

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Centras	Skyrius
<b>Optinė spektroskopija</b> (10 ECTS kreditų)	Fizika N 002	Fizinių ir technologinių mokslų centras	Optoelektronikos skyrius Molekulinių darinių fizikos skyrius Organinės chemijos skyrius
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos	20	Konsultacijos	30
Individualus	200	Seminarai	

### Dalyko anotacija

#### **Molekulinių medžiagų elektroninė spektroskopija.**

*Teoriniai pagrindai.* Elektroniniai šuoliai atomuose ir molekulėse. Elektroninių šuolių intensyvumai, atrankos taisyklės. Linijų išplitimas. Elektroninių šuolių energijos. Molekulių sugertis ir liuminescencija. Fluorescencija ir fosforescencija. Einšteino sąryšiai. Sudėtingų molekulių sugerties ir fluorescencijos spektrai, jų sąryšiai. Aplinkos įtaka sugerties ir liuminescencijos spektrams. Vanje-Motto, krūvio pernašos ir frenkelio eksitonai. Eksitonų delokalizacija agregatuose ir kietosiose molekulinėse medžiagose. Eksitonų lokalizacijos mechanizmai. Energijos pernaša ir fluorescencijos gesinimas. Krūvio pernaša, Markus teorija.

*Eksperimentiniai tyrimo metodai.* Stacionariosios sugerties ir liuminescencijos spektroskopija. Liuminescencijos dinamikos tyrimo metodai. Nanosekundinė ir ultrasparčioji sugerties žadinimo-zondavimo spektroskopija. Dinaminių gardelių metodas. Dvimatė koherentinė elektroninė ir virpesinė spektroskopija. Elektrosugerties ir elektroluminescencijos spektroskopija. Pavienių molekulių spektroskopija.

#### **Virpesinė spektroskopija.**

*Teoriniai pagrindai.* Infraraudonųjų ir Ramano spektrų prigimtis. Dviatomės molekulės virpesiai. Daugiaatomių molekulių virpesiai. Normaliniai virpesiai. Molekulių ir vibracijų simetrija. Fermi rezonansas. IR ir Ramano spektrų atrankos taisyklės. Rezonansinė Ramano (RR) ir koherentinė anti-stokso Ramano spektroskopija (KARS). Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (PSRS), stiprinimo mechanizmai, paviršiaus plazmonai. Izotopinių molekulių vibracijos. Ramano juostų depoliarizacijos santykis. Anomali poliarizacija. Charakteringieji virpesiai, spektrų interpretacija. Suminio dažnio generacijos (SDG) vibracinės spektroskopijos pagrindai.

*Eksperimentiniai tyrimo metodai.* FTIR spektroskopija. Pažeistojo vidaus atspindžio (angl. ATR), atspindžio-sugerties (angl. RAIRS) ir moduliaciniai IR spektroskopijos metodai. Atrankos taisyklės ant metalo paviršiaus adsorbotų junginių spektrams. Bandinių ruošimo ypatumai. Ramano spektrometro kalibracija. Paviršiai ir nanodalelės naudojami PSRS. Lazeriai Ramano spektroskopijai. UV-RR, Vis-Ramano ir FT-Ramano spektroskopijos metodų palyginimas. Ramano mikroskopija. SDG eksperimento ypatumai.

*Taikymas.* Molekulių cheminio ryšio, tarpmolekulinės sąveikos, vandenilinio ryšio, kompleksų susidarymo tyrimas. Biomolekulių virpesinė spektroskopija. Baltymų aktyvių centrų RR spektroskopija. Adsorbuotų junginių orientacijos ir sąveikos tyrimai, savitvarkių

monosluoksnių struktūros tyrimai. Laidžiųjų polimerų tyrimai virpesinės spektroskopijos metodais. Vienos molekulės PSRS.

