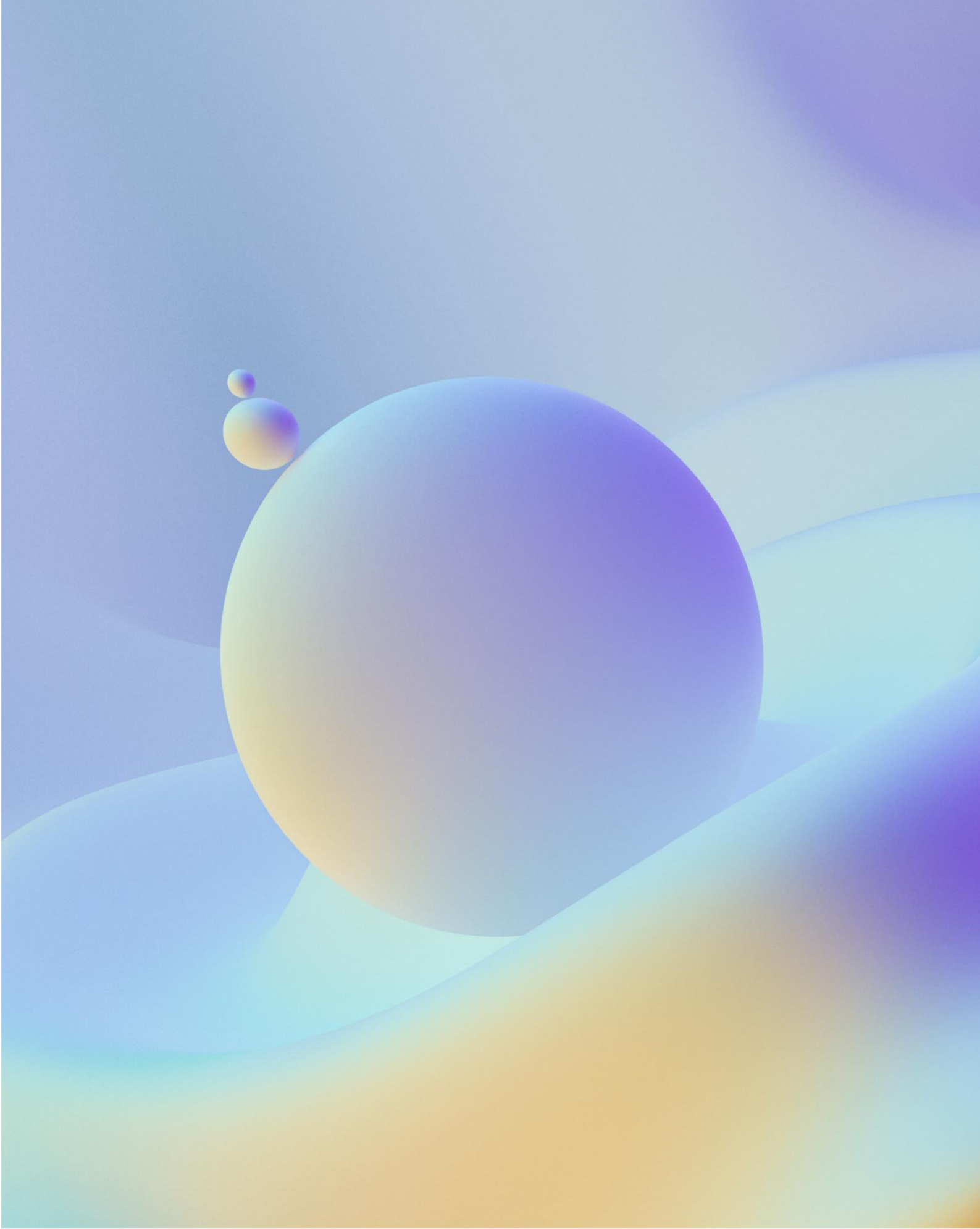




**Cheminės technologijos
fakultetas**



CHEMINĖS TECHNOLOGIJOS FAKULTETAS

Dekanas – dr. Kęstutis Baltakys

Studijų prodekanė – dr. Vaida Kitrytė

Mokslo prodekanė – dr. Vilija Kederienė

Administravimo vadovas – dr. Zenonas Valančius

Padalinio struktūra

Aplinkosaugos technologijos katedra – vedėja dr. Violeta Kaunelienė

Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra – vedėja dr. Ingrida Ancutienė

Maisto mokslo ir technologijos katedra – vedėja dr. Loreta Bašinskienė

Organinės chemijos katedra – vedėja dr. Eglė Arbačiauskienė

Polimerų chemijos ir technologijos katedra – vedėja dr. Joana Bendoraitienė

Silikatų technologijos katedra – vedėjas dr. Raimundas Šiaučiūnas

Sintetinės chemijos institutas – direktorius habil. dr. Algirdas Šačkus

Bioprosesų tyrimų centras – vadovas dr. Naglis Malys

Prioritetinės mokslo kryptys, ilgalaikės prioritetinės mokslo bei inovacijų proveržio kryptys

Prioritetinės mokslo kryptys: Naujos medžiagos aukštosios technologijos, Technologijos darniam vystymuisi ir energetika

Ilgalaikės prioritetinės mokslo bei inovacijų proveržio kryptys: Naujos medžiagos pramonei ir medicinai, Maisto technologijos

Mokslo kryptys

N 003 Chemija, T 004 Aplinkos inžinerija, T 005 Chemijos inžinerija, T 008 Medžiagų inžinerija

Vykdomų studijų kryptys

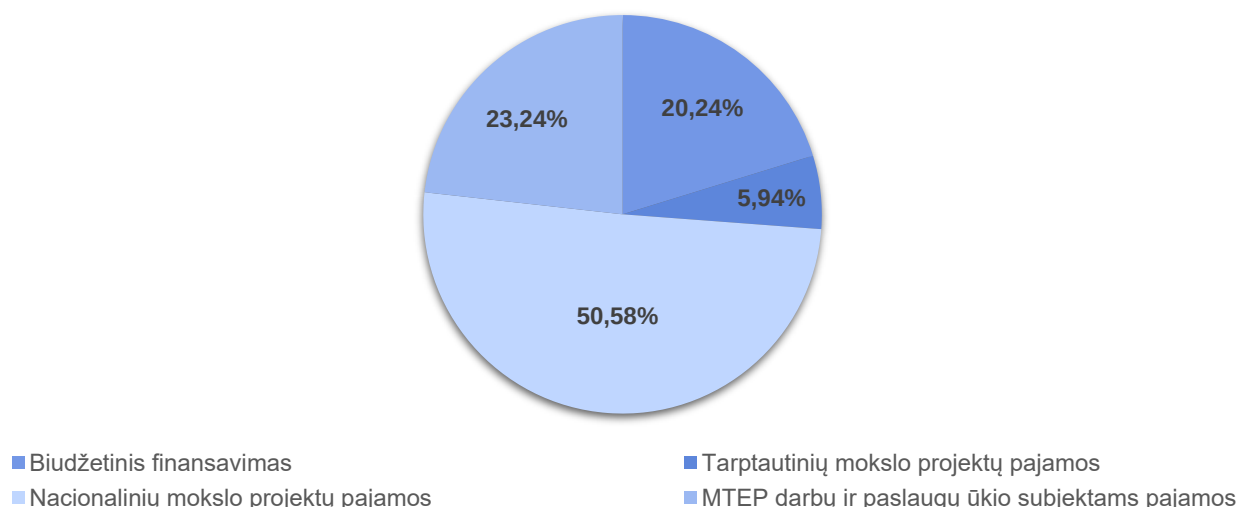
C01 Chemija, E03 Aplinkos inžinerija, E11 Chemijos inžinerija, F05 Biotechnologijos, F06 Maisto technologijos

2020 m. faktai ir skaičiai

Straipsnių užsienio leidyklų mokslo leidiniuose su cituojamumo rodikliu skaičius	155*
Straipsnių mokslo žurnaluose, turinčiuose ne žemesnį nei antrojo kvartilio (Q2) cituojamumo rodiklį, skaičius	141*
Straipsnių atviros prieigos mokslo žurnaluose su cituojamumo rodikliu skaičius	64*
Tarptautinių mokslo projektų skaičius	25
Nacionalinių mokslo projektų skaičius	39
Patentų ir patentinių paraiškų (Europos, JAV, Japonijos) skaičiai	5
III pakopos studentų skaičius	71
III pakopos užsienio studentų skaičius	17
Apgintų daktaro disertacijų skaičius	8

* 2020 m. duomenys atnaujinti 2021-10-01

Mokslinių tyrimų finansavimas



Svarbiausi mokslo ir inovacijų pasiekimai

Dr. K. Baltakys išrinktas Lietuvos chemijos pramonės įmonių asociacijos prezidentu.

Dr. D. Leskauskaitėi skirta Universiteto inovatoriškiausios mokslininkės premija, o dr. O. Bezvikonny, dr. M. Syrpas ir dr. M. Pukalskienei skiros Universiteto aktyviausių jaunųjų mokslininkų konkurso premijos gamtos ir technologijos mokslų srityse.

Kazickų šeimos fondo premijos skirtos dr. T. Malinauskui ir dr. G. Kručaitėi – jauniems Universiteto dėstytojams, atliekantiems aukštųjų technologijų mokslinius tyrimus arba rengiantiems naujus šios srities vadovėlius ar monografijas.

Dr. T. Braukyla su disertacija „Triogerio bazės fragmentą turinčių funkcinių molekulių optoelektronikai sintezė ir tyrimas“ (vadovas dr. V. Getautis) tapo 2020 m. Lietuvos jaunųjų mokslininkų sąjungos rengto konkurso „Geriausios 2019 m. disertacijos“ laureatu.

D. Blaževičius su magistro darbu „Naujos struktūros elektroaktyvios medžiagos organiniams šviestukams“ (vadovas dr. S. Grigalevičius) tapo 2020 m. Lietuvos jaunųjų mokslininkų sąjungos rengto konkurso „Geriausi 2019 m. magistro darbai“ laureatu technologijos mokslų srityje.

Dr. T. Dambrauskui skirta Lietuvos mokslų akademijos jaunųjų mokslininkų stipendija.

Lietuvos mokslų akademijos Jaunųjų mokslininkų ir doktorantų mokslinių darbų konkurso premijos skirtos:

- dr. D. Tavgenienei už mokslo darbą „Naujos struktūros elektroaktyvių medžiagų, skirtų organiniams šviestukams, sintezė ir panaudojimas“;
- dr. T. Dambrauskui už mokslo darbą „Nano matmenų kalcio silikatų ($\text{CaO/SiO}_2=1,5-2,0$) sintezė ir funkcinės savybės“.

Lietuvos mokslų akademijos Aukštųjų mokyklų studentų mokslinių darbų konkurso premijos skirtos:

- magistrantui D. Blaževičiui už mokslo darbą „Naujos sandaros organiniai puslaidininkiai efektyviems organiniams šviesos diodams“ (vadovas dr. S. Grigalevičius);
- magistrei I. Knabikaitei už mokslo darbą „Metalų priedų (Cr^{3+} ir Al^{3+}) ir temperatūros įtaka kalcio hidrosilikatų kristalizacijos procesams $\text{CaOSiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ sistemoje, produktų terminėms ir sorbcinėms savybėms“ (vadovas dr. A. Eisinas);
- magistrui K. Leitonui už mokslo darbą „Baltai šviečiančių, hibridinių organinių šviesos diodų formuojamų tirpalų liejimo būdu tobulinimas, panaudojant naujus iridžio (III) kompleksus“ (vadovas dr. D. Volyniuk);
- magistrei D. Rubinaitei už mokslo darbą „Belitiniojelimitinio-feritinio cemento gamyba ir savybių tyrimas“ (vadovas dr. T. Dambrauskas).

Dr. A. Magomedov 12-ojoje tarptautinėje konferencijoje „HOPV20“ (Londonas, Jungtinė Karalystė) hibridinių ir organinių saulės elementų tematika atiteko geriausio e. standinio pranešimo „Perovskitų fundamentinės savybės“ įvertinimas.

Dokt. K. Almonaitytė LMA 13-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Bioateitis: gamtos ir gyvybės mokslų perspektyvos“ apdovanota kaip geriausio pranešimo trečiosios vietos autorė už pranešimą „Modifikuotų (3-chlor-2-hidroksipropil) trimetilamonio chloridu krakmolo darinių naudojimas vandenvalyje“ (biochemijos ir biotechnologijos sekcija).

Dokt. Š. Daškevičiūtė LMA 10-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ pripažinta geriausio pranešimo autore už pranešimą „Naujų zondų sintezė ir jų pritaikymas merkaptaminorūgščių atpažinimui“ (fizinių mokslų sritis), jai skirta III laipsnio INFOBALT stipendija.

Dokt. A. Ilčiukaitė LMA 10-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ pripažinta geriausio pranešimo autore už pranešimą „Fluoreno klasės puslaidininkiai efektyviems hibridiniams Saulės elementams“ (fizinių mokslų sritis), jai skirta III laipsnio INFOBALT stipendija.

Dr. G. Kručaitė LMA 10-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ pripažinta geriausio pranešimo autore už pranešimą „Amorfiniai fluoreno junginiai skirti skyles pernešantiems sluoksniams tirpalų liejimo būdu suformuotiems organiniams šviesos diodams“ (technologijos mokslų sritis).

Mokslo infrastruktūra

2020 m. Maisto mokslo ir technologijos katedra įsigijo liofilizatorių Harvest Scientific, skirtą maisto ir kitų medžiagų džiovinimui šalčiu, išgarinant sušalusį vandenį iš produktų žemoje temperatūroje, ir žmogaus virškinamojo trakto sąlygų simuliacijai sistemą TwinSHIME, skirtą nustatyti maisto produktų sudėtinių dalių (baltymų, riebalų, skaidulinių medžiagų, vitaminų, mineralų) galimą pasisavinamumą vartotojo organizme. Įprastai tokie tyrimai atliekami su gyvūnais ir susiduriama su bioetikos, gyvūnų teisių bei kitomis problemomis. Įsigyta įranga leidžia imituoti žmogaus virškinamajame trakte esančias sąlygas ir gana tiksliai įvertinti maisto produktų bei papildų galimą naudą vartotojų sveikatai.

Padalinio atviros prieigos mokslinių tyrimų infrastruktūra ir teikiamos paslaugos – <https://apcis.ktu.edu/CTF/lt>.

Bendradarbiavimas

2020 metais pasirašytos bendradarbiavimo sutartys:

UAB „Allive Europe“, UAB „Agroconsult LT“, AB „Silikatas“, UAB „Omnicom Media Group“, UAB „Cosmoway“, UAB „Liningas“, UAB „BIOK laboratorija“, UAB „Koslita“, UAB „Festo“, UAB „Mars Lietuva“.

2020 metais pasirašyta paramos sutartis su AB „Volfas Engelman“.

Bendradarbiavimas su Lietuvos įmonėmis:

AB „Achema“, AB „Akmenės cementas“, AB „Grigeo“, AB „Lifosa“, AB „MV GROUP Production“, AB „ORLEN Lietuva“, AB „Palemono keramika“, AB „Panevėžio stiklas“, AB „Pieno žvaigždės“, AB „Pieno žvaigždės – Pasvalio sūrinė“, AB „Roquette Amilina“, AB „Silikatas“, AB „Vilniaus Pergalė“, AB „Fasa“, UAB „Viada LT“, AB „Vilniaus degtinė“, AB „Volfas Engelman“, MB „Driu Beauty“, MB „Labsamera“, Lietuvos maisto eksportuotojų asociacija (LitMEA), UAB „3D Creative“, UAB „Aconitum“, UAB „Acorus Calamus“, UAB „Aurora Hemp Europe“, UAB „Alytaus regiono atliekų tvarkymo centras“, UAB „Antrocelas“, UAB „Arionex LT“, UAB „Ardeola“, UAB „Arvi ir Ko“, UAB „Atgair“, UAB „Baltic Nano Technologies“, UAB „Baltasis pyragas“, UAB „Biomapas“, UAB „Biovela-Utenos mėsa“, UAB „Borela“, UAB „BS Chemical“, UAB „Choco group“, UAB „Contract Pharma Solutions“, UAB „Cosmoway“, UAB „Endobiotech“, UAB „Eneka“, UAB „Energijs sistemų servisas“, UAB „Enerstena“, UAB „Eternit Baltic“, UAB „Geld Baltic“, UAB „Biosydd“, UAB „Intergela“, UAB „Kauno stiklas“, UAB „Kėdainių konservų fabrikas“, UAB „Koncernas Vikonda“, UAB „Konvainiai“, UAB „Kurana“, UAB „Linoteks“, UAB „LS Consult“, UAB „Mantinga“, UAB „Maxima LT“, UAB „Marijampolės pieno konservai“, UAB „Nivela“, UAB „Novitera“, UAB „ODA LT“, UAB „Oqema“, UAB „Paroc“, UAB „ProBioSanus“, UAB „Samsonas“, UAB „Santonika“, UAB „Stega“, UAB „Traidenis“, UAB „Loco Packaging“, UAB „Agrofertis“, UAB „Fazer Lietuva“, UAB „KB Components“, UAB „KG Group LT“, UAB „Mars Lietuva“, UAB „Mondelez Lietuva Production“, UAB „Naujasis Nevėžis“, UAB „Teva Baltics“, UAB „Tiksloji sintezė“, UAB „Tordena“, UAB „Vičiūnų grupė“, UAB „Ustukių malūnas“, Volatile Innovation (UAB „Pažangiosios technologijos“), VŠĮ „Kauno regiono atliekų tvarkymo centras“, VŠĮ „Energetikų mokymo centras“.

Bendradarbiavimas su tarptautinėmis įmonėmis:

- BASF SE, Vokietija;
- Vipergen ApS, Danija;
- Brenntag AG, Vokietija;
- Estrotech Ltd, Estija;
- Hollister Inc, JAV / Lietuva;
- Innovatsiooniklaster MikrobioTaLo MTÜ, Estija;
- Intelligentsia Consultants Sàrl, Liuksemburgas;
- Klasteris BalticNet PlasmaTec, Vokietija;
- Novaled AG, Vokietija;
- Oxford PVTM, Jungtinė Karalystė;
- Simulators for Teaching Ltd, Jungtinė Karalystė;
- Suelzle-Klein GmbH, Vokietija;
- Sustainable Innovation Ltd, Švedija;
- TrinamiX GmbH, Vokietija;
- Euroquality, Prancūzija;
- ETEX Group, Danija.

