

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Centras	Skyrius
<b>Organinių medžiagų chemija ir fizika</b> (7,5 ECTS kredito)	Medžiagų inžinerija T 008	Fizinių ir technologijos mokslų centras	Molekulinių darinių fizikos skyrius
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	1
Individualus	6,5	Seminarai	

Dalyko anotacija
<p><b>Organinės medžiagos.</b> Struktūra – ryšiai, konjugacija, aromatiškumas ir heteroaromatiškumas. Organinių junginių reakingumo pagrindai, naujų struktūrų sintezė. Funkcinių grupių įtaka medžiagų fotofizinėms ir cheminėms savybėms, poliškumas ir tarpmolekulinės sąveikos. Terpės įtaka medžiagų savybėms – solvatochrominis efektas, terpės pH įtaka, koncentraciniai efektai. Padidinto tvarkingumo sistemos. Medžiagų grynumas – nustatymo būdai, gryninimo metodai ir įtaka fotofizinėms ir cheminėms medžiagų savybėms.</p> <p><b>Molekulių elektroninė sandara.</b> Organinių junginių elektroninė sandara, energijos lygmenų įvairovė. Atominės ir molekulinės orbitalės. Orbitalių hibridizacija. Elektronų delokalizacija. Elektroniniai šuoliai organinėse molekulėse. Šuolių intensyvumas. Atrankos taisyklės. Singuletiniai ir tripletiniai molekulių sužadainimai. Optinė sugertis ir liuminescencija. Sužadintos elektroninės-virpesinės būsenos ir jų evoliucijos kanalai. Franko-Kondono principas.</p> <p><b>Sužadainimo energijos pernaša.</b> Fiorsterio ir Deksterio energijos pernašos mechanizmai. Energijos migracija. Sužadainimų gėsinimas. Eksitoninė sąveika tarp molekulių. Molekuliniai dimerai ir agregatai. Dimerų elektroninės būsenos, sugertis ir liuminescencija. Molekuliniai agregatai. J- ir h-agregatai. Eksitonai.</p> <p><b>Elektrono pernaša</b> tarp organinių molekulių. Markuso teorija. Krūvio pernašos kompleksai, eksimerai, eksipleksai. Malikeno teorija. Vidumolekulinė krūvio pernaša. „TICT“ būsenos.</p> <p><b>Elektroniniai vyksmai molekulinėse kietosiose medžiagose.</b> Eksitonai molekulinėse medžiagose. Eksitoninės būsenos. Eksitonų judėjimas ir relaksacija. Krūvininkai molekulinėse medžiagose. Jonizuotos būsenos. Krūvininkų generacija ir injekcija. Krūvininkų rekombinacija.</p> <p><b>Fluorescencijos pagrindai.</b> Pagrindiniai fizikiniai terminai. Fluoroforų klasės: natūralūs ir dirbtiniai fluoroforai, fluorescuojantys baltymai. Fluorescencijos kinetika. Fluorescencijos anizotropija.</p> <p><b>Aplinkos įtaka fluorescencijai.</b> Tirpiklio ir įtaka fluorescencijos savybėms, spektrinė relaksacija įtakota tirpiklio. Fluorescencijos gėsinimas.</p> <p><b>Fluorescencijos mikroskopija.</b> Multifotoninė mikroskopija. Fluorescencijos gyvavimo trukmės mikroskopija. Tinkami fluorescenciniai žymekliai.</p>
Pagrindinė literatūra
<ol style="list-style-type: none"> <li>Donatas Mickevičius. Cheminės Analizės metodai. Žiburio leidykla, Vilnius. 1 Dalis. Spektrinė analizė. 1998. 2 Dalis. Elektrocheminė ir chromatografinė analizė. 1999.</li> <li>V. Gulbinas. Molekulinių vyksmų fizika: lazerinė spektroskopija. Vilniaus universitetas, 2007, 167 psl.</li> <li>B. Valeur, M. Nuno Berberan-Santos “Molecular Fluorescence: Principles and Applications”. 2nd Edition Wiley-VCH; 2013.</li> </ol>