### **Puslaidininkinių nanodarinių spektroskopija.**

*Kvantiniai kietojo kūno dariniai.* Kvantinės struktūros: kvantinės duobės, supergirdelės, kvantinės gijos, kvantiniai taškai. Eksitonai. Plazmonai. Magnonai. Nepriklausomų dviejų lygmenų sistema. Puslaidininkinės Blocho lygtys. Išsifazavimo procesai. Fazinės relaksacijos laikų matavimo principai. Krūvininkų relaksacija nanodariniuose. Kvantiniai mušimai. Blocho oscilacijos. Fononų dinamika. Eksitonų dinamika. Nemarkoviški procesai (*non-Markovian processes*). Tuneliavimo reiškiniai puslaidininkiniuose nanodariniuose.

*Eksperimentiniai tyrimo metodai:*

Fotoluminescencija ir žadinimo spektroskopija, optinė moduliacinė spektroskopija, pralaidumo spektroskopija, atspindžio spektroskopija, spektroskopija su laikine skyra; pavienių fotonų skaičiavimo eksperimentuose principai. Ultrasparčiosios spektroskopijos principai bei metodikos: žadinimo-zondavimo (*pump-probe*) spektroskopija, keturių-bangų maišymo metodas (*four-wave-mixing*), terahercinė spektroskopija. Koherentinė spektroskopija ir jos taikymai krūvininkų pernašos puslaidininkiniuose nanodariniuose tyrimams. Terahercinė puslaidininkinių darinių spektroskopija.

Netiesinės kieto kūno ir kvantinių darinių spektroskopijos principai. Didelio sužadavimo sąlygoti reiškiniai kietame kūne. Dvifotonė absorbcija. Motto tankis. Optinis bistabilumas.

### **Pagrindinė literatūra**

1. W. Demtroder, Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation, Springer-Verlag, Berlin 1996.
2. V. Gulbinas. Šviesos sukelti molekuliniai vyksmai ir jų lazerinė spektroskopija, Vilnius, leidykla TEV, 2008
3. B. Valeur, M. N. Berberan-Santos „Molecular fluorescence : principles and applications“, Wiley-VCH, 2001.
4. R. Ferraro, K. Nakamoto, Introductory Raman spectroscopy, Academic Press, 2003.
5. F. Siebert, P. Hildebrandt, Vibrational spectroscopy in life science, Wiley-VCH, 2008.
6. E. C. Le Ru, P. G. Etchegoin, Principles of surface-enhanced Raman spectroscopy and related plasmonic effects, Elsevier, Amsterdam, 2009.
7. V. Vaičiūskas, G.-J. Babonas, Z. Kuprionis, G. Niaura, V. Šablinskas, Paviršiaus optinė spektroskopija, TEV, 2008.
8. C. F. Klingshirm, Semiconductor optics, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1997.
9. Jagdeep Shah, Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures, Springer-New York, 1999.

### **Papildoma literatūra**

1. J. R. Lakowicz. Principles of Fluorescence Spectroscopy, Springer, 2006.
2. P. Atkins, J. De Paula, Physical Chemistry, W. H. Freeman and Company, 2006.
3. S. Mukamel, Principles of Nonlinear Spectroscopy, Oxford Univ. Press, 1999.
4. S. Juršėnas. Organiniai puslaidininkiai. Vilniaus universitetas, 2008.
5. B. Stuart, Infrared spectroscopy: fundamentals and applications, John Wiley & Sons, 2004.
6. K. Nakamoto, Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, Parts A and B, John Wiley and Sons, 1997.

Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Vidmantas Gulbinas	habil. dr.	prof.	1. R. Jasiūnas, R. Gegevičius, M. Franckevičius, N. Phung, A. Abate, V. Gulbinas, Suppression of Electron Trapping in MAPbI <sub>3</sub> Perovskite by Sr <sup>2+</sup> Doping,