Bendradarbiavimas su mokslo ir studijų institucijomis:

- Akaki Tsereteli valstybinis universitetas, Sakartvelas;
- Bairoito universitetas, Vokietija;
- Baltarusijos valstybinis technologijos universitetas, Baltarusija;
- Baltarusijos valstybinis universitetas, Baltarusija;
- Bari Aldo Moro universitetas, Italija;
- Belgrado universitetas, Serbija;
- Ben Guriono universitetas Negeve, Izraelis;
- Bordo universitetas, Prancūzija;
- Brno technologijos universitetas, Čekija;
- Centria taikomųjų mokslų universitetas, Suomija;
- Ciuricho taikomųjų mokslų universitetas, Šveicarija;
- Čenstakavos (*Czestochowa*) technologijos universitetas, Lenkija;
- Drezdeno technikos universitetas, Vokietija;
- Duramo (*Durham*) universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Estijos gyvybės mokslų universitetas, Estija;
- Europos darnių vandens technologijos ekselencijos centras WETSUS, Nyderlandai;
- Fraunhoferio institutas IME, Vokietija;
- Gamtos išteklių ir taikomųjų gamtos mokslų universitetas (BOKU), Austrija;
- Glazgo universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Guangdžou (*Guangzhou*) universitetas, Kinija;
- Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Radiofarmacinių vėžio mokslinių tyrimų institutas, Vokietija;
- Helsinkio universitetas, Suomija;
- Huaqiao universitetas, Kinija;
- Italijos technologijos institutas, Italija;
- Yuan Ze universitetas, Taivanas;
- Izmiro technologijos institutas, Turkija;
- Johannes Gutenberg universitetas Mainz (*Mainz*), Vokietija;
- Jorko Universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Kaizerslauterno technikos universitetas, Vokietija;
- Katovicų (*Katowice*) Silezijos universitetas, Lenkija;
- Kijevo nacionalinis Taraso Ševčenkos universitetas, Ukraina;
- Kijevo nacionalinis technologijos ir dizaino universitetas, Ukraina;
- Kiūšiū (*Kyushu*) universitetas, Japonija;
- Kopenhagos universitetas, Danija;
- Košicės technikos universitetas, Slovakija;
- Krajovos (*Craiova*) universitetas, Rumunija;
- Kornelio universiteto Weilio Kornelio medicinos mokykla, JAV;
- Latvijos organinės sintezės institutas, Latvija;
- Latvijos universitetas, Latvija;

- Lehigh universitetas, JAV;
- Lilio universitetas, Prancūzija;
- Liuvono katalikiškas universitetas, Belgija;
- Lozanos federalinis politechnikos institutas (*Ecole Polytechnique Federale de Lausanne*), Šveicarija;
- Lodzės technologijos universitetas, Lenkija;
- Lvovo nacionalinis Ivano Franko universitetas, Ukraina;
- Maisto saugos, gyvūnų sveikatos ir aplinkosaugos institutas (BIOR), Latvija;
- Malajos universitetas, Malaizija;
- Milano universitetas, Italija;
- Miuncheno technikos universitetas, Vokietija;
- Nacionalinis Lvovo politechnikos universitetas, Ukraina;
- Nacionalinis Suomijos sveikatos ir gerovės institutas, Suomija;
- Nacionalinis Taivano normalusis universitetas (*National Taiwan Normal University*), Taivanas;
- Nacionalinis Taivano universitetas, Taivanas;
- Nacionalinis Tsing Hua universitetas, Taivanas;
- Oksfordo universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Orhuso (*Aarhus*) universitetas, Danija;
- Palackio universitetas (Cheminės biologijos ir genetikos padalinys, Hana regiono tyrimų centras), Čekija;
- Poznanės Adomo Mickevičiaus universitetas, Lenkija;
- Rygos technikos universitetas, Latvija;
- Silezijos (*Silesian*) technologijos universitetas, Lenkija;
- Skolkovo technologijos mokslų institutas, Rusija;
- Slovakijos technologijos universitetas, Slovakija;
- Stratklaido (*Strathclyde*) universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Šv. Endriu universitetas, Jungtinė Karalystė;
- Šveicarijos federalinis technologijos institutas Ciuriche (*ETH Zurich*), Šveicarija;
- Tamperės universitetas, Suomija;
- Tartu universitetas, Estija;
- Tulūzos universitetas, Prancūzija;
- Tungai (*Tunghai*) universitetas, Taivanas;
- Tūro (*Tours*) universitetas, Prancūzija;
- Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lietuva;
- Vazos taikomųjų mokslų universitetas, Suomija;
- VIA universiteto kolegija, Danija;
- Vienos universitetas, Austrija;
- Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centras, Lietuva;
- Viseu politechnikos institutas, Portugalija.

Padalinio rengti mokslo renginiai:

- Virtuali apskrito stalo diskusija „Circular Economy teaching around Iceland, Finland, Estonia, Latvia and Lithuania“, 2020 m. rugsėjo 22-23 d., moderatorė dr. I. Stasiulaitienė.
- LR Aplinkos ministerijos organizuotas Klimato savaitės virtualus renginys – diskusija „Anglies dioksido konversijos į pridėtinės vertės produktus ar medžiagas technologijų pasaulyje ir Lietuvoje apžvalga“, 2020 m. spalio 19 d., moderatorė dr. V. Kaunelienė.

MOKSLINIŲ TYRIMŲ TEMATIKOS

1. Alternatyvių rišamųjų medžiagų ir geopolimerinių kompozitų technologiniai tyrimai

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas dr. R. Šiaučiūnas

Tyrėjai: dr. K. Baltakys, dr. I. Barauskas, dr. A. Eisinas, dr. A. Grinevičienė, dr. R. Kaminskas, dr. N. Kybartienė, dr. R. Kubiliūtė, dr. E. Prichockienė, dr. G. Vaickelionis, dr. V. Valančienė, dr. Z. Valančius

Podoktorantūros stažuotojas dr. T. Dambras

Doktorantai: E. Augustinienė, A. Gineika, I. Knabikaitė, D. Niūniavaitė, D. Rubinaitė, K. Ruginytė, G. Šarapajevaitė, D. Monstvilaitė, G. Smalakys

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: modernūs hidroterminės, mikrobangų ir kietafazio sukepimo procesai, kurie apima silikatinių ir giminingų medžiagų sintezės ypatumus, jų savybių bei struktūros tyrimus ir panaudojimą mažai energijai imlių cementų ir kitų produktų aplinkai draugiškos gamybos technologijose. Įvairių technogeninių ir gamtinių priedų, galinčių pakeisti įprastinio portlandcemenčio klinkerį, tyrimai ir taikymas technologijose. Technogeninių išteklių panaudojimas ir alternatyvių rišamųjų medžiagų kūrimas, tyrimas ir taikymas technologijose.

Daug dėmesio buvo skirta rišamųjų medžiagų, kurios, lyginant su portlandcemenčiu, turi žymiai mažesnę neigiamą poveikį aplinkai, kūrimui. Ištirta galimybė pagaminti CO₂ aplinkoje kietėjantį betoną, kuriame rišiklis būtų kalcio hidrosilikatai (α-C₂SH ir kilchoanitas), o ne bevandeniai silikatai. Pasiūlyta technologija yra aplinkai draugiška ir leidžia kompleksškai spręsti keletą problemų: 1) atsisakoma degimo aukštoje temperatūroje operacijos, todėl gerokai sumažėja energijos sąnaudos; 2) žaliavų mišinyje, lyginant su portlandcemenčio klinkerio sinteze, yra 1,5–1,8 karto mažiau CaO, todėl sumažėja CO₂ emisija į aplinką; 3) gaminams kietėjant CO₂ aplinkoje, šios šiltnamio efektą sukeliančios dujos sujungiamos į inertišką CaCO₃. 200 °C temperatūroje per 8–16 val. iš kalkių-opokos/trepelio mišinio su CaO/SiO₂ = 1,5–2,0 susintetinti α-C₂SH arba kilchoanitas. Presuoti bandiniai iš gauto rišiklio ir jo mišinių su smėliu buvo karbonizuoti CO₂ aplinkoje esant 1,5 MPa ir 45 °C temperatūrai nuo 8 iki 48 val. Pirmą kartą buvo įrodyta, kad minėti kalcio hidrosilikatai yra CO₂ atmosferoje kietėjančios rišamosios medžiagos. Jų stipris gniuždant po 24 ir 48 val. apdorojimo pasiekia ~35 MPa ir ~60 MPa, atitinkamai. SEM ir ²⁹Si BMR tyrimai parodė, kad stiprumas labiau priklauso nuo kalcito kristalų augimo, nei SiO₂ gelio polimerizacijos. Iš rišiklio / smėlio mišinio (masės santykis 1:3), galima gaminti betonų, kurių stipris gniuždant yra ~25 MPa.

Didelės apimties tyrimai buvo atlikti tiriant sintetinių hidrosilikatų ir giminingų medžiagų panaudojimą adsorbcijos procesuose. Ištirta, kad sunkiųjų metalų stabilizavimas majenito struktūroje priklauso nuo pastarojo junginio gamybos – sintezės ir terminio apdorojimo parametrų. Gauti rezultatai parodė, kad didžiausia adsorbcinė geba vario jonams pasižymi majenitas, susintetintas 950 °C temperatūroje: jau po 3 min. adsorbcijos proceso daugiau kaip 94 % vario jonų buvo įsiterpę į majenito struktūrą, t. y. ~ 47 mg Cu²⁺/g. Pažymėtina, kad šiomis eksperimentinėmis sąlygomis ne tik kationai bet ir anijonai terpiasi į šio junginio struktūrą, t. y. po 60 min. įsiterpia visi skystoje terpėje esantys SO₄²⁻ anijonai. Nustatyta, kad proceso metu pakinta adsorbento mineralinė sudėtis, nes produktuose identifikuojami: kalcioaliuminio karbonato hidroksido hidratas, kalcitas bei hidrotalcito grupės junginiai.

Tiriant netradicinių žaliavų įtaką keraminio kūno mineralinei sudėčiai ir savybėms nustatyta, kad grikių lukštų bei jų pelenų priedas (5%) pagerina keraminės šukės iš lengvai lydus molio stiprumą, nes skatina anortito ir leucito susidarymą. Gaminant porėtus keraminius gaminius, jais galima pakeisti pjuvenas, nes technologiniai parametrai nekinta, degtų keraminių bandinių tankis yra didesnis, o stiprio gniuždant vertės yra artimos arba netgi geresnės už analogiškų, bet be priedų produktų. Grikių lukštų pelenai padidina akyto keraminės šukės stiprumą, tačiau kartu padidėja ir jos vandens absorbcija. Dėl šios priežasties jie gali būti naudojami gaminant neagresyvioje aplinkoje eksploatuojamą keramiką.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- Švedijos instituto finansuojamas projektas 01087/2020 „Win-win sprendimas Baltijos jūros regiono ežerų atkūrimui (WIN4LAKE)“, 2020–2021, dr. R. Šiaučiūnas.

Nacionaliniai

- LMT mokslininkų grupių projektas „Aplinką tausojantis Ca/Si kompozicinių medžiagų gavimo būdas (AKASIM)“, 2017–2020, dr. R. Šiaučiūnas.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-CPVA-K-703 „Kompetencijos centrų ir inovacijų ir technologijų perdavimo centrų veiklos skatinimas“ projektas „Chemijos inžinerijos ir bioprosesų kompetencijos centras (CIBKC)“, 2020–2023, dr. R. Šiaučiūnas.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Nano matmenų kalcio silikatų ($\text{CaO/SiO}_2=1,5-2,0$) sintezė ir funkcinės savybės“, 2020–2022, dr. K. Baltakys.

Instituciniai

- KTU Mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Kalcio silikatų su įsiterpusiais metalų jonais sintezė ir taikymas alternatyvių cementų gamyboje (METSIL)“, 2020, dr. T. Dambrauskas.

Užsakomieji MTEP darbai

- AB „Roquette Amilina“, MTEP darbas SV9-2812 „Metodo skirto apnašų cheminės sudėties nustatymui kūrimas“, 2020, dr. A. Eisinai.
- Vapo Oy, MTEP darbas SV9-3696 „Durpių ekstrakcijos pilotinėje gamyboje savybių tyrimas“, 2020–2021, dr. I. Barauskas.
- AB „Lifosa“, MTEP darbas SV9-3166 „Unikalios metodikos kūrimas ir taikymas cinko jonų apskaičiavimui kompleksinėse NPS trąšose“, 2020–2021, dr. K. Baltakys.

Apžintos disertacijos

- V. Rudelis, „Silikagelio su įsiterpusiais aliuminio ir fluoro jonais inovatyvios perdirbimo technologijos“, 2020-06-19, vadovas dr. K. Baltakys.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Barčauskaitė, Karolina; Brazienė, Zita; Avižienytė, Dovilė; Silva, Manoj; Drapanauskaite, Donata; Honer, Kenneth; Gvildienė, Karolina; Slinksienė, Rasa; Jancaitienė, Kristina; Mazeika, Romas; Staugaitis, Gediminas; Dambrauskas, Tadas; Baltakys, Kestutis; Baltrusaitis, Jonas. Mechanochemically synthesized gypsum and gypsum drywall waste cocrystals with urea for enhanced environmental sustainability fertilizers // Journal of environmental chemical engineering. Oxford: Elsevier. ISSN 2213-2929. eISSN 2213-3437. 2020, vol. 8, iss. 4, art. no. 103965, p. 1-12. DOI: 10.1016/j.jece.2020.103965. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,300; AIF: 5,707; IF/AIF: 0,753; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,70; SNIP: 1,259; SJR: 0,927; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,284]
- [S1; GB] Siauciunas, Raimundas; Hilbig, Harald; Prichockiene, Edita; Smigelskyte, Agne; Takulinskas, Zilvinas. Accelerated carbonation of C2SH based dense concrete // Ceramics international. Oxford: Elsevier. ISSN 0272-8842. 2020, vol. 46, iss. 18, pt. B, p. 29436-29442. DOI: 10.1016/j.ceramint.2020.05.027. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,830; AIF: 3,004; IF/AIF: 1,274; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,10; SNIP: 1,310; SJR: 0,891; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,800]
- [S1; GB] Eisinai, A.; Ruginyte, K.; Baltakys, K.; Demcak, S.; Dambrauskas, T.; Balintova, M.; Stevulova, N. Cu²⁺ ion adsorption by synthetic mayenite and its thermal stability // Ceramics international. Oxford: Elsevier. ISSN 0272-8842. eISSN 1873-3956. 2020, vol. 46, iss. 18, pt. B, p. 29429-29435. DOI: 10.1016/j.ceramint.2020.05.028. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,830; AIF: 3,004; IF/AIF: 1,274; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,10; SNIP: 1,310; SJR: 0,891; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,574]
- [S1; NL] Smalakys, G.; Siauciunas, R. Peculiarities of xonotlite synthesis from the raw materials with different SiO₂ activities // Journal of thermal analysis and calorimetry. Dordrecht: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2020, vol. 142, p. 1671-1679. DOI: 10.1007/s10973-020-09744-2. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,731; AIF: 4,796; IF/AIF: 0,569; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,30; SNIP: 1,078; SJR: 0,415; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

- [S1; GB] Kaminskas, Rimvydas; Kubiliute, Raimonda; Prialgauskaitė, Brigita. Smectite clay waste as an additive for Portland cement // *Cement and concrete composites*. Oxford: Elsevier. ISSN 0958-9465. eISSN 1873-393X. 2020, vol. 113, art. no. 103710, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.cemconcomp.2020.103710. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 6,257; AIF: 3,968; IF/AIF: 1,576; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 9,30; SNIP: 2,444; SJR: 2,675; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; US] Kaminskas, Rimvydas; Cesnauskas, Vytautas; Barauskas, Irmantas. Influence of biomass fly ash on sulfate attack of cement stone // *Journal of materials in civil engineering*. Reston, VA: American Society of Civil Engineers. ISSN 0899-1561. eISSN 1943-5533. 2020, vol. 32, iss. 9, art. no. 04020246, p. 1-6. DOI: 10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0003324. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,169; AIF: 3,876; IF/AIF: 0,559; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,329; SJR: 1,035; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; CH; OA] Niuniavaite, Domante; Baltakys, Kestutis; Dambrauskas, Tadas; Eisinas, Anatolijus; Rubinaite, Dovile; Jaskunas, Andrius. Microstructure, thermal stability, and catalytic activity of compounds formed in CaO-SiO₂-Cr(NO₃)₃-H₂O system // *Nanomaterials*. Basel: MDPI. ISSN 2079-4991. 2020, vol. 10, iss. 7, art. no. 1299, p. 1-16. DOI: 10.3390/nano10071299. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 4,324; AIF: 6,263; IF/AIF: 0,690; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,089; SJR: 0,858; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; GB; OA] Dambrauskas, Tadas; Knabikaitė, Inga; Eisinas, Anatolijus; Baltakys, Kestutis; Paloub, Martin T. Influence of Cr³⁺, Co²⁺ and Cu²⁺ on the formation of calcium silicates hydrates under hydrothermal conditions at 200 °C // *Journal of Asian Ceramic Societies*. Abingdon: Taylor & Francis. ISSN 2187-0764. 2020, vol. 8, iss. 3, p. 753-763. DOI: 10.1080/21870764.2020.1789287. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,653; AIF: 3,004; IF/AIF: 0,883; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,90; SNIP: 1,499; SJR: 0,647; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,800]
- [S1; NL] Siauciunas, R.; Valanciene, V. Influence of buckwheat hulls on the mineral composition and strength development of easily fusible clay body // *Applied clay science*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0169-1317. eISSN 1872-9053. 2020, vol. 197, art. no. 105794, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.clay.2020.105794. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,605; AIF: 4,903; IF/AIF: 0,939; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 7,60; SNIP: 1,668; SJR: 1,069; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; GB; OA] Smigelskyte, Agne; Siauciunas, Raimundas; Hilbig, Harald; Decker, Marco; Urbonas, Liudvikas; Skripkiunas, Gintautas. Carbonated rankinite binder: effect of curing parameters on microstructure, strength development and durability performance // *Scientific reports*. London: Springer Nature. ISSN 2045-2322. 2020, vol. 10, iss. 1, art. no. 14462, p. 1-13. DOI: 10.1038/s41598-020-71270-w. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 3,998; AIF: 5,327; IF/AIF: 0,750; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 7,20; SNIP: 1,365; SJR: 1,341; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 008, T 005] [Indėlis: 0,336]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. K. Baltakys – Lietuvos pramonininkų konfederacijos (LPK) Chemijos pramonės įmonių asociacijos prezidentas, SKVC inžinerijos mokslų studijų grupės krypčių darbo grupės vadovas, Mokslo projektų paramos agentūros prie Slovakijos Respublikos švietimo, mokslo, tyrimų ir sporto ministerijos ir Slovakijos mokslų akademijos projektų ekspertas, LMT, LVPA ekspertas.
- Dr. R. Šiaučiūnas – Lietuvos mokslų akademijos (LMA) tikrasis narys ir Prezidiumo narys, Lietuvos aukštojo mokslo tarybos narys, LMA mokslinių tyrimų ir tarptautinio bendradarbiavimo labdaros ir paramos fondo valdybos narys, Lietuvos mokslų akademijos stipendijų ir premijų komisijų narys ekspertas, LMT ekspertas.
- Dr. T. Dambrauskas – Lietuvos jaunųjų mokslininkų sąjungos Valdybos narys, Čekijos mokslo fondo Technikos mokslų komiteto ekspertas.
- Dr. R. Kaminskas – Čekijos mokslo fondo Technikos mokslų komiteto ekspertas.
- Dr. A. Eisinas – MITA, LVPA ekspertas.
- Dr. I. Barauskas – Lietuvos standartizacijos departamento TK 25 „Rišamosios medžiagos, gipsas ir gipso gaminiai“ narys.
- Dr. E. Prichockienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 23 „Keraminės plytelės, mūras ir gamtinis akmuo“ narė.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. R. Šiaučiūnas – žurnalų „Journal of Civil Engineering and Management“, „Journal of Sustainable Architecture and Civil Engineering“, „Selected Scientific Papers – Journal of Civil Engineering“ (Slovakija) redakcinių kolegijų

narys. „6th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC6)“ konferencijos Garbės komiteto narys.

- Dr. K. Baltakys – žurnalų „International Journal of Environmental Monitoring and Analysis“ (JAV), „International Journal of Materials Science and Applications“ (JAV), „American Journal of Chemical Engineering“ (JAV), „Journal of Civil Engineering and Management“, „Sustainable Building Materials and Technologies“ redakcinių kolegijų narys, „6th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC6)“ konferencijos tarptautinio organizacinio komiteto narys.
- Dr. T. Dambrauskas – „6th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC6)“ konferencijos mokslinio komiteto narys.

