas EPR (elektronų paramagnetinio rezonanso) metodu *EPR study of novel optical materials*