			<p>Physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters 14 (11), 2000307. 2020.</p> <p>2. R Jasiūnas, H Zhang, J Yuan, X Zhou, D Qian, Y Zou, A Devižis, J. Sulskus, F. Gao, V. Gulbinas, From Generation to Extraction: A Time-Resolved Investigation of Photophysical Processes in Non-fullerene Organic Solar Cells, The Journal of Physical Chemistry C 124 (39), 21283-21292, 2020.</p> <p>3. R Jasiūnas, R Gegevičius, M Franckevičius, V Jašinskas, V Gulbinas, Energy Barriers Restrict Charge Carrier Motion in MAPI Perovskite Films, Advanced Optical Materials 8 (16), 2000036, 2, 2020.</p> <p>4. K.M.M. Salim, E. Hassanabadi, S. Masi, A.F. Gualdrón-Reyes, M. Franckevicius, A. Devižis, V. Gulbinas, A. Fakharuddin, I. Mora-Sero, Optimizing Performance and Operational Stability of CsPbI<sub>3</sub> Quantum-Dot-Based Light-Emitting Diodes by Interface Engineering, ACS Applied Electronic Materials 2 (8), 2525-2534, 2020.</p> <p>5. V Jašinskas, F Oberndorfer, T Hertel, V Gulbinas, Electronic and Ionic Electric Field Screening and Persistent Built-In Electric Field in Carbon Nanotube/PCBM Films, Physica status solidi (a) 217 (6), 1900673, 2020.</p>
Gediminas Niaura	habil. dr.		<p>1. A. Zdaniauskiene, T. Charkova, I. Ignatjev, V. Melvydas, R. Garjonyte, I. Matulaitiene, M. Talaikis, G. Niaura, Shell-isolated nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy for characterization of living yeast cells, Spectrochimica Acta Part A – Molecular and Biomolecular Spectroscopy 240 (2020) 118560.</p> <p>2. M. Talaikis, S. Strazdaite, M. Ziaunys, G. Niaura, Far of resonance: multiwavelength Raman spectroscopy probing amide bands of amyloid-beta-(37-42) peptide, Molecules 25 (2020) 3556.</p> <p>3. S. Strazdaite, E. Navakauskas, J. Kirschner, T. Sneideris, G. Niaura, Structure determination of hen egg-white lysozyme aggregates adsorbed to lipid/water and air/water interfaces, Langmuir 36 (2020) 4766-4775.</p> <p>4. M. Talaikis, G. Valincius, G. Niaura, Potential-induced structural alterations in the tethered bilayer lipid membrane-anchoring monolayers revealed by electrochemical surface-enhanced Raman spectroscopy, Journal of Physical Chemistry C 124 (2020) 19033-19045.</p> <p>5. R. Trusovas, K. Ratautas, G. Raciukaitis, G. Niaura, Graphene layer formation in pinewood by nanosecond</p>

			and picosecond laser irradiation, Applied Surface Science 471 (2019) 154-161.
Gintaras Valušis	habil. dr.	prof.	<p>1. Siemion, L. Minkevičius, L. Qi, G. Valušis, Spatial filtering based terahertz imaging of low absorbing objects, Optics and Lasers in Engineering 139, 106476, 2021.</p> <p>2. D. Seliuta, J. Vyšniauskas, K. Ikamas, A. Lisauskas, I. Kašalynas, A. Reklaitis, G. Valušis..., Symmetric bow-tie diode for terahertz detection based on transverse hot-carrier transport, Journal of Physics D: Applied Physics 53 (27), 275106, 2020.</p> <p>3. L. Minkevičius, L. Qi, A Siemion, D. Jokubauskis, A. Sešek, A. Švigelj, J. Trontelj, D. Seliuta, I. Kašalynas, G. Valušis, Titanium-Based Microbolometers: Control of Spatial Profile of Terahertz Emission in Weak Power Sources, Applied Sciences 10 (10), 3400, 2020.</p> <p>4. L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, G. Valušis, Bessel terahertz imaging with enhanced contrast realized by silicon multi-phase diffractive optics, Optics express 27 (25), 36358-36367, 2019.</p> <p>5. R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė, L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, G. Valušis, Flexible materials for terahertz optics: advantages of graphite-based structures, Optical Materials Express 9 (11), 4438-4446, 2019.</p>
Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2022 m. vasario 02 d.,			
protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-32			
Komiteto pirmininkas S. A. Juršėnas			