2. Bioaktyvių junginių sintezė ir išskyrimas iš atsinaujinančių žaliavų

Mokslo kryptys

N 003 Chemija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas habil. dr. V. Mickevičius

Tyrėjai: dr. K. Anusevičius, dr. I. Jonuškienė, dr. L. Miknius, dr. K. Radzevičius, dr. B. Sapijanskaitė-Banevič, dr. I. Tumosienė, dr. R. Vaickelionienė

Doktorantai: B. Balandis, A. Peleckis, I. Vaškevičienė, B. Grybaitė, L. Jasiūnas

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Augalų augimo reguliatorių ir antimikrobinių junginių sintezė ir tyrimai. Naftos produktų technologijos bei žaliavos tyrimai. Alternatyvių kuro rūšių iš regeneruojamų organinių plastikų technologijų kūrimas. Bioaktyvių medžiagų iš biomasės išskyrimo technologiniai tyrimai. Biokuro technologijų tyrimai.

Toliau buvo atliekami azoto ir sieros turinčių penkianarių ir šešianarių heterociklinių junginių, savo struktūroje turinčių sulfanilamidinį pakaitą, sintezės darbai. Nustatyta, kad dalis susintetintų junginių pasižymi antimikrobinėmis, antioksidacinėmis savybėmis, taip pat pasižymi karboanhidrazijų slopinamuoju poveikiu. Atlikti antioksidaciniai, antibakteriniai, antrinių metabolitų, antioksidacinių fermentų tyrimai su vaistinių, kryžmažiedžių augalų kaliaus kultūromis *in vitro*. Tirtos naujų biologiškai aktyvių junginių antioksidacinės, antibakterinės ir augalų augimą reguliuojančios savybės. Biotechnologiniais metodais optimizuota ksantano iš *Xanthomonas campestris*, alginato iš *Azotobacter vinelandii*, citrinų rūgšties iš *Aspergillus niger* gamyba. Buvo vykdyti vandenvalos dumblo suskystinimo bandymai (bio-poliuretano putos ir adhezivai): atlikti eksperimentai su žaliavos dalelių dydžio (<0,2; 0,2-0,5 ir 0,5-1 mm) bei drėgmės kiekio (20, 50 ir ~100% SM) kintamaisiais; įvykdyti pakartotiniai eksperimentai ir biopoliolių charakterizacija. Cukrinių rūkelių išspaudų suskystinimas (bio-poliuretano putos ir adhezivai): atlikti eksperimentai su žaliavos dalelių dydžio (<0,2; 0,2-0,5 ir 0,5-1 mm) bei drėgmės kiekio (20, 50 ir ~100% SM) kintamaisiais; įvykdyti pakartotiniai eksperimentai ir biopoliolių charakterizacija. Kanapių stiebų suskystinimas (bio-poliuretano putos ir adhezivai): atlikti eksperimentai su žaliavos dalelių dydžio (<0,2; 0,2-0,5 ir 0,5-1 mm) bei drėgmės kiekio (20, 50 ir ~100% SM) kintamaisiais; vykdyti pakartotiniai eksperimentai ir biopoliolių charakterizacija. Produktų analizė, testavimas (bio-poliuretano putos): vykdytos produktų savybių analizės (tankis, stipris gniuždant, bioskaidumas), taip pat įvertinti ir produktai, gaminami iš filtruotų bei optimaliomis sąlygomis pagamintų biopoliolių. Produktų analizė, testavimas (bio-poliuretano adhezivai): vykdytos produktų savybių analizės (stipris tempiant, bioskaidumas), taip pat įvertinti ir produktai, gaminami iš filtruotų bei optimaliomis sąlygomis pagamintų biopoliolių.

Reikšmingiausios publikacijos

- Zervas, Athanasios; Aggerbeck, Marie Rønne; Allaga, Henrietta; Güzel, Mustafa; Hendriks, Marc; Jonuškienė, Ilona; Kedves, Orsolya; Kupeli, Ayse; Lamovšek, Janja; Mülner, Pascal; Munday, Denise; Namli, Şahin; Samut, Hilal; Tomičić, Ružica; Tomičić, Zorica; Yeni, Filiz; Zghal, Raida Zribi; Zhao, Xingchen; Sanchis-Borja, Vincent; Hendriksen, Niels Bohse. Identification and characterization of 33 *Bacillus cereus sensu lato* isolates from agricultural fields from eleven widely distributed countries by whole genome sequencing // Microorganisms. Basel: MDPI. ISSN 2076-2607. 2020, vol. 8, iss. 12, art. no. 2028, p. 1-17. DOI: 10.3390/microorganisms8122028.

- [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,128; AIF: 5,079; IF/AIF: 0,812; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,050]
- Kavaliauskas, Povilas; Grybaite, Birutė; Mickevicius, Vytautas; Petraitienė, Ruta; Grigaleviciute, Ramune; Planciuniene, Rita; Gialanella, Philip; Pockevicius, Alius; Petraitis, Vidmantas. Synthesis, ADMET properties, and in vitro antimicrobial and antibiofilm activity of 5-nitro-2-thiophenecarbaldehyde N-((E)-(5-nitrothienyl)methylidene)hydrazone (KTU-286) against *Staphylococcus aureus* with defined resistance mechanisms // *Antibiotics*. Basel: MDPI. ISSN 2079-6382. 2020, vol. 9, iss. 9, art. no. 612, p. 1-17. DOI: 10.3390/antibiotics9090612. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,639; AIF: 4,265; IF/AIF: 1,087; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 004, N 003] [Indėlis: 0,111]
 - Tumosienė, Ingrida; Kantminienė, Kristina; Klevinskas, Arnas; Petrikaitė, Vilma; Jonuškienė, Ilona; Mickevičius, Vytautas. Antioxidant and anticancer activity of novel derivatives of 3-[(4-methoxyphenyl)amino]propanehydrazide // *Molecules*. Basel: MDPI. ISSN 1420-3049. 2020, vol. 25, iss. 13, art. no. 2980, p. 1-20. DOI: 10.3390/molecules25132980. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 3,267; AIF: 5,427; IF/AIF: 0,601; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,150; SJR: 0,698; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: M 001, T 005, N 003] [Indėlis: 0,834]
 - Valanciene, Egle; Jonuskiene, Ilona; Syrpas, Michail; Augustiniene, Ernesta; Matulis, Paulius; Simonavicius, Andrius; Malys, Naglis. Advances and prospects of phenolic acids production, biorefinery and analysis // *Biomolecules*. Basel: MDPI. ISSN 2218-273X. 2020, vol. 10, iss. 6, art. no. 874, p. 1-41. DOI: 10.3390/biom10060874. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,082; AIF: 4,696; IF/AIF: 0,869; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 2,30; SNIP: 1,078; SJR: 1,614; Q3 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
 - Sapijanskaitė-Banevič, Birutė; Šovkovaja, Božena; Vaickelionienė, Rita; Šiugždaitė, Jūratė; Mickevičiūtė, Eglė. Synthesis, characterization and bioassay of novel substituted 1-(3-(1,3-thiazol-2-yl)phenyl)-5-oxopyrrolidines // *Molecules*. Basel: MDPI. ISSN 1420-3049. 2020, vol. 25, iss. 10, art. no. 2433, p. 1-19. DOI: 10.3390/molecules25102433. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 3,267; AIF: 5,427; IF/AIF: 0,601; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,150; SJR: 0,698; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: A 002, N 003] [Indėlis: 0,600]
 - Jasiūnas, Lukas; Peck, Gabrielle; Bridžiuvienė, Danguolė; Miknius, Linas. Mechanical, thermal properties and stability of high renewable content liquefied residual biomass derived bio-polyurethane wood adhesives // *International journal of adhesion and adhesives*. Oxford: Elsevier. ISSN 0143-7496. eISSN 1879-0127. 2020, vol. 101, art. no. 102618, p. 1-14. DOI: 10.1016/j.ijadhadh.2020.102618. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,671; AIF: 5,014; IF/AIF: 0,532; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,80; SNIP: 1,579; SJR: 0,894; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,500]
 - Jasiūnas, Lukas; McKenna, Sean T.; Bridžiuvienė, Danguolė; Miknius, Linas. Mechanical, thermal properties and stability of rigid polyurethane foams produced with crude-glycerol derived biomass biopolyols // *Journal of polymers and the environment*. New York: Springer. ISSN 1566-2543. eISSN 1572-8919. 2020, vol. 28, iss. 5, p. 1378-1389. DOI: 10.1007/s10924-020-01686-y. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,572; AIF: 5,206; IF/AIF: 0,494; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 2,90; SNIP: 0,871; SJR: 0,464; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,500]
 - Balandis, Benas; Ivanauskaitė, Guostė; Smirnovienė, Joana; Kantminienė, Kristina; Matulis, Daumantas; Mickevičius, Vytautas; Zubrienė, Asta. Synthesis and structure-affinity relationship of chlorinated pyrrolidinone-bearing benzenesulfonamides as human carbonic anhydrase inhibitors // *Bioorganic chemistry*. San Diego: Elsevier. ISSN 0045-2068. eISSN 1090-2120. 2020, vol. 97, art. no. 103658, p. 1-12. DOI: 10.1016/j.bioorg.2020.103658. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 4,831; AIF: 4,075; IF/AIF: 1,185; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,50; SNIP: 1,558; SJR: 0,819; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 010, N 004, N 003, T 005] [Indėlis: 0,432]
 - Jasiūnas, Lukas; Skvorčinskienė, Raminta; Miknius, Linas. Wet and coarse: the robustness of two-stage crude glycerol mediated solvothermal liquefaction of residual biomass // *Waste and biomass valorization*. Dordrecht: Springer. ISSN 1877-2641. eISSN 1877-265X. 2020, vol. 11, iss. 5, p. 2171-2181. DOI: 10.1007/s12649-018-0453-0. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,851; AIF: 4,313; IF/AIF: 0,661; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,60; SNIP: 1,035; SJR: 0,569; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005, T 006] [Indėlis: 0,667]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. L. Miknius – Lietuvos standartizacijos departamento TK 40 „Nafta ir naftos produktai“ narys.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. I. Jonuškienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos valdybos narė, Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narė.
- Dr. I. Tumosienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos narė.

3. Bioprocesai maisto sistemoje, bioproduktai ir bekontaktė kontrolė

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedančioji tyrėja habil. dr. G. Juodeikienė

Tyrėjai: dr. J. Damašius, dr. R. Degutytė, habil. dr. R. Gružas, dr. V. Gružas, dr. R. H. Kublickas, dr. A. Šarkinas, Ž. Valatkevičienė, dr. D. Žadeikė, dr. R. Žvirauskienė

Doktorantai: K. Trakšelytė-Rupšienė, A. Žiūkaitė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: biotechnologinių procesų efektyvumo didinimas. Naujų bioproduktų, ir biologiškai aktyvių komponentų kūrimas. Naujų bekontaktių metodų bioprocesų kontrolei vystymas.

Buvo atliekami gėrimų, kepinų ir pridėtinės vertės produktų pašarų gamybai tyrimai, naudojant pieno pramonės antrinius produktus, augalinių gėrimų gamybos metu susidarančias išspaudas (avižių, sojos, ryžių migdolų, kokoso) ir grūdinių bei ankštinių javų perdirbimo metu susidarančią biomasę. Parinktos antimikrobinėmis savybėmis pasižyminčios pieno rūgšties bakterijos gėrimų praturtinimui galaktooligosacharidais. Išspaudų bioskaidymui parinkti fermentiniai preparatai ir antimikrobiniai mikroorganizmai, leidžiantys padidinti baltyminių medžiagų išgavimo efektyvumą; įvertinta ultragarsinio apdorojimo (žemo ir didelio dažnio bei skirtingo intensyvumo) įtaka skaidulų smulkinimui ir funkcinių savybių gerinimui. Ekstruzijos technologija pritaikyta kviečių ir žirnių perdirbimo metu susidariusių lignoceliuliozinių biomasų perdirbimui į pridėtinės vertės produktus pašarų gamyboje. Vystytos antimikrobinėmis savybėmis pasižyminčių nutraceutikų kompozicijos, parenkant optimalias sąlygas mikroorganizmų dauginimuisi, biologiškai aktyvių medžiagų imobilizavimui ir jų tikslinei pernašai. Gelių struktūrizavimo proceso parametrijos optimizavimui ir priimtino vartotojui gerinimui, vystomas bekontaktis akustinis metodas. Sukurta depresinio sutrikimo (DS) ankstyvos kompiuterinės diagnostikos sistema pagal emocinį atsaką į skirtingo skonio maisto produktus, nustatytos ir matematinės statistikos metodais pagrįstos sąsajos tarp rezultatų, gautų diagnozuojant DS standartiniais metodais, vertinant DS sunkumo simptomus ir tiriant DS diagnostikos galimybes kompiuterizuotu metodu. Tirtos biotechnologinių priemonių, tokių kaip fermentacija pieno rūgšties bakterijomis ir fermentinė hidrolizė, panaudojimo galimybės modifikuotų bolivinės balandos ir kanapių, išrūgų baltymų produktų gamybai bei jų savybės. Vystyti fermentų imobilizavimo būdai įterpiant juos į polimerų struktūras, kovalentiškai prijungiant ant polimerinio nešiklio (alginato) ir sudarant skersiniais ryšiais susiūtus fermentų agregatus. Taip pat buvo atliekami tyrimai maisto biopakuočių vystymui, kuriant hidrofobinius celiuliozės biokompozitus ir vertinant jų savybes. Kurti inovatyvūs padidintos biologinės vertės produktai iš liofilizuotų gyvūninės kilmės žaliavų ir įvertintos jų savybės. Kuriami nauji produktai iš antrinio panaudojimo žaliavų ir jų gamybos technologijos padėtų mažinti žaliavų poreikį, leisti išgauti vertingus šalutinius produktus ir pagaminti aplinkai bei vartotojui palankius produktus, taip pat skatintų ekologinį ir ekonominį efektyvumą.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- ERA-NET SUSFOOD2 programos „Tvari maisto gamyba ir vartojimas“ projektas „Tradicinių daržovių išspaudų dezagregacija (suardymas) inovatyviomis priemonėmis naujų produktų gavimui ir išėgų didinimui (DISCOVERY)“, 2018–2021, habil. dr. G. Juodeikienė, dr. A. Šalaševičienė.

- COST veikla CA18101 „Raugų biotechnologijos tinklas naujiems, sveikesniems ir tvaresniems maisto produktams ir bioprocesams“, 2019–2023, habil. dr. G. Juodeikienė.
- Programos „Eureka“ projektas 13309 „Tvaresnių didesnės pridėtinės vertės antimikrobinėmis savybėmis pasižyminčių pašarų žaliavų (bio)technologijos prototipas (SUSFEETECH)“, 2020–2023, habil. dr. G. Juodeikienė.

Nacionaliniai

- LMT mokslininkų grupių projektas „Depresinio sutrikimo ankstyvos kompiuterinės diagnostikos metodo sukūrimas, vertinant emocinį atsaką į skirtingo skonio maisto savybes (EMOPSYCHOSCREEN)“, 2017–2020, habil. dr. G. Juodeikienė.
- Lietuvos kaimo plėtros 2014–2020 m. programos priemonės „Bendradarbiavimas“ veiklos „Parama EIP veiklos grupėms kurti ir jų veiklai vystyti“ projektas „Tvarių technologijų diegimas taikant šalutinių produktų biorafinavimo schemas skirtingų rūšių gyvūnų produktyvumo ir produkcijos kokybės užtikrinimas“, 2020–2022, habil. dr. G. Juodeikienė.

Užsakovieji MTEP darbai

- AB „MV GROUP Production, MTEP darbas SV9-2819 „Alkogelių, skirtų šviežių ir šaldytų ar džiovintų augalinių žaliavų padengimui, moksliniai tyrimai“, 2020, dr. J. Damašius.
- UAB „Geld Baltic“, MTEP darbas SV9-2927 „Inovatyvių maisto produktų su padidinta biologine verte kūrimas“, 2020, dr. J. Damašius.
- Nature Force Technologies AG, MTEP darbas SV9-3379 „Funkcinių ingredientų iš augalinių žaliavų, skirtų nealkoholiniams gėrimams, išskyrimas ir stabilizavimas“, 2020–2021, dr. J. Damašius.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; NL] Juodeikienė, Grazina; Zadeike, Daiva; Trakselyte-Rupsienė, Karolina; Gasauskaite, Kotryna; Bartkiene, Elena; Lele, Vita; Viskelis, Pranas; Bernatoniene, Jurga; Ivanauskas, Liudas; Jakstas, Valdas. Functionalisation of flaxseed proteins assisted by ultrasonication to produce coatings enriched with raspberries phytochemicals // LWT - Food science and technology. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0023-6438. eISSN 1096-1127. 2020, vol. 124, art. no. 109180, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109180. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,006; AIF: 3,279; IF/AIF: 1,221; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,40; SNIP: 1,642; SJR: 1,313; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: A 003, T 005] [Indėlis: 0,400]
- [S1; CH; OA] Juodeikienė, Grazina; Cernauskas, Darius; Trakselyte-Rupsienė, Karolina; Bartkiene, Elena; Zadeike, Daiva; Banyte, Greta; Santini, Antonello. Acoustic-based screening method for the detection of total aflatoxin in corn and biological detoxification in bioethanol production // Frontiers in microbiology. Lausanne: Frontiers Media SA. ISSN 1664-302X. 2020, vol. 11, art. no. 543, p. 1-8. DOI: 10.3389/fmicb.2020.00543. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,236; AIF: 4,230; IF/AIF: 1,001; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,40; SNIP: 1,351; SJR: 1,690; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: A 003, T 005] [Indėlis: 0,574]
- [S1; GB] Zadeike, Daiva; Vaitkeviciene, Ruta; Marksa, Mindaugas; Juodeikienė, Grazina; Bendoraitienė, Joana; Bartkiene, Elena; Lele, Vita; Viskelis, Pranas; Bernatoniene, Jurga; Jakstas, Valdas. Structural and functional characterisation of compositionally optimised rice bran and lingonberry dietary fibre-based gel-type product enriched with phytochemicals // International journal of food science and technology. Edinburg: John Wiley & Sons. ISSN 0950-5423. eISSN 1365-2621. 2020, vol. 55, iss. 11, p. 3372-3380. DOI: 10.1111/ijfs.14668. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,773; AIF: 3,279; IF/AIF: 0,845; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,054; SJR: 0,798; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: A 003, M 003, T 005] [Indėlis: 0,400]
- [S1; CH; OA] Ruzauskas, Modestas; Bartkiene, Elena; Stankevicius, Arunas; Bernatoniene, Jurga; Zadeike, Daiva; Lele, Vita; Starkute, Vytaute; Zavistanaviciute, Paulina; Grigas, Juozas; Zokaityte, Egle; Pautienius, Arnoldas; Juodeikienė, Grazina; Jakstas, Valdas. The influence of essential oils on gut microbial profiles in pigs // Animals. Basel: MDPI. ISSN 2076-2615. 2020, vol. 10, iss. 10, art. no. 1734, p. 1-18. DOI: 10.3390/ani10101734. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 2,323; AIF: 1,645; IF/AIF: 1,412; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 1,40; SNIP: 1,262; SJR: 0,601; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 004, A 003, T 005] [Indėlis: 0,152]
- [S1; CH; OA] Zokaityte, Egle; Cernauskas, Darius; Klupsaite, Dovile; Lele, Vita; Starkute, Vytaute; Zavistanaviciute, Paulina; Ruzauskas, Modestas; Gruzauskas, Romas; Juodeikienė, Grazina; Rocha, João Miguel; Bliznikas, Saulius; Viskelis, Pranas; Ruibys, Romas; Bartkiene, Elena. Bioconversion of milk permeate with selected lactic acid bacteria strains and apple by-products into beverages with antimicrobial properties and enriched with galactooligosaccharides // Microorganisms. Basel: MDPI AG. ISSN 2076-2607. 2020, vol. 8, iss. 8, art. no. 1182, p. 1-26. DOI: 10.3390/microorganisms8081182. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 4,152; AIF: 4,230; IF/AIF: 0,981; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005, A 003] [Indėlis: 0,142]