4. J. R. Lakovicz, Principles of Fluorescence spectroscopy, Springer, 2006			
Dalyko atsiskaitymo būdas			
Doktorantai ruošiasi individualiai. Vyksta dvi, trys privalomos individualios konsultacijos. Doktorantas atsiskaito žodžiu atsakydamas į pateiktus klausimus. Vertinant atsižvelgiama ir į doktoranto pademonstruotas žinias konsultacijų metu.			
Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Pagrindinės mokslinės publikacijos per pastaruosius 5 metus
Viktoras Masevičius (viktoras.masevicius@chf.vu.lt)	dr.	prof.	<p>1. Stankevičius V, Gibas P, Masiulionytė B, Gasiulė L, Masevičius V, Klimašauskas S, and Vilkaitis G (2022). Selective chemical tracking of Dnmt1 catalytic activity in live cells. <i>Molecular Cell</i>, 82(5): 1053-1065. doi:10.1016/j.molcel.2022.02.008. Impact Factor: 19.3; Q1.</p> <p>2. Ličytė J, Kvederavičiūtė K, Rukšėnaitė A, Godliauskaitė E, Gibas P, Tomkutė V, Petraitytė G, Masevičius V, Klimašauskas S, Kriūkienė E (2022). Distribution and regulatory roles of oxidized 5-methylcytosines in DNA and RNA of the basidiomycete fungi <i>Laccaria bicolor</i> and <i>Coprinopsis cinerea</i>. <i>Open Biology</i>, 12(3):210302. doi:10.1098/rsob.210302. Impact Factor: 7.1; Q1.</p> <p>3. Rakauskaitė R, Urbanavičiūtė G, Simanavičius M, Lasickienė R, Vaitiekaitė A, Petraitytė G, Masevičius V, Žvirblienė A, Klimašauskas S (2020). Photocage-Selective Capture and Light-Controlled Release of Target Proteins. <i>ISCIENCE</i>, 23(12): 101833. doi:10.1016/j.isci.2020.101833. Impact Factor: 6.1; Q1.</p> <p>4. Petraitytė G, Vaitkevičius V, Özer B, Masevičius V (2019). Synthesis of 5-substituted and 5,6-disubstituted furo[2,3-d]pyrimidines from 2-methylthio-4,6-pyrimidindione and bifunctional electrophiles. <i>Tetrahedron Letters</i>, 60(15): 1019-1021. doi:10.1016/j.tetlet.2019.03.017. Impact Factor: 2.4; Q2.</p> <p>5. Mickutė M, Nainytė M, Vasiliauskaitė L, Plotnikova A, Masevičius V, Klimašauskas S, and Vilkaitis G (2018). Animal Hen1 2'-O-methyltransferases as tools for 3'-terminal functionalization and labelling of single-stranded RNAs. <i>Nucleic Acids Research</i>, 46(17): e104. doi: 10.1093/nar/gky514. Impact Factor: 19.2; Q1.</p>
Vidmantas Gulbinas, (vidmantas.gulbinas@ftmc.lt)	habil. dr.	prof.	<p>1. R. Jasiūnas, H. Zhang, A. Devižis, M. Franckevičius, F. Gao, V. Gulbinas, Thermally Activated Reverse Electron Transfer Limits Carrier Generation Efficiency in PM6:Y6 Non-Fullerene Organic Solar Cells, <i>SOLAR RRL</i>.</p> <p>2. L Abdelrazik, V Jašinskas, Ž Podlipskas, R Aleksiejūnas, G Tamulaitis, V. Gulbinas, A. Vyšniauskas,</p>

		<p>Exciton Transfer Dynamics and Annihilation in Rubidium–Cesium-Alloyed, Quasi-Two-Dimensional Perovskite, <i>Photonics</i> 9 (8), 578, 2022.</p> <p>3. R Jasiūnas, H Zhang, A Gelžinis, J Chmeliov, M Franckevičius, F Gao, V. Gulbinas, Interplay between charge separation and hole back transfer determines the efficiency of non-fullerene organic solar cells with low energy level offset, <i>Organic Electronics</i> 108, 1066011, 2022.</p> <p>4. A. Fakharuddin, M. Franckevičius, A. Devižis, A. Gelžinis, J. Chmeliov, P. Heremans, V. Gulbinas, Double charge transfer dominates in carrier localization in low bandgap sites of heterogeneous lead halide perovskites, <i>Advanced Functional Materials</i> 31 (15), 2010076, 2021.</p> <p>5. J. Chmeliov, K. Elkhoully, R. Gegevičius, L. Jonušis, A. Devižis, A. Gelžinis, M. Franckevičius, I. Goldberg, J. Hofkens, P. Heremans, W. Qiu, V. Gulbinas, Ion Motion Determines Multiphase Performance Dynamics of Perovskite LEDs, <i>Advanced Optical Materials</i> 9 (24), 2101560, 2021.</p>
<p>Patvirtinta Medžiagų inžinerijos mokslų krypties doktorantūros komiteto posėdyje 2023 m. vasario 09 d., protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-39</p>		
<p>Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Valdas Sirutkaitis</p>		