- [S1; NL] Ikkere, L.E.; Perkons, I.; Pugajeva, I.; Gruzauskas, R.; Bartkiene, E.; Bartkevics, Vadims. Direct injection Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometric method for high throughput quantification of quinolones in poultry // Journal of pharmaceutical and biomedical analysis. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0731-7085. eISSN 1873-264X. 2020, vol. 188, art. no. 113389, p. 1-7. DOI: 10.1016/j.jpba.2020.113389. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 3,209; AIF: 3,756; IF/AIF: 0,854; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 5,50; SNIP: 1,171; SJR: 0,795; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005, A 003] [Indėlis: 0,166]
- [S1; GB] Paulikienė, Simona; Venslauskas, Kęstutis; Raila, Algirdas; Žvirdauskienė, Renata; Naujokienė, Vilma. The influence of ozone technology on reduction of carrot loss and environmental IMPACT // Journal of cleaner production. Oxford: Elsevier. ISSN 0959-6526. eISSN 1879-1786. 2020, vol. 244, art. no. 118734, p. 1-14. DOI: 10.1016/j.jclepro.2019.118734. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 7,246; AIF: 5,584; IF/AIF: 1,297; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 10,90; SNIP: 2,394; SJR: 1,886; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 004, T 005] [Indėlis: 0,100]
- [S1; CH; OA] Bartkiene, Elena; Lele, Vita; Ruzauskas, Modestas; Domig, Konrad; Starkute, Vytaute; Zavistanaviciute, Paulina; Bartkevics, Vadims; Pugajeva, Iveta; Klupsaite, Dovile; Juodeikiene, Grazina; Mickiene, Ruta; Rocha, João Miguel. Lactic acid bacteria isolation from spontaneous sourdough and their characterization including antimicrobial and antifungal properties evaluation // Microorganisms. Basel: MDPI AG. ISSN 2076-2607. 2020, vol. 8, iss. 1, art. no. 64, p. 1-22. DOI: 10.3390/microorganisms8010064. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,152; AIF: 4,230; IF/AIF: 0,981; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005, A 003] [Indėlis: 0,083]

Patentai, patentinės paraiškos

Nacionaliniai patentai

- [N5; LT] Bartkienė, Elena (išrad.); Steiblienė, Vesta (išrad.); Adomaitienė, Virginija (išrad.); Juodeikiene, Gražina (išrad.). Žmogaus depresijos ankstyvos diagnostikos sistema = System for the people's early stage depressive disorder detection; savininkai: Kauno technologijos universitetas. Lietuvos sveikatos mokslų universitetas. LT 6735 B. 2020-05-25. [Espacenet] [M.kr.: T 005, M 005, M 001] [Indėlis: 0,250]

Plenariniai pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose

- E. Bartkienė, E. Zokaitytė, V. Lelė, V. Starkutė, P. Zavistanavičiūtė, D. Klupšaitė, D. Černauskas, M. Ruzauskas, V. Bartkevičs, I. Pugajeva, Z. Bērziņa, R. Gružauskas, S. Sidlauskienė, D. Žadeikė, R. Mickienė, G. Juodeikiene. „Influence of extrusion and fermentation processes on wheat bran amino and fatty acids profile, chemical and biosafety, antimicrobial and antifungal properties“ – plenarinis pranešimas. 3rd international conference „Nutrition and Health“, Ryga, Latvija, 2020 m. gruodžio 9-11 d.

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Habil. dr. G. Juodeikiene – KTU atstovė Tarptautinėje grūdų mokslo ir technologijos asociacijoje (ICC) ir ICC Technikos komiteto narė, Latvijos gyvybės mokslų ir technologijų universiteto tarptautinės patariamiosios tarybos narė, COST veiklos CA18101 darbo grupės „Design and development sourdough starter cultures for breadmaking and other agri-food products“ vadovė, Lietuvos standartizacijos departamento TK 15 „Grūdai, grūdų produktai, duona, pašarai“ pirmininkė, LR Žemės ūkio ministerijos Nacionalinės žemės ūkio ir maisto produktų kokybės sistemos ekspertų komiteto narė, Nacionalinių maisto produktų darbo grupės prie LR Žemės ūkio ministerijos narė.
- Dr. J. Damašius – Lietuvos nacionalinio pienininkystės komiteto prie LR Žemės ūkio ministerijos narys.
- Dr. D. Žadeikė – MITA, LVPA ekspertė.
- Dr. R. Kublickas – Lietuvos pramonininkų konfederacijos ekspertas fermentacijos pramonės klausimais.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Habil. dr. G. Juodeikiene – Lietuvos biochemikų draugijos narė.
- Dr. R. Degutytė – Lietuvos biochemikų draugijos narė.
- Dr. R. Kublickas – Aleksandro fon Humboldto (Alexander von Humboldt) mokslinės draugijos narys.

4. Daugiakomponentės heterogeninės sistemos ir jų taikymo technologijos

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedančioji tyrėja dr. R. Šlinkšienė

Tyrėjai: dr. K. Jančaitienė, dr. A. Jaskūnas, dr. R. Paleckienė

Doktorantai: O. Brigaitytė, A. Mikolaitienė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: specialiųjų sudėtinių trąšų su įvairiais priedais, kūrimas, tyrimas ir taikymas technologijose.

Tyrėjai vykdė mokslinius tiriamuosius darbus, susijusius su CAIF CAFE (100% Arabica Signature Blend) ir Lavazza (Club) kavos tirščių ir pelenų panaudojimo galimybėmis aplinkai draugiškoms biriosioms sudėtinėms trąšoms gaminti. Nustatyta kavos tirščių granulometrinė sudėtis, vandeninių tirpalų pH vertės, įvairių cheminių elementų ir organinės anglies koncentracija. Atliktas kavos tirščių granuliavimas, tačiau be papildomų rišiklių granulės nesusiformavo. Vykdyti tyrimai susiję su azoto nuostoliais, kurie susidaro naudojant karbamido pagrindu pagamintas trąšas, nustatyta, kad azoto išplovimą iš karbamido galima sumažinti naudojant kalcio sulfato priedą (tam naudojant gipso kartono atliekas). Mechaniniu būdu gauti $\text{CaSO}_4 \cdot 4\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ kristalai gali būti vienas iš būdų gausioms gipso kartono atliekoms utilizuoti ir taip pat gali prisidėti prie tvaraus išteklių naudojimo ir gamtos saugojimo.

Asociacijos „Santkos slėnis“ bendro KTU-VDU mokslo projekto „Intensyvios ūkinės veiklos neigiamų padarinių klimato kaitai mažinimas kuriant ir naudojant aplinkai draugiškas bioaktyvias trąšas“ rezultatai leidžia teigti, kad mikrodumblių *Chlorella sp.* biomasės cheminė sudėtis yra tinkama bioaktyviosioms trąšoms gaminti, nes juose yra mineralinėse rūgštyse tirpių pagrindinių ir antrinių augalų maisto medžiagų bei mikroelementų ir nėra sunkiųjų metalų. Mikrodumblių suspensijos naudojimas leidžia minimizuoti granuliuotų trąšų gamybos technologijoje naudojamos drėgmės kiekį ir, parinkus optimalias sąlygas, galima sugrąžinti trąšoms keliamus reikalavimus atitinkančias bioaktyvias azoto trąšas. Bioaktyviosiomis medžiagomis (mikrodumblių suspensija ir melasa) praturtintų azoto trąšų naudojimas padidina dirvožemio derlingumui svarbių bakterijų koncentracijas.

Vykdant MTEP paslaugos „Įmonės IKAR skystųjų trąšų sudėties ir gamybos proceso optimizavimas“ veiklas, atliktas komponentų, naudojamų skystosioms trąšoms gaminti, suderinamumo vertinimas bei tyrimas ir gamybos proceso pagal pateiktus gamybos schemas etapus laboratorinis tyrimas. Pagal užsakovo pateiktą gamybos aprašą ir naudojant užsakovo pateiktas žaliavas laboratorijoje buvo gaminami bandomieji mėginiai. Atlikus trąšų komponentų sudėties ir receptūros suderinamumo tyrimą bei stabilumo vertinimą nustatyta, kad šios sudėties kompozicija yra tinkama, tačiau labai svarbu teisingai dozuoti komponentus bei palaikyti temperatūros režimą.

Vykdant MTEP darbo „Inovatyvių specialiųjų sudėtinių tręšiamųjų produktų prototipų kūrimas ir jų savybių tyrimai“ veiklas atlikta galimybių studija, siekiant preliminarai parinkti ir įvertinti planuojamiems produktams gaminti naudotinų žaliavų tinkamumą ir tarpusavio suderinamumą. Planuojami gaminti produktai – skystosios trąšos: specialiosios boro trąšos, specialiosios sieros trąšos su mikroelementais, specialiosios kalio-sieros trąšos, specialiosios koncentruotos sudėtinės trąšos, specialiosios skystosios mikroelementų trąšos su humatais.

Vykdyti projektai

Instituciniai

- KTU Mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Intensyvios ūkinės veiklos neigiamų padarinių klimato kaitai mažinimas kuriant ir naudojant aplinkai draugiškas bioaktyvias trąšas (Biotrąšos)“, 2020, dr. R. Šlinkšienė.

Užsakovieji MTEP darbai

- UAB „Agroconsult LT“, MTEP darbas SV9-3065 „Inovatyvių specialiųjų sudėtinių tręšiamųjų produktų prototipų kūrimas ir jų savybių tyrimas“, 2020–2021, dr. R. Paleckienė.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Barčauskaitė, Karolina; Brazienė, Zita; Avižienytė, Dovilė; Silva, Manoj; Drapanauskaite, Donata; Honer, Kenneth; Gvildienė, Karolina; Slinksiene, Rasa; Jancaitiene, Kristina; Mazeika, Romas; Staugaitis, Gediminas; Dambrauskas, Tadas; Baltakys, Kestutis; Baltrusaitis, Jonas. Mechanochemically synthesized gypsum and gypsum drywall waste cocrystals with urea for enhanced environmental sustainability fertilizers // Journal of environmental chemical engineering. Oxford: Elsevier. ISSN 2213-2929. eISSN 2213-3437. 2020, vol. 8, iss. 4, art. no. 103965, p. 1-12. DOI: 10.1016/j.jece.2020.103965. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 5,909; AIF: 7,013; IF/AIF: 0,842; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 7,50; SNIP: 1,354; SJR: 0,965; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. R. Paleckienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 57 „Trąšos“ vadovė, LVPA ekspertė.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. R. Šlinkšienė, Biotrąšos – agroekosistemų tvarumo didinimui, 2020-07-29, BNS spaudos centras.
- Dr. R. Šlinkšienė, Kavos pupelių atliekos – trąšos ar placebas?, 2020-12-20, portalas ktu.edu.
- Dr. R. Šlinkšienė, Ar antro pagal populiarumą pasaulyje gėrimo atliekos tikrai turėtų būti metamos į sąvartyną, 2020-12-21, portalas lrt.lt.

5. Elektrochemija ir chalkogenų chemija

Mokslo kryptys

N 003 Chemija

Tyrėjai

Vedančioji tyrėja dr. I. Ancutienė

Tyrėjai: dr. R. Alaburdaitė, dr. N. Dukštienė, dr. E. Griškonis, dr. R. Ivanauskas, dr. K. Kantminienė, dr. V. Krylova, dr. S. Ostachavičiūtė, dr. E. Paluckienė, dr. N. Petrašauskienė, dr. D. Sinkevičiūtė, dr. A. Šulčiūtė, dr. E. Valatka, dr. S. Žalenkienė, dr. N. Žmuidzinavičienė

Doktorantai: A. Bronušienė, A. Ilginis, L. Samardokas

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Metalų chalkogenidų ir oksidų plonųjų sluoksnių sintezė ir apibūdinimas. Medžiagų elektrocheminiam energijos generavimui ir kaupimui sintezė ir charakterizavimas.

Tyrėjai vykdė metalų oksidų ir chalkogenidų dangų nusodinimo ant įvairių substratų tyrimus, tyrė gautų dangų savybes. Tirtas sukurtų daugiakomponenčių oksidinių (Zn, Co ir W oksidų), taip pat Cu, Sn, Co, Cd ir Ag chalkogenidinių kompozitų sudarymo mechanizmas, morfologija, cheminė ir fazinė sudėtis, tirta sintezės sąlygų įtaka gautų dangų kokybei, fazinei sudėčiai ir savybėms naudojant įvairius tyrimo metodus. Tirtos grafito veltinio modifikavimas švino junginiais, siekiant nustatyti technologinius parametrus, kuriems esant būtų gauti palengvinti švino rūgštinio akumulatoriaus elektrodai. Modifikavimui naudoti pirmtakai – švino(II) karboksilatai. Ištirta modifikuotų grafito veltinio elektrodų morfologija, struktūra, cheminė sudėtis bei elektrocheminės savybės sieros rūgšties tirpale. Tirtos grafito veltinio, naudojamo kaip anodas mikrobiniuose kuro elementuose, modifikavimo įvairiais organiniais diaminais sąlygos ir įtaka mikrobinių kuro elementų efektyvumui. Nustatyta, jog grafito veltinio elektrodai, kurių paviršiuje yra atitinkamų aminų molekulių fragmentų, ženkliai pagerina elektronų pernašos iš bakterijų į anodą charakteristikas.

Vykdytas LMT finansuotas projektas „Antibakterinių vario dalelių sluoksnių gavimas ir jų pritaikymas ilgalaikio naudojimo apsaugos priemonėms“. Įvairių struktūrų ir pluoštinių sudėčių tekstilės medžiagų pavyzdžiuose, pagamintuose skirtingomis technologijomis Lietuvos įmonėse, buvo sudaryti antibakteriniai sluoksniai, kuriuose vyravo kubinis varis arba kubinis kupritas. Gauti sluoksniai pasižymėjo puikiomis antibakterinėmis savybėmis: *S. aureus* ir *E. coli* bakterijų slopinimo zonų skersmuo siekė net 18-20 mm ir priklausė nuo naudojamos medžiagos prigimties, gaminimo būdo ir

naudojamo reduktoriaus. Ištyrus kaukėse naudotų modifikuotų vilnos ir medvilnės įdėklų baktericidines savybes nustatyta, kad ilgėjant dėvėjimo trukmei nežymiai mažėja bakterijų slopinimo zonų skersmuo, tačiau įdėklai ir po 8 valandų kaukių dėvėjimo pasižymi puikiomis antibakterinėmis savybėmis.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- COST veikla CA18234 „Skaičiavimo medžiagų mokslas efektyviam vandens su nanokristalais išskyrimui iš gausybės elementų“, 2019–2023, dr. I. Barauskienė

Nacionaliniai

- LMT sprendimams dėl COVID-19 padarinių skirtas projektas „Antibakterinių vario dalelių sluoksnių gavimas ir jų pritaikymas ilgalaikio naudojimo apsaugos priemonėms (ANTIBACMOD)“, 2020, dr. R. Ivanauskas.

Užsakomieji MTEP darbai

- UAB „Olimeta“, MTEP darbas SV9-3171 „Cheminių kompozicijų, skirtų suodžių efektyviam šalinimui iš automobilių išmetamųjų dujų katalizinių konverterių jų neišardant, sukūrimas ir testavimas“, 2020, dr. E. Griškonis.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; NL] Balciunaite, Eglė; Petrasauskiene, Neringa; Alaburdaite, Rasa; Jakubauskas, Gediminas; Paluckiene, Edita. Formation and properties of mixed copper sulfide (CuxS) layers on polypropylene // Surfaces and interfaces. Amsterdam: Elsevier. ISSN 2468-0230. 2020, vol. 21, art. no. 100801, p. 1-18. DOI: 10.1016/j.surf.2020.100801. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,837; AIF: 5,910; IF/AIF: 0,818; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,80; SNIP: 1,201; SJR: 0,712; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003]
- [S1; NL] Ostachavičiūtė, Simona; Šulčiūtė, Agnė; Valatka, Eugenijus. The morphology and electrochemical properties of WO₃ and Se-WO₃ films modified with cobalt-based oxygen evolution catalyst // Materials science and engineering B. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0921-5107. eISSN 1873-4944. 2020, vol. 260, art. no. 114630, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.mseb.2020.114630. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,051; AIF: 6,196; IF/AIF: 0,653; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,40; SNIP: 1,145; SJR: 0,850; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003]
- [S1; NL] Bronsienė, A.; Popov, A.; Ivanauskas, R.; Ancutienė, I. Preparation and characterization of tin sulfide films with or without sodium chloride // Chemical physics. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0301-0104. eISSN 1873-4421. 2020, vol. 535, art. no. 110766, p. 1-8. DOI: 10.1016/j.chemphys.2020.110766. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,348; AIF: 5,427; IF/AIF: 0,432; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,30; SNIP: 0,635; SJR: 0,494; Q2 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003]
- [S1; GB] Ivanauskas, R.; Milasiene, D. Fabrication of polyamide-Ag₂Se composite films with controllable properties by an adsorption–diffusion method // Journal of physics and chemistry of solids. Oxford: Elsevier. ISSN 0022-3697. eISSN 1879-2553. 2020, vol. 145, art. no. 109533, p. 1-9. DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109533. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,995; AIF: 6,715; IF/AIF: 0,594; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,20; SNIP: 0,985; SJR: 0,741; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003, T 008]
- [S1; NL] Adlienė, Diana; Gilys, Laurynas; Griškonis, Egidijus. Development and characterization of new tungsten and tantalum containing composites for radiation shielding in medicine // Nuclear instruments and methods in physics research. Section B: Beam interactions with materials and atoms. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0168-583X. eISSN 1872-9584. 2020, vol. 467, p. 21-26. DOI: 10.1016/j.nimb.2020.01.027. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 1,270; AIF: 2,574; IF/AIF: 0,493; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 2,40; SNIP: 0,927; SJR: 0,476; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: M 001, N 002, N 003] [Indėlis: 0,333]

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. E. Valatka – Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narys, Lietuvos chemijos pramonės įmonių asociacijos narys, Lietuvos chemikų draugijos pirmininko pavaduotojas.
- Dr. E. Griškonis – Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narys.
- Dr. K. Kantminienė – Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narė, Lietuvos biotechnologų asociacijos (LTBA) narė.
- Dr. A. Šulčius – Tarptautinės korozijos draugijos (ICC) narys.
- Dr. I. Ancutienė – Lietuvos chemikų draugijos revizijos komisijos narė.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. I. Barauskienė, Vandenilis: kodėl švarus kuras vis dar gaminamas „nešvariai“, 2020-04-20, portalas ktu.edu. 2020-05-29, portalas lrt.lt.
- Dr. R. Ivanauskas, KTU mokslininkams – 42 tūkst. eurų naujų medžiagų su vario dalelėmis, pritaikomų apsauginių kaukių gamyboje, kūrimui, 2020-07-20, portalas ktu.edu.
- Dr. R. Ivanauskas, KTU mokslininkai kuria antibakterines medžiagas kaukių gamybai, 2020-07-20, Verslo žinios.
- Dr. R. Ivanauskas, Iššūkis mokslininkams – sukurti medžiagas ilgalaikių apsaugos priemonių gamybai, 2020-07-22, dienraštis „Kauno diena“.
- Dr. R. Ivanauskas, Jei pavyks, bus pasaulinė inovacija: KTU mokslininkai kurs kaukes, kurios pačios naikins virusus ir bakterijas. 2020-07-23, portalas technologijos.lt.
- Dr. I. Barauskienė, Energiją tiekia ne vien tik baterijos, 2020-08-04, portalas lrt.lt. 2020-08-04, portalas 15min.lt.
- Dr. R. Ivanauskas, KTU mokslininkai per žingsnį nuo geriau apsaugančių veido kaukių, 2020-09-14, portalas Lsveikata.lt.
- Dr. E. Griškonis, Ar baterijos bus kitokios?, 2020-12-15, Žinių radijo laida „Europos greitkelio“ apie naują baterijų reglamentavimą.
- Dr. R. Ivanauskas, Antimikrobinėmis vadinamos veido kaukės: ko galime iš jų tikėtis, 2020-12-22, portalas lrt.lt.

6. Funkcionalios maisto medžiagos

Mokslo kryptys

N 003 Chemija, T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas dr. P. R. Venskutonis

Tyrėjai: R. Baranauskienė, R. Kazernavičiūtė, dr. V. Kitrytė, dr. P. Kraujalis, dr. A. Pukalskas, dr. M. Pukalskienė, dr. M. Syrpas, L. Tamkutė

Doktorantai: A. Adomėnienė, K. Kerner, J. Mackėlienė, L. Dienaitė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Funkcionaliųjų medžiagų (įvairios paskirties natūralių maisto ingredientų bei maisto priedų, sveikatai naudingų junginių ir kt.) paieška, tyrimai, įvertinimas, gamybos ir panaudojimo technologijos. Maisto žaliavų ir šalutinių jų perdirbimo produktų biorafinavimo į funkcinius ingredientus procesų kūrimas taikant kompleksinius ekstrakcijos, frakcionavimo, terminio ir fermentinio apdorojimo metodus. Naujų fitocheminių medžiagų paieška, tyrimai bei pritaikymas funkcionaliojo maisto, maisto papildų ir kitų produktų gamyboje.

Buvo atliekami natūralių maisto priedų ir kitų biologiškai vertingų maistinių medžiagų išskyrimo iš įvairios augalinės žaliavos (botaninių augalų) ir jos perdirbimo šalutinių produktų (tokių kaip uogų išspaudos), jų analizės, perdirbimo ir panaudojimo maisto produktų gamyboje tyrimai, taikant superkrintinės ekstrakcijos ir mikroįkapsuliavimo procesus. Taikant beatliekinio biorafinavimo koncepciją, buvo kuriamos kompleksinio augalinės žaliavos perdirbimo šalutinių produktų perdirbimo į aukštos vertės funkcionaliuosius maisto ingredientus inovatyvios technologijos. Parengta beatliekinio biorafinavimo technologija, kuri galėtų būti komercializuojama ir turėtų teigiamą ekonominę ir socialinę poveikį, taip pat prisidėtų prie darnios raidos.

Iš uogų išspaudų pagaminti produktų prototipai, kurie eksponuoti tradicinėje Lietuvos gamintojų parodoje „Rinkis prekę lietuvišką 2020“. Parodoje geriausio metų gaminio aukso medaliu apdovanotas išskirtinis ūkininkės Audronės Ispyrain produktas „Aviečių sėklų aliejus“, kurio kūrime dalyvavo mokslo grupės tyrėjai.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- Programos „Horizontas 2020“ projektas „Bendradarbiavimo konsorciumas ankstyvam kepenų vėžio aptikimui (COCLICAN)“, 2018–2021, dr. P. R. Venskutonis.

Nacionaliniai

- LMT mokslininkų grupių projektas „Mėsos produktų saugos ir kokybės pagerinimas panaudojant sveikatai naudingas funkcines medžiagas išskirtas iš uogų išspaudų (Berry4Meat)“, 2017–2020, dr. P. R. Venskutonis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 veiklos „Tiksliniai moksliniai tyrimai sumanios specializacijos srityje“ projektas „Naujų funkcinių medžiagų sukūrimas biorafinuojant uogų išspaudas ir jų pritaikymas maisto saugai ir sveikumui pagerinti (Berry4Food)“, 2017–2021, dr. P. R. Venskutonis.

Instituciniai

- KTU Mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Apynių perdirbimas į funkcines medžiagas ir jų pritaikymas inovatyvių fitofarmacinių preparatų kūrimui (BioHops)“, 2020, dr. V. Kitrytė.

Užsakomieji MTEP darbai

- UAB „Biossyd“, MTEP darbas SV9-2492 „Pluoštinių kanapių sėklų ir lapų bei žiedynų perdirbimo procesų sukūrimo ir gautų produktų sudėties analizės bei savybių įvertinimas“, 2019–2021, dr. P. R. Venskutonis.
- AB „Malsena“, MTEP darbas SV9-2700 „Grūdų sėlenų ir gemalų biorafinavimo į aukštesnės vertės medžiagas galimybių mokslinė-techninė studija“, 2019–2020, dr. P. R. Venskutonis.

Apgintos disertacijos

- I. Grauzdytė, Mažai tirtų *Phyllanthus phillyreifolius* ir *Aphloia theiformis* rūšių fitocheminė sudėtis ir *in vitro* bioaktyvumas, 2020-07-03, vadovas dr. R. P. Venskutonis.
- I. Račkauskienė, Burokėlių (*Beta vulgaris*) ir bruknių (*Vaccinium vitis-idaea* L.) lapų preparatų antioksidacinės savybės ir įtaka toksinių Mejero reakcijos produktų susidarymui maisto modelinėse sistemose, 2020-06-12, vadovas dr. A. Pukalskas.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Kitrytė, Vaida; Narkevičiūtė, Aistė; Tamkutė, Laura; Syrpas, Michail; Pukalskienė, Milda; Venskutonis, Petras Rimantas. Consecutive high-pressure and enzyme assisted fractionation of blackberry (*Rubus fruticosus* L.) pomace into functional ingredients: process optimization and product characterization // Food Chemistry. Oxford: Elsevier. ISSN 0308-8146. eISSN 1873-7072. 2020, vol. 312, art. no. 126072, p. 1-11. DOI: 10.1016/j.foodchem.2019.126072. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 6,306; AIF: 3,823; IF/AIF: 1,649; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 10,70; SNIP: 2,370; SJR: 1,775; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; GB] Kitrytė, Vaida; Kavaliauskaitė, Asta; Tamkutė, Laura; Pukalskienė, Milda; Syrpas, Michail; Venskutonis, Petras Rimantas. Zero waste biorefining of lingonberry (*Vaccinium vitis-idaea* L.) pomace into functional ingredients by consecutive high pressure and enzyme assisted extractions with green solvents // Food chemistry. Oxford: Elsevier. ISSN 0308-8146. eISSN 1873-7072. 2020, vol. 322, art. no. 126767, p. 1-8. DOI: 10.1016/j.foodchem.2020.126767. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 6,306; AIF: 3,823; IF/AIF: 1,649; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 10,70; SNIP: 2,370; SJR: 1,775; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; GB] Kitrytė, Vaida; Laurinavičienė, Agnė; Syrpas, Michail; Pukalskas, Audrius; Venskutonis, Petras Rimantas. Modeling and optimization of supercritical carbon dioxide extraction for isolation of valuable lipophilic constituents from elderberry (*Sambucus nigra* L.) pomace // Journal of CO2 utilization. Oxford: Elsevier. ISSN 2212-9820. eISSN 2212-9839. 2020, vol. 35, p. 225-235. DOI: 10.1016/j.jcou.2019.09.020. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 5,993; AIF: 5,456; IF/AIF: 1,098; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,20; SNIP: 1,315; SJR: 1,390; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; CH; OA] Dienaitė, Lijana; Pukalskas, Audrius; Pukalskienė, Milda; Pereira, Carolina V.; Matias, Ana A.; Venskutonis, Petras Rimantas. Phytochemical composition, antioxidant and antiproliferative activities of defatted sea buckthorn (*Hippophaë rhamnoides* L.) berry pomace fractions consecutively recovered by pressurized ethanol and water // Antioxidants. Basel: MDPI. ISSN 2076-3921. 2020, vol. 9, iss. 4, art. no. 274, p. 1-20. DOI: 10.3390/antiox9040274. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 5,014; AIF: 3,731; IF/AIF: 1,343; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,50; SNIP: 1,610; SJR: 1,100; Q3 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,668]
- [S1; CH; OA] Syrpas, Michail; Subbarayadu, Kiran; Kitrytė, Vaida; Venskutonis, Petras Rimantas. High-pressure extraction of antioxidant-rich fractions from shrubby cinquefoil (*Dasiphora fruticosa* L. Rydb.) leaves: process optimization and extract characterization // Antioxidants. Basel: MDPI. ISSN 2076-3921. 2020, vol. 9, iss. 6, art. no. 457, p. 1-20. DOI: 10.3390/antiox9060457. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 5,014; AIF: 3,731; IF/AIF: 1,343; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,50; SNIP: 1,610; SJR: 1,100; Q3 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

- [S1; NL] Tamkutė, Laura; Liepuoniūtė, Rūta; Pukalskienė, Milda; Venskutonis, Petras Rimantas. Recovery of valuable lipophilic and polyphenolic fractions from cranberry pomace by consecutive supercritical CO₂ and pressurized liquid extraction // *Journal of supercritical fluids*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0896-8446. eISSN 1872-8162. 2020, vol. 159, art. no. 104755, p. 1-11. DOI: 10.1016/j.supflu.2020.104755. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,744; AIF: 5,606; IF/AIF: 0,667; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,80; SNIP: 1,345; SJR: 1,055; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; US] Bobinaitė, Ramunė; Kraujalis, Paulius; Tamkutė, Laura; Urbonavičienė, Dalia; Viškelis, Pranas; Venskutonis, Petras Rimantas. Recovery of bioactive substances from rowanberry pomace by consecutive extraction with supercritical carbon dioxide and pressurized solvents // *Journal of industrial and engineering chemistry*. New York: Elsevier. ISSN 1226-086X. eISSN 2234-5957. 2020, vol. 85, p. 152-160. DOI: 10.1016/j.jiec.2020.01.036. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 5,278; AIF: 5,456; IF/AIF: 0,967; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,30; SNIP: 1,404; SJR: 1,095; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,668]
- [S1; CH; OA] Dienaitė, Lijana; Pukalskienė, Milda; Pereira, Carolina V.; Matias, Ana A.; Venskutonis, Petras Rimantas. Valorization of European cranberry bush (*Viburnum opulus* L.) berry pomace extracts isolated with pressurized ethanol and water by assessing their phytochemical composition, antioxidant, and antiproliferative activities // *Foods*. Basel: MDPI. ISSN 2304-8158. 2020, vol. 9, iss. 10, art. no. 1413, p. 1-23. DOI: 10.3390/foods9101413. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,092; AIF: 3,279; IF/AIF: 1,247; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 1,30; SNIP: 1,243; SJR: 0,661; Q3 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,600]
- [S1; US] Syrpas, Michail; Bukauskaitė, Jolita; Ramanauskienė, Kristina; Karosienė, Jūratė; Majienė, Daiva; Bašinskienė, Loreta; Venskutonis, Petras Rimantas. Ultrasound-assisted extraction and assessment of biological activity of phycobiliprotein rich aqueous extracts from wild cyanobacteria (*Aphanizomenon flos-aquae*) // *Journal of agricultural and food chemistry*. Washington: American Chemical Society. ISSN 0021-8561. eISSN 1520-5118. 2020, vol. 68, iss. 7, p. 1896-1909. DOI: 10.1021/acs.jafc.9b05483. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 4,192; AIF: 3,222; IF/AIF: 1,301; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,10; SNIP: 1,388; SJR: 1,086; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 013, T 005, M 003] [Indėlis: 0,574]
- [S1; CH; OA] Grauzdytė, Dovilė; Pukalskas, Audrius; El Kalamouni, Chaker; Venskutonis, Petras Rimantas. Mangiferin rich products from *Aphloia theiformis* (Vahl) Benn leaves: extraction, fractionation, phytochemical characterization, and antioxidant properties // *Molecules*. Basel: MDPI. ISSN 1420-3049. 2020, vol. 25, iss. 9, art. no. 2081, p. 1-16. DOI: 10.3390/molecules25092081. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 3,267; AIF: 5,427; IF/AIF: 0,601; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,10; SNIP: 1,150; SJR: 0,698; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,750]

Plenariniai pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose

- Dr. P. R. Venskutonis, „Functional ingredients from berry processing by-products and their applications“ – plenarinis pranešimas. 3rd international conference „Nutrition and Health“, Ryga, Latvija, 2020 m. gruodžio 9-11 d.

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. P. R. Venskutonis – LR Vyriausybės komisijos Mokslinių tyrimų, eksperimentinės plėtros ir inovacijų strateginės tarybos ekspertų darbo grupės narys agroinovacijoms ir maisto technologijoms, LVPA ekspertas, Lietuvos standartizacijos departamento TK 11 „Fermentacijos produktai“ narys, Latvijos nacionalinės mokslinių tyrimų programos „Agricultural Resources for Sustainable Production of Qualitative and Healthy Foods in Latvia – AGROBIORES“ įgyvendinimo strateginio valdymo grupės narys.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. V. Kitrytė – Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) narė.
- Dr. A. Pukalskas – Lietuvos biochemikų draugijos narys.
- Dr. M. Syrpas – Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) narys.
- Dr. P. R. Venskutonis – Tarptautinės maisto mokslo ir technologijos asociacijos (IUFoST) oficialus Lietuvos delegatas, Tarptautinės maisto papildų ir funkcionaliojo maisto produktų draugijos (ISNFF) narys (angl. *member-at-large*), IFA (ISEKI Food Association: European Association for Integrating Food Science and Engineering Knowledge Into the Food Chain) narys – nacionalinis delegatas, Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) tarptautinio skyriaus narys, Europos chemijos ir molekulinio mokslo asociacijos Maisto chemijos skyriaus (European Association of Chemical and Molecular Sciences Food Chemistry Division) Lietuvos atstovas,

Pasaulinės harmonizavimo iniciatyvos (Global Harmonisation Initiative – GHI) Lietuvos ambasadorius, žurnalo „International Journal of Food Studies and Molecules“ vienas iš redaktorių, žurnalų „CyTA Journal of Food“, „Acta Alimentaria“, „Journal of Food Bioactives“, „Open Agriculture“, „Food and Health“, „Current Research in Nutrition and Food Science“ redakcijų narys.

- Dr. P. R. Venskutonis – Stenfordo universitetas publikavo sąrašą, kuriame skelbiami dažniausiai cituojami įvairių disciplinų mokslininkai. Vienas iš sąraše esančių 6167 mokslininkų iš 60 šalių – dr. P. R. Venskutonis (2020 m. maisto mokslo srityje, kurioje publikuota 29 148 453 straipsnių, mokslininkas pacituotas 1989 kartus).
- Dr. M. Pukalskienė – KTU aktyviausių jaunųjų mokslininkų konkurso nugalėtoja gamtos ir technologijos mokslų srityse.
- Dr. M. Syrpas – KTU aktyviausių jaunųjų mokslininkų konkurso nugalėtojas gamtos ir technologijos mokslų srityse.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. P. R. Venskutonis, Prof. P. R. Venskutonis apie maisto priedus – saldiklius, dažiklius, skonio stipriklius: kurie, mokslo požiūriu, pavojingiausi sveikatai?, 2020-05-14, portalas 15min.lt.
- Dr. P. R. Venskutonis, KTU CTF mokslininkų kurtas analogo neturintis produktas įvertintas aukso medaliu, 2020-10-13, portalas ktu.edu.
- Dr. P. R. Venskutonis, Išskirtinis lietuviškas ūkininkės produktas – aviečių aliejus: mažina daugelio ligų riziką, 2020-10-21, portalas delfi.lt.
- Dr. P. R. Venskutonis, Mining valuable nutrients from berry pomace, The Society of Austrian Chemists (GÖCH), paskaitų ciklas aktualiomis maisto mokslo temomis, 2020-11-03.
- Dr. M. Pukalskienė, Maisto spalva lemia ir skonį: gamintojai ieško „skanių spalvų“ ir produktams, ir pakuotėms, 2020-11-06, LRT televizijos laida „Vartotojų kontrolė“.

7. Maisto struktūrų tyrimas ir projektavimas

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedančioji tyrėja dr. D. Leskauskaitė

Tyrėjai: dr. L. Bašinskienė, dr. D. Čižeikienė, dr. V. Eisinaitė, dr. I. Jasutienė, I. Kaniauskienė, dr. M. Keršienė, dr. A. Šipailienė, dr. R. Vinauskienė

Doktorantė J. Jagelavičiūtė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Funkcionalių medžiagų (įvairios paskirties natūralių maisto ingredientų bei maisto priedų, sveikatai naudingų junginių ir kt.) paieška, tyrimai, įvertinimas, gamybos ir panaudojimo technologijos. Maisto žaliavų ir šalutinių jų perdirbimo produktų biorafinavimo į funkcinius ingredientus procesų kūrimas taikant kompleksinius ekstrakcijos, frakcionavimo, terminio ir fermentinio apdorojimo metodus. Naujų fitocheminių medžiagų paieška, tyrimai bei pritaikymas funkcionaliojo maisto, maisto papildų ir kitų produktų gamyboje.

Buvo atliekami tyrimai, kuriant inovatyvius skaidulinių medžiagų produktus ir juos pritaikant konkrečių maisto produktų maistinės vertės gerinimui bei papildomų sveikatai naudingų savybių suteikimui. Taikant naujus skaidulinių medžiagų frakcionavimo, fizikocheminio ir biokatalizinio perdirbimo bei įkapsuliavimo technologinius sprendimus, kuriamos įvairios sudėties bei technologinių savybių maistinės skaidulos. Naudojant dinaminę, virškinimo trakto kinetines sąlygas imituojančią sistemą tiriama skaidulinių medžiagų funkcionalumas virškinamajame trakte, įvertinant jų galimą poveikį specifiniams gaubtinės žarnos mikrobiotos sudėties ir aktyvumo pokyčiams, teikiantiems naudą šeiminingo sveikatai. Naujos skaidulinės medžiagos išbandomos konkrečiose maisto sistemose, nustatant jų poveikį maisto produktų kokybei ir funkcionalumui vartotojų organizme. Sukūrus naujus skaidulinių medžiagų produktus padidės sveikesnių, didesnės biologinės vertės maisto produktų asortimentas. Kylanti skaidulinių medžiagomis praturtintų maisto produktų paklausa dėl sveiko gyvenimo būdo tendencijų bei gyventojų sąmoningumo didėjimo šiuo metu nėra pilnai patenkinama.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- COST veikla CA16205 „Europos tinklas, skirtas su virškinamojo trakto absorbcija susijusių procesų supratimui“, 2017–2021, dr. D. Leskauskaitė.
- COST veikla CA16112 „Personalizuota mityba senstančiai visuomenei: svarbiausių su amžiumi (senėjimu) susijusių ligų oksidacinių procesų kontrolė“, 2017–2021, dr. M. Keršienė.
- COST veikla CA18105 „Pavojumi pagrįstas mėsos inspektavimas ir integruotas mėsos saugumo užtikrinimas“, 2018–2021, dr. R. Vinauskienė.
- COST veikla CA18113 „Supratimas apie žemo pH poveikį mikroorganizmams“, 2019–2023, dr. A. Šipailienė.
- COST veikla CA18229 „Netradicinės mielės bioproduktų gamybai“, 2019–2023, dr. D. Čižeikienė.
- COST veikla CA18217 „Europos tinklas, skirtas optimizuoti veterinarinį mikrobiologinį gydymą“, 2019–2023, dr. D. Čižeikienė.

Nacionaliniai

- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-CPVA-K-703 „Kompetencijos centrų ir inovacijų ir technologijų perdavimo centrų veiklos skatinimas“ projektas „Uogų išspaudų biorafinavimo technologijų vystymas, kuriant ir komercializuojant inovatyvius produktus“, 2020–2023, dr. D. Leskauskaitė.

Instituciniai

- KTU mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Maistui skirtų geležimi praturtintų mikroįkapsuliavimo sistemų sukūrimas (MaisGelKaps)“, 2020, dr. V. Eisinaitė.
- KTU proveržio investicijų projektas „Maisto virškinamumo tyrimo laboratorijos įsteigimas“, 2020, dr. K. Baltakys, dr. D. Leskauskaitė.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Keršienė, Milda; Jasutienė, Ina; Eisinaitė, Viktorija; Venskutonis, Petras Rimantas; Leskauskaitė, Daiva. Designing multiple bioactives loaded emulsions for the formulations for diets of elderly // Food & function. London: Royal Society of Chemistry. ISSN 2042-6496. eISSN 2042-650X. 2020, vol. 11, iss. 3, p. 2195-2207. DOI: 10.1039/D0FO00021C. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 4,171; AIF: 3,987; IF/AIF: 1,046; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 5,60; SNIP: 1,201; SJR: 1,035; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Eisinaitė, Viktorija; Tamkutė, Laura; Vinauskienė, Rimantė; Leskauskaitė, Daiva. Freeze-dried celery as an indirect source of nitrate in cold-smoked sausages: effect on safety and color formation // LWT - Food Science and Technology. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0023-6438. eISSN 1096-1127. 2020, vol. 129, art.no. 109586, p. 1-9. DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109586. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,006; AIF: 3,279; IF/AIF: 1,221; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,40; SNIP: 1,642; SJR: 1,313; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; US] Štreimikytė, Paulina; Keršienė, Milda; Eisinaitė, Viktorija; Jasutienė, Ina; Lesauskaitė, Vita; Damulevičienė, Gytė; Knašienė, Jurgita; Leskauskaitė, Daiva. Formulating protein-based beverages used for the dysphagia diets of the elderly: viscosity, protein quality, in vitro digestion and consumers' acceptability // Journal of the science of food and agriculture. Hoboken, NJ: Wiley. ISSN 0022-5142. eISSN 1097-0010. 2020, vol. 100, iss. 10, p. 3895-3901. DOI: 10.1002/jsfa.10431. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 2,614; AIF: 3,222; IF/AIF: 0,811; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,60; SNIP: 1,118; SJR: 0,718; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: M 005, T 005] [Indėlis: 0,625]
- [S1; NL] Keršienė, Milda; Jasutienė, Ina; Eisinaitė, Viktorija; Pukalskienė, Milda; Venskutonis, Petras Rimantas; Damulevičienė, Gytė; Knašienė, Jurgita; Lesauskaitė, Vita; Leskauskaitė, Daiva. Development of a high-protein yoghurt-type product enriched with bioactive compounds for the elderly // LWT - Food science and technology. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0023-6438. eISSN 1096-1127. 2020, vol. 131, art. no. 109820, p. 1-8. DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109820. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,006; AIF: 3,279; IF/AIF: 1,221; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 6,40; SNIP: 1,642; SJR: 1,313; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: M 005, T 005] [Indėlis: 0,667]
- [S1; US] Eisinaitė, Viktorija; Leskauskaitė, Daiva; Pukalskienė, Milda; Venskutonis, Petras Rimantas. Freeze-drying of black chokeberry pomace extract-loaded double emulsions to obtain dispersible powders // Journal of food science. New York: John Wiley & Sons. ISSN 0022-1147. eISSN 1750-3841. 2020, vol. 85, iss. 3, p. 628-638. DOI: 10.1111/1750-3841.14995. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 2,479; AIF: 3,279; IF/AIF: 0,756; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,70; SNIP: 0,973; SJR: 0,738; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

- [S1; GB] Cizeikiene, Dalia; Jagelaviciute, Jolita; Stankevicius, Mantas; Maruska, Audrius Sigitas. Thermophilic lactic acid bacteria affect the characteristics of sourdough and whole-grain wheat bread // Food bioscience. Oxford: Elsevier. ISSN 2212-4292. eISSN 2212-4306. 2020, vol. 38, art. no. 100791, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.fbio.2020.100791. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,067; AIF: 3,279; IF/AIF: 0,935; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,60; SNIP: 1,312; SJR: 0,965; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,500]
- [S1; GB] Benucci, Ilaria; Caso, Maria Chiara; Bavaro, Teodora; Masci, Stefania; Keršienė, Milda; Esti, Marco. Prolyl endopeptidase from *Aspergillus niger* immobilized on a food-grade carrier for the production of gluten-reduced beer // Food control. Oxford: Elsevier. ISSN 0956-7135. eISSN 1873-7129. 2020, vol. 110, art. no. 106987, p. 1-10. DOI: 10.1016/j.foodcont.2019.106987. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,258; AIF: 3,279; IF/AIF: 1,298; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,40; SNIP: 1,733; SJR: 1,430; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,166]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. L. Bašinskienė – SCAR strateginės darbo grupės „Maisto sistemos“ (Food Systems) narė, Žemės ūkio mokslo tarybos narė, Lietuvos standartizacijos departamento TK 15 „Grūdai, grūdų produktai, duona, pašarai“ ir TK 51 „Maisto analizė“ narė, MITA ekspertė.
- Dr. I. Jasutienė – Saugomų nuorodų ekspertų komiteto prie LR Žemės ūkio ministerijos narė.
- Dr. D. Leskauskaitė – MITA Biomedicinos ir žemės ūkio mokslų sričių ekspertų tarybos narė, Saugomų nuorodų ekspertų komiteto prie LR Žemės ūkio ministerijos pirmininkė, Žemės ūkio, miškininkystės ir žuvininkystės ir maisto produktų, gėrimų ir tabako gaminių gamybos sektoriaus profesinio komiteto narė, LVPA ekspertė.
- Dr. A. Šipailienė – MITA ekspertė.
- Dr. R. Vinauskienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 3 „Mėsa ir mėsos produktai“ narė.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. L. Bašinskienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos narė.
- Dr. D. Čižeikienė – Lietuvos mikrobiologų draugijos (LMD) narė.
- Dr. I. Jasutienė – žurnalo „Eureka: Life Sciences“ redakcinės kolegijos narė.
- Dr. D. Leskauskaitė – Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) narė, KTU inovatoriškiausių mokslininkų konkurso nugalėtoja.
- Dr. R. Vinauskienė – Lietuvos mėsos perdirbėjų asociacijos (LPMA) narė.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. I. Jasutienė, Maisto saugą ir kokybę lemiantys rizikos veiksniai, maisto autentiškumo problemos ir klastočių nustatymo būdai, 2020-10-07, interviu radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laidai „Mokslo langai“.
- Dr. I. Jasutienė, Maisto pramonėje naudojamos pakavimo medžiagos, biologiškai aktyvios medžiagos, kurios dedamos į maisto produktus, bendrosios mitybos taisyklės ir personalizuota mityba, 2020-10-14, interviu radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laidai „Mokslo langai“.
- Dr. I. Jasutienė, Maisto produktų tinkamumo vartoti terminai, 2020-12-17. Interviu radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laidai „Mokslo langai“.
- Dr. L. Bašinskienė, dr. R. Vinauskienė, Maisto spalva lemia ir skonį: gamintojai ieško „skanių spalvų“ ir produktams, ir pakuotėms, 2020-11-06, LRT televizijos laida „Vartotojų kontrolė“.
- Dr. A. Šipailienė, Kalėdiniai žuvies patiekalai ir naudingos medžiagos: ką gauname „iš žuvies“, 2020-12-20, Lrytas.lt; 2020-12-15, portalas 15min.lt.
- Dr. R. Vinauskienė, Įvairių riebalų savybės, 2020-12-15, interviu LRT televizijos laidai „Vartotojų kontrolė“.
- Dr. M. Keršienė, KTU įdiegia dirbtinio skrandžio sistema, 2020-11-28, LRT laida „Lietuvos žinios“.
- Dr. M. Keršienė, Pokalbis apie KTU įdiegtą dirbtinio skrandžio sistemą, apie termiškai apdorotą maistą ir apie vakuumines pakuotes, 2020-12-02, radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laida „Mokslo langai“.

8. Medžiagų chemija

Mokslo kryptys

N 003 Chemija, T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas habil. dr. J. V. Gražulevičius

Tyrėjai: dr. A. Bučinskas, dr. R. Butkutė, dr. M. Čekavičiūtė, dr. A. Dabulienė, dr. S. Gražulienė, dr. S. Grigalevičius, dr. D. Gudeika, E. Jatautienė, dr. J. Keruckas, dr. R. Keruckienė, dr. G. Kručaitė, dr. R. Lygaitis, dr. J. Ostrauskaitė, dr. J. Simokaitienė, dr. D. Tavgenienė, dr. A. Tomkevičienė, dr. D. Volyniuk

Podoktorantūros stažuotojai: dr. V. Andrulevičienė, dr. O. Bezikonny, dr. E. Skuodis, dr. A. Bučinskas, dr. R. Keruckienė

Doktorantai: S. R. Bernard, D. Blaževičius, R. Durgaryan, M. Gužauskas, M. Lebedevaitė, K. Leitonas, M. Mahmoudi Sharabiani, S. Nasiri, A. Navaruckienė, G. Parulava, S. M. Punniyakoti, L. Skhirtladze, M. Stanitska, H. Starykov, U. Tsiko, S. Mačionis, N. Masimukku

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: organinių polimerinių bei mažamolekulių elektroaktyvių medžiagų (puslaidininkių, spinduolių, netiesinės optikos medžiagų), medžiagų lazeriniam rašymui bei optiniam 3D spausdinimui sintezė, polimerų ir polimerinių kompozitų iš gamtinės kilmės medžiagų kūrimas, tyrimas ir taikymas. Pagrindinis dėmesys kreipiamas organinių skylinių puslaidininkių, skirtų hibridiniams fotovoltiniams elementams ir bipolinių puslaidininkių bei efektyvių spinduolių, skirtų organiniams šviesos diodams, sintezei ir tyrimams.

Programos „Horizontas 2020“ projekte MEGA buvo vykdomi tarptautiniu bendradarbiavimu grindžiami multidisciplininiai, inovatyvūs moksliniai tyrimai. Projekto MEGA tikslas – sunkiųjų metalų neturinčių organinių spinduolių, skirtų komerciniam naudojimui kūrimas. Kuriamos naujos organinių spinduolių, pasižyminčių termiškai aktyvinama uždelstą fluorescencija bei efektyvia emisija ir trumpomis emisijos gyvavimo trukmėmis, sintezės technologijos. Potencialios šių spinduolių pritaikymo sritys – organiniai šviesos diodai bei organiniai lazeriai. Sukurtos medžiagos analizuojamos pritaikant teorinius metodus. Remiantis šiais tyrimais parinkti junginiai sintetiniams ir tyrinėjamos jų terminės, elektrocheminės, fotofizikinės, krūvininkų pernašos savybės bei jų tinkamumas atitinkamiems prietaisams.

Vykdam Lietuvos–Latvijos–Taivano programos projektą „Kontroliuojama termiškai aktyvinama uždelstą fluorescencija pasižymintys spinduoliai, skirti tirpalų liejimo būdu gaunamiems organiniams šviesos diodams“ kuriami polimeriniai, termiškai aktyvinta uždelstą fluorescencija (TADF) pasižymintys spinduoliai, skirti liejimo būdu gaminamiems OLED ir perovskitiniais LED prietaisams. Projekte naudojant kvantinės chemijos skaičiavimus yra projektuojamos molekulės, jos sintetamos, tyrinėjamos jų terminės, elektrocheminės, fotoelektrinės, optinės ir TADF savybės. Taip pat šio projekto metu kuriamas hibridinis OLED–perovskitinio LED prietaisas, bandant gauti baltos šviesos LED prietaisą, panaudojant mėlynos spalvos spinduliuotę iš OLED prietaiso ir oranžinės-geltonos spalvos spinduliuotę iš perovskitinio sluoksnio.

Vykdam Lietuvos–Latvijos–Taivano programos projektą TADF_OLEDs ir mokslininkų grupių projektą „E-materials“ buvo susintetinti polimeriniai, turintys elektroaktyvius 4,7-diarilfluoreno chromoforus. Šios polimerinės medžiagos pasižymi aukštu terminiu stabilumu, jų terminės destrukcijos temperatūros yra intervale 392–397 °C. Amorfinių polimerų stiklėjimo temperatūros svyruoja nuo 28 °C iki 63 °C ir priklauso nuo 4,7-diarilfluoreno chromoforų struktūros. Iš plonų elektroaktyvių junginių sluoksnių elektronų fotoemisijos spektrų apskaičiuoti jonizacijos potencialai išsidėstė 5,8–6,0 eV diapazone. Susintetintų polimerinių medžiagų skylių injekcijos / transportavimo savybės buvo patvirtintos formuojant OLED prietaisus, kuriuose emitteris buvo tris(chinolin-8-olato) aliuminis (Alq₃), kuris taip pat atlieka elektronų pernašos funkciją. Prietaisais, kuriame naudojamas skyles pernešantis polimeras su elektroniškai izoliuotais 2,7-di(4-bifenil) fluoreno chromoforais, pademonstravo geriausius rezultatus, kai įjungimo įtampa yra 3 V, didžiausias srovės efektyvumas viršija 1,7 cd/A, o didžiausias skaistis yra didesnis nei 200 cd/m². Prietaiso efektyvumas buvo dvigubai didesnis nei OLED, kuriame yra naudojamas komercinis skyles pernešantis poli(9-vinilkarbazolo) sluoksnis (PVK). Taip pat susintetinti nauji diarilfluoreno dariniai, turintys fenilo, bifenilo ir naftilo fragmentus. Šie junginiai gali suformuoti amorfinius sluoksnius, o jų stiklėjimo temperatūros išsidėstė 31–74 °C ribose. Sisteminga diarilfluoreno junginių analizė, atliekant molekulinį krūvių pasiskirstymo procesus pagal kvantinės chemijos modeliavimą, leidžia daryti išvadą, kad iš dalies pertraukiama π -konjuguota sistema yra susijusi su pakaitų sukimosi judėjimu, kuris efektyviai modifikavo fluoreno π -konjuguotą sistemą. Mažos molekulinės masės dariniai buvo išbandyti kaip skyles pernešančios medžiagos dvisluoksniuose elektroluminescenciniuose organiniuose šviestukuose, kuriuose kaip emitteris buvo naudojamas Alq₃. Prietaisas, kuriame kaip skyles pernešantis sluoksnis buvo panaudotas junginys 2,7-di(1-naftil)-9,9-dietilfluorenas,

pasižymėjo geriausiomis savybėmis: įsijungimo įtampa buvo 4,6 V, didžiausias srovės efektyvumas siekė 2,8 cd/A, o maksimalus skaitis buvo apie 7760 cd/m².

Vykdam Lietuvos ir Prancūzijos programos „Žiliberas“ projektą „Efektyviu suderinamumu pasižymintys nauji organiniai dažikliai ir skyles pernešantys puslaidininkiai našioms saulės elementams“, susintetinti ir apibūdinti tarpusavio suderinamumu pasižymintys bemetaliai donoras-akceptorius tipo organiniai dažikliai ir skyles pernešantys puslaidininkiai. Sukurtos medžiagos išbandomos dažais sensibilizuotų saulės elementų struktūrose, siekiant padidinti prietaisų ilgaamžiškumą ir efektyvumą.

Projekte „OWEX“ buvo vykdomi multidisciplininiai moksliniai tyrimai. Sukurti nauji universalūs donorinius ir akceptorinius fragmentus turintys ir eksipleksus sudarantys junginiai bei efektyvūs, baltai šviečiantys, supaprastintos struktūros organiniai šviesos diodai. Vykdam projektą sukurti naujo tipo junginiai, gebantys tuo pačiu metu sudaryti eksipleksus tiek su elektronų donorais, tiek su akceptoriais. Šių eksipleksų panaudojimas leido sukurti paprastos struktūros baltą šviesą skleidžiančius OLED.

Vykdam projektus „Vertikalieji organiniai šviečiantys tranzistoriai, sudaryti iš spinduolių, pasižymintys termiškai aktyvuota uždelstą fluorescenciją“, „Bipolinių organinių puslaidininkių, pasižymintys aukštomis liuminescencijos kvantinėmis išeigomis kietoje būsenoje, sintezė, tyrimai, taikymai“, „Savitvarkės donorinės-akceptorinės medžiagos efektyviems elektroluminescenciniams prietaisams“, „Spalvoti OLED, sudaryti iš bipolinių puslaidininkių, pasižymintys padidinta agregacijos sukelta termiškai aktyvuota uždelstą fluorescenciją“ buvo kuriami vertikalieji organiniai šviečiantys tranzistoriai, kuriuose būtų galima panaudoti termiškai aktyvinama uždelstą fluorescenciją pasižymintys spinduolius (TADF) ir kurių darbiniai parametrai būtų geresni negu iki šiol aprašytų analogiškų prietaisų. Sukurti organiniai TADF spinduoliai, pasižymintys efektyvia teigiamų ir neigiamų krūvininkų pernaša ir didele kietos būsenos liuminescencijos kvantine išeiga. Taip pat buvo susintetinti junginiai, pasižymintys ne tik dideliu liuminescencijos kvantiniu efektyvumu kietoje būsenoje, bet ir efektyvia ir subalansuota teigiamų ir neigiamų krūvininkų pernaša. Susintetinti organiniai spinduoliai, pasižymintys agregacijos sustiprintos emisijos reiškiniu ir termiškai aktyvinta uždelstą fluorescenciją. Šių savybių derinys leido pagaminti didelio efektyvumo organinius šviestukus. Kuriant naujus elektrochemiškai ir termiškai stabilus, pasižymintys efektyvia ir subalansuota skylių ir elektronų pernaša bei stabilus molekulinis stiklus sudarančius organinius puslaidininkius, susintetinti nauji dariniai, pasižymintys aukšta tripletinės būsenos energija bei aukštomis stiklėjimo temperatūromis. Susintetinti junginiai išbandyti kaip emisinių sluoksnių matricos tiek fosforescenciniuose, tiek termiškai aktyvinama uždelstą fluorescenciją paremtuose OLED. Gautos geros prietaisų charakteristikos.

Projektai „Balta elektroluminescencija pasižymintys organinių šviestukų, skirtų apšvietimui, tobulinimas panaudojant eksipleksinę bei termiškai aktyvintą emisiją“, „Donorinius pakaitus turintys 1,2,3-triazolo dariniai skirti organiniams šviestukams“ vykdomi kartu su partneriais iš Ukrainos. Vykdam projektus kuriamos ir testuojamos mažamolekulinės monomerinės struktūros. Taip pat atliekami teoriniai kvantiniai skaičiavimai, vykdoma sintezė, tiriamos terminės, elektrocheminės, fotoelektrinės jų savybės, taip pat vertinamas jų perspektyvumas. Sukurti ir tirti nauji donoro-akceptoriaus tipo junginiai, pasižymintys efektyvia mėlyna termiškai aktyvuota uždelstą fluorescenciją, bei panaudojant erdvinės eksitonų lokalizacijos strategiją, buvo pagaminti balta elektroluminescencija pasižymintys šviestukai.

Vykdam projektą „Žemais jonizacijos potencialais pasižymintys organiniai skyliniai puslaidininkiai perovskitinams saulės elementams“ kuriami nebrangūs, lengvai sintetintinami bei pasižymintys žemais jonizacijos potencialais, aukštu terminiu ir fotocheminiu stabilumu, geru tirpumu, aukštomis stiklėjimo temperatūromis ir aukštu skylių dreifiniu judriu organiniai skyliniai puslaidininkiai efektyviems ir stabilams perovskitinams saulės elementams. Susintetintos naujos medžiagos buvo panaudotos skyles pernešantiems sluoksniams perovskito saulės elementuose, pasižymintuose geru našumu, siekiančiu 18,4 %.

Podoktorantų stažuotių „Fosforescencija kambario temperatūroje ir uždelstą fluorescenciją pasižymintys organinių spinduolių sintezė ir savybių tyrimas“, „Elektrondonorinių (alkoksi- ir *N,N*-dialkilamin-) pakaitų įtakos tyrimas skyles pernešančių medžiagų sluoksnio morfologijai bei organinių šviestukų efektyvumui“, „Mėlynų organinių elektroluminescencinių prietaisų kūrimas išnaudojant rezonanso sustiprintą matrica-svečias energijos pernašą“, „Triazotrukseno darinių, skirtų organinės optoelektronikos prietaisams, sintezė ir tyrimas“ ir „Organinių puslaidininkių savybių tyrimas ir modeliavimas kvantinės chemijos metodais“ tikslas organinių spinduolių, matricų bei skyles pernešančių medžiagų kūrimas. Sintetunami ir tiriami organiniai donoras-akceptorius tipo junginiai, kurie pasižymi fosforescencija kambario temperatūroje ar uždelstą fluorescenciją. Taip pat kuriamos komerciškai prieinamų skyles pernešančių medžiagų alternatyvos į jų struktūras įterpiant elektrondonorinius pakaitus. Tiriamos ir analizuojamos gautų junginių savybės. Pasitelkiant kvantinės chemijos skaičiavimus, interpretuojami molekulėse vykstantys fotofizikiniai reiškiniai. Susintetinti organiniai puslaidininkiai naudojami perspektyviems ir efektyviems OLED pagaminti. Sukurti nauji organiniai spinduoliai, pasižymintys šiluma aktyvuojama uždelstą fluorescenciją ir tripletų anihiliacija, buvo panaudoti geltonos ir oranžinės spalvos OLED, kurių išorinis kvantinis efektyvumas siekė 22,1%.

Projekto SLOPSINT tikslas – susintetinti naujus biologiškai aktyvius organinius junginius, įgalinančius išvengti bakterijų atsparumo antibiotikams problemos. Susintetinti nauji junginiai, ištirtas jų biologinis aktyvumas, slopinant antibiotikus išmetančių siurblių bakterijose veiklą. Naujų netoksiškų ir biologiškai stabilų junginių sintezė ir panaudojimas gydant bakterijų sukeltas ligas yra aktualus teoriniu ir praktiniu panaudojimo medicinoje požiūriu.

INTERREG BSR programos projekte „Ecolabnet“ yra kuriamas ir išbandomas eko-inovacijų paslaugų mažoms gamybos įmonėms tiekėjų tinklas Baltijos jūros regiono šalyse. Vykdamas projekto veiklas, sukurta serija naujų tinklinių polimerų, kurie fotopolimerizacijos būdu gauti iš gamtinės kilmės monomerų. Ištirta jų fotopolimerizacijos kinetika, gautų polimerų mechaninės ir terminės savybės. Nustatyta polimerizacijos greičio ir gautų tinklinių polimerų struktūros ir savybių priklausomybė nuo pradinių medžiagų mišinio sudėties ir fotopolimerizacijos sąlygų. Sukurtos kompozicijos išbandytos komerciniais optinio 3D spausdinimo ir tiesioginio lazerinio rašymo įrenginiais. Atrinktos geriausių savybių medžiagos yra bandomos mažų gamybos įmonių technologinėse linijose.

Projekte „CDCmeso3D“ sukurta klik dvigubojo kietinimo sistemos iš įvairių augalinės kilmės monomerų, atlikta jų polimerizacija, panaudojant fotoiniciuotąsias reakcijas ir / arba fotoiniciuotų ir termiškai inicijuotų reakcijų kombinaciją, atliktas gautų polimerų charakterizavimas ir savybių tyrimas. Atrinktos klik dvigubojo kietinimo sistemos išbandytos lazeriniame 3D mezostruktūriniame. Projekte sukurta sistemos iš atsinaujinančių žaliavų yra potencialios medžiagos pakeisti komercines iš naftos produktų gautas medžiagas optinio 3D spausdinimo technologijose.

Vykdamas MTEP rezultatų komercinimo ir tarptautiškumo skatinimo projektą „Fotopolimerinės medžiagos, skirtos gaminti antistatinių savybių turinčius gaminius, naudojant stereolitografinį (SLA) 3D spausdinimą, komercinimas“, buvo atlikta serijos fotopolimerizuojamų medžiagų tyrimų ir gautų polimerų savybių tyrimų. Geriausiomis savybėmis pasižymintys medžiagos atrinktos antistatinių savybių turinčių gaminių stereolitografiniam 3D spausdinimui. Projektas vykdomas kartu su gamybos įmone, projekto metu sukurta ir atrinkta medžiaga bus komercinamos tarptautiniu mastu.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- Programos „Horizontas 2020“ projektas „Bemetaliai emiteriai naujos kartos šviesos šaltiniams (MEGA)“, 2019–2022, habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Latvijos–Taivano programos projektas „Kontroliuojama termiškai aktyvinta uždelstą fluorescencija pasižymintys polimeriniai spinduoliai, skirti tirpalų liejimo būdu gaunamiems organiniams šviestukams“, 2019–2021, dr. D. Volyniuk.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Latvijos–Taivano programos projektas „Naujos TADF medžiagos ir prietaisų sandaros organinių šviestukų efektyvumui didinti“, 2019–2021, dr. S. Grigalevičius.
- 2014–2020 m. Interreg Baltijos jūros regiono programos projektas „Eko-inovacijų paslaugų mažoms gamybos įmonėms tiekėjų tinklas (Ecolabnet)“, 2018–2021, dr. J. Ostrauskaitė.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Ukrainos programos projektas „Donorinius pakaitus turintys 1,2,3-triazolo dariniai skirti organiniams šviestukams (TRIAZOLED)“, 2020–2021, dr. A. Tomkevičienė.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Ukrainos programos projektas „Balta electroluminescencija pasižymintys organinių šviestukų, skirtų apšvietimui, tobulinimas panaudojant eksiplexinę bei termiškai aktyvintą emisiją“, 2020–2021, dr. D. Volyniuk.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Ukrainos programos projektas „Naujos kartos įvairiaspalviai OLED, sudaryti iš ambipolinių puslaidininkių, pasižymintys padidinta agregacijos sukelta termiškai aktyvinta uždelstą fluorescencija“, 2020–2021, dr. D. Gudeika.
- Tarpvalstybinės Lietuvos–Prancūzijos programos „Žiliberas“ projektas „Efektyviu suderinamumu pasižymintys nauji organiniai dažikliai ir skyles pernešantys puslaidininkiai našioms saulės elementams“, 2019–2020, dr. D. Gudeika.
- COST veikla CA15128 „Molekulinė spintronika“, 2016–2020, dr. R. Lygaitis.

Nacionaliniai

- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 veiklos „Aukšto lygio tyrėjų grupių vykdomi moksliniai tyrimai“ projektas „Vertikalieji organiniai šviečiantys tranzistoriai sudaryti iš spinduolių pasižymintys termiškai aktyvinama uždelstą fluorescencija“, 2017–2021, habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Mokslininkų kvalifikacijos tobulinimas vykdamas aukšto lygio MTEP projektus“ projektas „Bipolinių organinių puslaidininkių, pasižymintys aukštomis liuminescencijos kvantinėmis išieigomis kietoje būsenoje, sintezė, tyrimai, taikymai“, 2018–2021, habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Baltų šviesos diodų kūrimas, naudojant multi-eksiplexinius spinduolius (OWEX)“, 2017–2020, dr. D. Volyniuk.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Naujos struktūros elektroaktyvios medžiagos efektyviems fosforescuojantiems organiniams šviestukams (E-MATERIALS)“, 2017–2020, dr. S. Grigalevičius.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Klik dvigubo kietinimo polimerai iš augalinės kilmės medžiagų lazeriniam 3D mezoskaliniam struktūrinimui“, 2020–2022, dr. J. Ostrauskaitė.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Žemais jonizacijos potencialais pasižymintys organiniai skyliniai puslaidininkiai perovskitinams saulės elementams“, 2020–2022, dr. J. Simokaitienė.

- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-MITA-K-702 „MTEP rezultatų komercinimo ir tarptautiškumo skatinimas“ projektas „Fotopolimerinės medžiagos, skirtos gaminti atistatinių savybių turinčius gaminius, naudojant stereolitografinį (SLA) 3D spausdinimą, komercinimas“, 2020–2021, dr. J. Ostrauskaitė.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 „Aukšto lygio tyrėjų grupių vykdomi moksliniai tyrimai“ projektas „Savitvarkės donorinės-akceptorinės medžiagos efektyviems elektroluminescenciniams prietaisams“, 2020–2023, habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Mėlynų organinių elektroluminescencinių prietaisų kūrimas išnaudojant rezonanso sustiprintą matrica-svečias energijos pernašą“, 2020–2022, dr. D. Volyniuk.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Fosforescencija kambario temperatūroje ir uždelstą fluorescenciją pasižyminčių organinių spinduolių sintezė ir savybių tyrimas“, 2020–2022, dr. R. Keruckienė.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Triazotrukseno darinių, skirtų organinės optoelektronikos prietaisams, sintezė ir tyrimas“, 2020–2022, dr. J. Simokaitienė.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Elektrondonorinių (alkoksi- ir N,N-dialkilamin-) pakaitų įtakos tyrimas skylių pernešančių medžiagų sluoksnio morfologijai bei organinių šviestukų efektyvumui“, 2020–2022, dr. A. Bučinskas.

Instituciniai

- KTU Mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Naujos generacijos organiniai puslaidininkiai OLED technologijoms (PUSOLED)“, 2020, dr. G. Kručaitė.
- KTU Mokslo ir inovacijų fondo finansuojamas projektas „Spalvoti OLED, sudaryti iš bipolinių puslaidininkių, pasižyminčių padidinta agregacijos sukelta termiškai aktyvuota uždelstą fluorescenciją (BLIX4LED)“, 2020, dr. D. Gudeika.

Apgintos disertacijos

- O. Bezvikonnyi, Organinių puslaidininkių, skirtų organiniams šviesos diodams, tyrimai, 2020-09-04, mokslinis vadovas habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- G. Sych, Naujų intramolekulinių ir tarpmolekulinių sistemų donoras-akceptorius kūrimas ir apibūdinimas, 2020-03-09, vadovas habil. dr. J. V. Gražulevičius.
- I. Hladka, Organinių elektroaktyvių junginių, sudarytų iš donorinių ir akceptorinių fragmentų, sintezė ir tyrimai, 2020-03-09, vadovas habil. dr. J. V. Gražulevičius.

Tyrėjai, kėlę mokslinę kvalifikaciją užsienio institucijose

- Dokt. K. Leitonas, įmonė „Cynora“, Vokietija, 2020 m. vasario 28 – kovo 15 d. ir 2020 m. liepos 20 – gruodžio 31 d. Naujų termiškai aktyvuota uždelstą fluorescenciją pasižyminčių spinduolių elektroluminescencinių savybių tyrimai, juos pritaikant OLED šviestukuose.
- Dokt. M. Gužauskas, įmonė „CreaPhys“ GmbH (CP), Vokietija, 2020 m. spalio 13 d. – 2021 m. balandžio 10 d. Iširti naujai susintetintas organines medžiagas ir pritaikyti jas OLED gamyboje.
- Dr. D. Volyniuk, įmonė „ELECTRON-CARAT“, Ukraina, 2020 m. liepos 31 d. – rugsėjo 29 d. Organinių puslaidininkių tyrimai, siekiant juos pritaikyti kietakūniams šviesos šaltiniams.
- R. Durgaryan, Uppsala universitetas, Švedija, 2020 m. spalio 2 d. – 2021 m. gegužės 20 d. Medžiagų, skirtų organinėms saulės celėms, tyrimai.
- Dr. A. Bučinskas, įmonė „ELECTRON-CARAT“, Ukraina, 2020 m. sausio 17 d. – 2021 m. kovo 16 d. Naujų organinių spinduolių potencialo pritaikant juos organinių šviesos diodų ir lazerių struktūrose nustatymas.
- Dr. S. Grigalevičius, Latvijos universitetas, Latvija, 2020 m. liepos 15-20 d. Naujos medžiagos trečios generacijos OLED prietaisams.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Sallenave, Xavier; Shasti, Mona; Anaraki, Elham Halvani; Volyniuk, Dmytro; Gražulevičius, Juozas Vidas; Zakeeruddin, Shaik M.; Mortezaali, Abdollah; Grätzel, Michael; Hagfeldt, Anders; Sini, Gjergji. Interfacial and bulk properties of hole transporting materials in perovskite solar cells: spiro-MeTADversusspiro-OMeTAD // Journal of materials chemistry A. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-7488. eISSN 2050-7496. 2020, vol. 8, iss. 17, p. 8527-8539. DOI: 10.1039/d0ta00623h. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF:

- 11,301; AIF: 6,026; IF/AIF: 1,875; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 17,10; SNIP: 1,683; SJR: 3,432; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,200]
- [S1; US] Lee, Jiun-Haw; Chen, Chia-Hsun; Lin, Bo-Yen; Lan, Yi-Hsin; Huang, Yi-Mei; Chen, Nai-Jing; Huang, Jau-Jiun; Volyniuk, Dmytro; Keruckiene, Rasa; Grazulevicius, Juozas Vidas; Wu, Yuh-Renn; Leung, Man-Kit; Chiu, Tien-Lung. Bistriazoles with a biphenyl core derivative as an electron-favorable bipolar host of efficient blue phosphorescent organic light-emitting diodes // *ACS applied materials & interfaces*. Washington: American Chemical Society. ISSN 1944-8244. eISSN 1944-8252. 2020, vol. 12, iss. 44, p. 49895-49904. DOI: 10.1021/acsami.0c13705. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 8,758; AIF: 6,263; IF/AIF: 1,398; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 13,60; SNIP: 1,568; SJR: 2,568; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,228]
 - [S1; GB; OA] Keruckiene, R.; Guzauskas, M.; Lapienyte, L.; Simokaitiene, J.; Volyniuk, D.; Cameron, J.; Skabara, P.J.; Sini, G.; Grazulevicius, J.V. An experimental and theoretical study of exciplex-forming compounds containing trifluorobiphenyl and 3,6-di-tert-butylcarbazole units and their performance in OLEDs // *Journal of materials chemistry C*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-7526. eISSN 2050-7534. 2020, vol. 8, iss. 40, p. 14186-14195. DOI: 10.1039/d0tc02777d. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 7,059; AIF: 4,950; IF/AIF: 1,426; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 10,90; SNIP: 1,407; SJR: 1,934; Q1 (2019, Scopus Sources)]
 - [S1; US; OA] Obrezkov, Filipp A.; Dashitsyrenova, Dolgor D.; Lvov, Andrey G.; Volyniuk, Dmytro Y.; Shirinian, Valerii Z.; Stadler, Philipp; Grazulevicius, Juozas V.; Sariciftci, Niyazi S.; Aldoshin, Sergey M.; Krayushkin, Mikhail M.; Troshin, Pavel A. Light-sensitive material structure-electrical performance relationship for optical memory transistors incorporating photochromic dihetarylethenes // *ACS applied materials & interfaces*. Washington, DC: American Chemical Society. ISSN 1944-8244. eISSN 1944-8252. 2020, vol. 12, iss. 29, p. 32987-32993. DOI: 10.1021/acsami.0c06049. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 8,758; AIF: 6,263; IF/AIF: 1,398; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 13,60; SNIP: 1,568; SJR: 2,568; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,180]
 - [S1; GB] Gudeika, Dalius; Bezvikonnyi, Oleksandr; Volyniuk, Dmytro; Skuodis, Eigirdas; Lee, Pei-Hsi; Chen, Chia-Hsun; Ding, Wen-Cheng; Lee, Jiun-Haw; Chiu, Tien-Lung; Gražulevičius, Juozas Vidas. Oxygen sensing and OLED applications of di-tert-butyl-dimethylacridinyl disubstituted oxygafluorene exhibiting long-lived deep-blue delayed fluorescence // *Journal of materials chemistry C*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-7526. eISSN 2050-7534. 2020, vol. 8, iss. 28, p. 9632-9638. DOI: 10.1039/d0tc01648a. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 7,059; AIF: 4,950; IF/AIF: 1,426; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 10,90; SNIP: 1,407; SJR: 1,934; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,500]
 - [S1; NL] Krucaite, Gintare; Blazelevicius, Dovydas; Tavgeniene, Daiva; Grigalevicius, Saulius; Lin, Chun-Han; Shao, Chang-Min; Chang, Chih-Hao. Tetramer of triphenylamine and similar derivatives with bromine atoms as hole injecting/transporting materials for efficient red phosphorescent OLEDs // *Optical materials*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0925-3467. eISSN 1873-1252. 2020, vol. 108, art. no. 110225, p. 1-7. DOI: 10.1016/j.optmat.2020.110225. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,779; AIF: 4,124; IF/AIF: 0,673; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,40; SNIP: 1,068; SJR: 0,594; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,574]
 - [S1; GB] Tavgeniene, Daiva; Blazelevicius, Dovydas; Eidimtas, Marius; Krucaite, Gintare; Zhang, Baohua; Sutkuvienė, Simona; Grigalevicius, Saulius. Phenoxazines having various electron acceptor or donor fragments as new host materials for green phosphorescent OLEDs // *Dyes and pigments*. Oxford: Elsevier. ISSN 0143-7208. 2020, vol. 172, art. no. 107839, p. [1-5]. DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.107839. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,613; AIF: 3,831; IF/AIF: 1,204; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 7,10; SNIP: 1,051; SJR: 0,827; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 004, N 003] [Indėlis: 0,716]
 - [S1; CH; OA] Navaruckiene, Aukšė; Skliutas, Edvinas; Kasetaitė, Sigita; Rekštytė, Sima; Raudonienė, Vita; Bridžiuvienė, Danguolė; Malinauskas, Mangirdas; Ostrauskaite, Jolita. Vanillin acrylate-based resins for optical 3D printing // *Polymers*. Basel: MDPI AG. ISSN 2073-4360. 2020, vol. 12, iss. 2, art. no. 397, p. 1-14. DOI: 10.3390/polym12020397. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 3,426; AIF: 3,752; IF/AIF: 0,913; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,70; SNIP: 1,150; SJR: 0,704; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 010, T 008, T 005] [Indėlis: 0,375]
 - [S1; GB] Navaruckiene, Aukse; Kasetaitė, Sigita; Ostrauskaite, Jolita. Vanillin-based thiol-ene systems as photoresins for optical 3D printing // *Rapid prototyping journal*. Bingley: Emerald. ISSN 1355-2546. eISSN 1758-7670. 2020, vol. 26, iss. 2, p. 402-408. DOI: 10.1108/RPJ-03-2019-0076. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,099; AIF: 4,191; IF/AIF: 0,739; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,40; SNIP: 1,328; SJR: 0,841; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
 - [S1; GB] Bunzmann, Nikolai; Weissenseel, Sebastian; Kudriashova, Liudmila; Gruene, Jeannine; Krugmann, Benjamin; Grazulevicius, Juozas Vidas; Sperlich, Andreas; Dyakonov, Vladimir. Optically and electrically excited intermediate electronic states in donor:acceptor based OLEDs // *Materials horizons*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2051-6347. eISSN 2051-6355. 2020, vol. 7, iss. 4, p. 1126-1137. DOI: 10.1039/c9mh01475f.

[Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 12,319; AIF: 5,716; IF/AIF: 2,155; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 18,00; SNIP: 2,365; SJR: 4,798; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,125]

Patentai, patentinės paraiškos

Tarptautinės patentinės paraiškos

- Paraiška Europos patentų tarnybai EP20201128.4, Organic Molecular Materials Based on Benzanthrone Acceptor Moiety for Optoelectronic Devices, Uliana Tsiko (KTU), Galyna Sych (KTU), Rasa Keruckienė (KTU), Viktorija Andrulėvičienė (KTU), Jonas Keruckas (KTU), Jūratė Simokaitienė (KTU), Monika Čekavičiūtė (KTU), Juozas Vidas Gražulevičius (KTU), Dmytro Volyniuk (KTU), Oleksandr Bezikonnyi (KTU), Eglė Jatautienė (KTU), Tan Xiaofeng (KTU), 2020 m. spalio 9 d.

Plenariniai pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose

- Habil. dr. J. V. Gražulevičius. „Organic glass-forming electroactive molecular materials for organic light emitting diodes“ – plenarinis pranešimas. International Conference on Science and Technology of Advanced Materials (STAM 20), Kotamangalama, Kerala, Indija, 2020 m. sausio 14-16 d.
- Habil. dr. J. V. Gražulevičius. „Donor-acceptor molecular materials for organic light emitting diodes and oxygen sensing“ – plenarinis pranešimas. 3rd Global Summit on Chemistry and Chemical Engineering, Filadelfija, JAV, 2020 m. vasario 17-18 d.

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Habil. dr. J. V. Gražulevičius – LMT, MITA ir LMA programų projektų ekspertas, LMA narys, Lietuvos medžiagų tyrinėtojų asociacijos valdybos narys.
- Dr. S. Grigalevičius – MITA, UEFISCDI (Rumunija) ir „Eureka“ programų projektų ekspertas.
- Dr. R. Lygaitis – MITA programų projektų ekspertas
- Dr. D. Gudeika – LMA Jaunosios akademijos (LMAJA) narys.
- Dr. J. Ostrauskaitė – MITA programų projektų ekspertė.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Habil. dr. J. V. Gražulevičius – žurnalų „Chemija“, „Materials Science (Medžiagotyra)“ redkolegijų narys. Stenfordo universitetas publikavo sąrašą, kuriame skelbiami dažniausiai cituojami įvairių disciplinų mokslininkai. Vienas iš sąrašų esančių 6167 mokslininkų iš 60 šalių – habil. dr. J. V. Gražulevičius (2020 m. taikomosios fizikos srityje, kurioje publikuota 2 931 224 856 straipsnių, cituotas 1991 kartą).
- Dr. R. Lygaitis – Vokietijos fizikų draugijos (Deutsche Physikalische Gesellschaft/German Physical Society) narys, Lietuvos medžiagų tyrinėtojų asociacijos narys, Lietuvos chemikų draugijos narys.

9. Organinių puslaidininkų sintezė

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas dr. V. Getautis

Tyrėjai: dr. J. Ardaravičienė, dr. G. Bubnienė, dr. M. Daškevičienė, A. Drevilkauskaitė, P. Luižys, dr. A. Magomedov, dr. T. Malinauskas, dr. K. Rakštys, dr. D. Tomkutė-Lukšienė, dr. S. Urnikaitė

Podoktorantūros stažuotojas dr. K. Rakštys

Doktorantai: Š. Daškevičiūtė, A. Jegorovė, M. Marčinskas, M. Steponaitis, L. M. Svirskaitė, D. Vaitukaitytė, E. Kasparavičius

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Organinių fotopulsaidininkų energiją taupančioms technologijoms (saulės elementams, šviesos diodams, efektyviems lauko tranzistoriams ir pan.) sintezė ir savybių tyrimas. Dažiklių ir pigmentų bei jų tarpinių produktų sintezė.

Susintetinti ir sėkmingai perovskitiniuose saulės elementuose (PSC) pritaikyti nauji *p*-tipo organiniai puslaidininkiai formuojantys savitvarkius monosluoksnius. Naujosios savitvarkius monosluoksnius formuojančios medžiagos (SAM) gali būti padengiamos ant skaidrių laidžių oksidų naudojant paprastas metodikas, tokias kaip substrato merkimas į tirpalą ir sluoksnio formavimas panaudojant išcentrinę jėgą (spin-coating). Abejais atvejais gaunami labai geromis charakteristikomis pasižymintys PSC, o pats metodas užtikrina gerą atsikartojamumą ir lengvai gali būti pritaikomas didesnio masto gamyboje. Įrenginiai su SAM efektyvumu, stabilumu ir universalumu lenkia analogus, naudojančius polimerą kodiniu pavadinimu PTAA – medžiagą, kuri iki šiol leido pasiekti geriausius rezultatus *p-i-n* architektūros PSC. Atliekant įrenginių ilgalaikio stabilumo testavimus (aukštoje temperatūroje ir esant intensyviai apšvietimui) PSC sukonstruoti naudojant SAM sluoksnius demonstravo didesnę stabilumą nei palyginamieji elementai su PTAA standartu. SAM junginiai buvo tiriami ne tik paprastuose, bet ir tandeminiuose įrenginiuose, CIGSe/perovskias tandeminis saulės elementas pademonstravo sertifikuotą 23,26% našumą ir viršijo prieš tai pasaulyje skelbtą rekordą (22,4%). Taip pat svarbu paminėti, kad SAM medžiagas naudojantys saulės elementai buvo pagaminti be papildomų tarpsluoksnių, priedų ar legirantų. Sėkmingi bandymai su CIGSe/perovskias tandeminiiais saulės elementais taip pat atskleidžia ir kitą SAM technologijos privalumą, t. y. šie monosluoksniai gali būti sėkmingai formuojami ant šiurkščių arba tekstūruotų paviršių, kas yra be galo svarbu norint pritaikyti šias medžiagas įvairių architektūrų tandeminiuose įrenginiuose (pvz., c-Si/perovskitas). Gauti rezultatai akivaizdžiai demonstruoja sukurtos SAM metodikos potencialą sujungti visas būtinas savybes (efektyvumas, stabilumas, paprasta sintezė ir sluoksnių formavimas) reikalingas našiam skylių transportavimo sluoksniui perovskitiniuose saulės elementuose.

Per ataskaitinį laikotarpį buvo susintetinti fluoreno chromoforą turintys enaminai, kurie ne tik pasižymi puikiomis puslaidininkinėmis savybėmis, bet gali *in situ* polimerintis, susidarant 3D struktūros netirpiems polimerams. Iširtos susintetintų organinių puslaidininkinių optinės, terminės bei elektrinės savybės, įvertinant jų galimybes panaudoti šiuos junginius kaip skyles transportuojančias medžiagas perovskitiniuose saulės elementuose. Aktyviai bendradarbiaujant su užsienio partneriais buvo sukonstruoti bei charakterizuoti perovskitiniai saulės elementai, kuriuose nauji organiniai puslaidininkiai panaudoti kaip skyles transportuojančios medžiagos.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- Programos „Horizontas 2020“ projektas „Perovskitiniai plonasluoksniai fotovoltiniai elementai (PERTPV)“, 2018–2021, dr. V. Getautis.

Nacionaliniai

- LMT mokslininkų grupių projektas „Efektyvių organinių puslaidininkų, skirtų kietos būsenos saulės elementams, vienkopė sintezė (Fotomolekulės)“, 2017–2020, dr. V. Getautis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stażuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Organinių puslaidininkų savybių tyrimas ir modeliavimas kvantinės chemijos metodais“, 2017–2021, dr. V. Getautis.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Savitvarkiai krūvius transportuojantys monosluoksniai efektyviems perovskitiniams saulės elementams (SAM)“, 2019–2022, dr. T. Malinauskas.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Funkcinės molekulės naujos kartos saulės elementams: nuo sintezės link komercializavimo“, 2020–2022, dr. K. Rakštys.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 1.2.2-CPVA-K-703 „Kompetencijos centrų ir inovacijų ir technologijų perdavimo centrų veiklos skatinimas“ projektas „Funkcinės molekulės naujos kartos saulės elementams: nuo sintezės link komercializavimo“, 2020–2023, dr. V. Getautis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 „Aukšto lygio tyrėjų grupių vykdomi moksliniai tyrimai“ projektas „Efektyvios bei tvarios krūvius transportuojančios molekulės energiją taupančioms technologijoms (SMARTMOLECULES)“, 2020–2023, dr. V. Getautis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stażuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Reaktyvios skylių transportinės medžiagos perovskitų saulės elementų stabilumo pagerinimui“, 2020–2022, dr. V. Getautis.
- LMT mokslininkų grupių projektas „3D struktūros skyles transportuojančios medžiagos efektyviems bei stabiliams perovskitiniams saulės elementams (3D HTM)“, 2019–2022, dr. M. Daškevičienė.

Apgintos disertacijos

- A. Magomedov, Karbazolo ir hidrazono fragmentus turinčios skylės transportuojančios medžiagos: sintezė, savybės ir pritaikymas perovskitiniuose saulės elementuose, 2020-03-20, vadovas dr. V. Getautis.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; US; OA] Al-Ashouri, Amran; Köhnen, Eike; Li, Bor; Magomedov, Artiom; Hempel, Hannes; Caprioglio, Pietro; Márquez, José A.; Vilches, Anna Belen Morales; Kasparavicius, Ernestas; Smith, Joel A.; Phung, Nga; Menzel, Dorothee; Grischek, Max; Kegelmann, Lukas; Skroblin, Dieter; Gollwitzer, Christian; Malinauskas, Tadas; Jošt, Marko; Matič, Gašper; Rech, Bernd; Schlattmann, Rutger; Topič, Marko; Korte, Lars; Abate, Antonio; Stannowski, Bernd; Neher, Dieter; Stolterfoht, Martin; Unold, Thomas; Getautis, Vytautas; Albrecht, Steve. Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with >29% efficiency by enhanced hole extraction // *Science*. Washington, DC: American Association for the Advancement of Science. ISSN 0036-8075. eISSN 1095-9203. 2020, vol. 370, iss. 6522, p. 1300-1309. DOI: 10.1126/science.abd4016. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 47,728; AIF: 6,440; IF/AIF: 7,411; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,033]
- [S1; DE; OA] Jošt, Marko; Lipovšek, Benjamin; Glažar, Boštjan; Al-Ashouri, Amran; Brecl, Kristijan; Matič, Gašper; Magomedov, Artiom; Getautis, Vytautas; Topič, Marko; Albrecht, Steve. Perovskite solar cells go outdoors: field testing and temperature effects on energy yield // *Advanced Energy Materials*. Weinheim: Wiley-VCH. ISSN 1614-6832. eISSN 1614-6840. 2020, vol. 10, iss. 25, art. no. 2000454, p. 1-11. DOI: 10.1002/aenm.202000454. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 29,368; AIF: 6,424; IF/AIF: 4,571; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,100]
- [S1; GB] Daskeviciute, Sarune; Momblona, Cristina; Rakstys, Kasparas; Sutanto, Albertus Adrian; Daskeviciene, Marytė; Jankauskas, Vygtintas; Gruodis, Alytis; Bubniene, Giedre; Getautis, Vytautas; Nazeeruddin, Mohammad Khaja. Fluorene-based enamines as low-cost and dopant-free hole transporting materials for high performance and stable perovskite solar cells // *Journal of Materials Chemistry A*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-7488. eISSN 2050-7496. 2021, vol. 9, iss. 1, p. 301-309. DOI: 10.1039/D0TA08452B. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 12,732; AIF: 6,842; IF/AIF: 1,860; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,100]
- [S1; US; OA] Rakstys, Kasparas; Paek, Sanghyun; Drevilkauskaitė, Aida; Kanda, Hiroyuki; Daskeviciute, Sarune; Shibayama, Naoyuki; Daskeviciene, Maryte; Gruodis, Alytis; Kamarauskas, Egidijus; Jankauskas, Vygtintas; Getautis, Vytautas; Nazeeruddin, Mohammad Khaja. Carbazole-terminated isomeric hole transporting materials for perovskite solar cells // *ACS Applied Materials & Interfaces*. Washington: American Chemical Society. ISSN 1944-8244. eISSN 1944-8252. 2020, vol. 12, iss. 17, p. 19710-19717. DOI: 10.1021/acsami.9b23495. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 9,229; AIF: 7,125; IF/AIF: 1,295; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,083]
- [S1; DE] Vaitukaitytė, Deimantė; Al-Ashouri, Amran; Daškevičienė, Marytė; Kamarauskas, Egidijus; Nekrasovas, Jonas; Jankauskas, Vygtintas; Magomedov, Artiom; Albrecht, Steve; Getautis, Vytautas. Enamine-based cross-linkable hole-transporting materials for Perovskite solar cells // *Solar RRL*. Weinheim: Wiley-VCH. ISSN 2367-198X. 2021, vol. 5, iss. 1, art. no. 2000597, p. 1-6. DOI: 10.1002/solr.202000597. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 8,582; AIF: 6,636; IF/AIF: 1,293; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,111]
- [S1; GB] Steponaitis, Matas; La-Placa, Maria-Grazia; Kaya, İsmail Cihan; Bubniene, Giedre; Jankauskas, Vygtintas; Daskeviciene, Maryte; Sessolo, Michele; Malinauskas, Tadas; Bolink, Henk J.; Getautis, Vytautas. Enamine-based hole transporting materials for vacuum-deposited perovskite solar cells // *Sustainable Energy & Fuels*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 2398-4902. 2020, vol. 4, iss. 10, p. 5017-5023. DOI: 10.1039/D0SE00728E. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 6,367; AIF: 6,842; IF/AIF: 0,930; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,100]

Patentai, patentinės paraiškos

Tarptautiniai patentai

- [N3; JP] Gratia, Paul (išrad.); Nazeeruddin, Mohammad Khaja (išrad.); Graetzel, Michael (išrad.); Getautis, Vytautas (išrad.); Magomedov, Artiom (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Daskeviciene, Maryte (išrad.). Small molecule hole transporting material for optoelectronic and photoelectrochemical devices: Japan patent; assignees: Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Kaunas University of Technology. JP 6737798 B2. 2020-08-12. [Espacenet] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,568]
- [N2; US] Gratia, Paul (išrad.); Nazeeruddin, Mohammad Khaja (išrad.); Graetzel, Michael (išrad.); Getautis, Vytautas (išrad.); Magomedov, Artiom (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Daskeviciene, Maryte (išrad.). Small molecule hole transporting material for optoelectronic and photoelectrochemical devices: United States patent;

assignees: Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Kaunas University of Technology. US 10680180 B2. 2020-06-09. [USPTO Patent Full-text and Image Database; Espacenet] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,568]

- [N4; DE] Köhnen, Eike (išrad.); Al-Ashouri, Amran (išrad.); Jost, Marko (išrad.); Albrecht, Steve (išrad.); Magomedov, Artiom (išrad.); Getautis, Vytautas (išrad.); Roß, Marcel (išrad.); Kegelmann, Lukas (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.). Perowskit-Mehrfachsolarzelle mit Multischichtsystem als Verbindungsschicht; applicants: Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie Gesellschaft mit beschränkter Haftung, Kaunas University of Technology. DE 102019116851 B3. 2020-11-05. [Espacenet; DEPATISnet] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,333]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. V. Getautis – LMT ir LMA ekspertas, MITA Technologinės plėtros komiteto narys.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. T. Malinauskas – Medžiagų mokslininkų draugijos „Materials Research Society“, JAV chemikų draugijos „American Chemical Society“ ir Europos medžiagų mokslininkų draugijos „European Materials Research Society“ narys.
- Dr. A. Magomedov 12-ojoje tarptautinėje konferencijoje „HOPV20“ (Londonas, Jungtinė Karalystė) hibridinių ir organinių saulės elementų tematika atiteko geriausio e. stendinio pranešimo „Perovskitų fundamentinės savybės“ įvertinimas.
- Dokt. Š. Daškevičiūtė LMA 10-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ pripažinta geriausio pranešimo autore už pranešimą „Naujų zondų sintezė ir jų pritaikymas merkaptaminorūgščių atpažinimui“ (fizinių mokslų sritis).
- Dokt. A. Ilčiukaitė LMA 10-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ pripažinta geriausio pranešimo autore už pranešimą „Fluoreno klasės puslaidininkiai efektyviems hibridiniams Saulės elementams“ (fizinių mokslų sritis).
- Dr. A. Magomedov ir dokt. E. Kasparavičius – „Technorama-2020“ pagrindinio prizo laimėtojai.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. V. Getautis, Mokslo ritmu: pasaulinis rekordas atsinaujinančios energetikos srityje, 2020-11-06, Delfi.lt video.
- Dr. V. Getautis, Rekordiška efektyvūs saulės elementus išradusio KTU profesoriaus Vytauto Getaučio darbą publikuos žurnalas „Science“, 2020-11-25, portalas lrt.lt / Mokslas ir IT; 2020-11-24, portalas 15min.lt / Mokslas.IT.
- Dr. V. Getautis, Lietuvos mokslininkai. Vytautas Getautis. Chemikas, 2020-10-19, YouTube.com.
- Dr. V. Getautis, LRT Metų apdovanojimai – metų atradimas, LRT televizija.
- Dr. V. Getautis, Saulės elementai keičia pasaulį: lietuviams jau priklauso vienas pasaulinis rekordas, Delfi.lt.
- Dr. V. Getautis, dr. T. Malinauskas, A. Magomedov, E. Kasparavičius, KTU su vokiečiais sukurta medžiaga aprašoma prestižiniame žurnale „Science“, 2020-12-12, Verslo žinios, portalas vz.lt.
- Dr. V. Getautis, dr. T. Malinauskas, Kaip KTU sumušė dar vieną rekordą ir sukėlė didelę sensaciją mokslo bendruomenėje, 2020-04-14, portalas technologijos.lt.

10. Pažangiosios aplinkosaugos technologijos

Mokslo kryptys

T 004 Aplinkos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas dr. D. Martuzevičius

Tyrėjai: dr. D. Čiužas, dr. G. Denafas, dr. D. Jankūnaitė, dr. V. Kaunelienė, dr. L. Kliučininkas, dr. E. Krugly, dr. T. Prasauskas, dr. I. Stasiulaitienė, dr. M. Tichonovas, dr. I. Urniežaitė

Podoktorantūros stažuotojas dr. V. Abromaitis

Doktorantai: I. Dabašinskaitė, A. Grybauskas, M. Meišutovič-Akhtarjeva, S. Misevičius, T. Mumladze, O. Pitak, P. Ravikumar, Z. Sarwar, A. Sholokhova, A. Šleiniūtė, A. Bučinskas, M. Tatarjants.

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Užteršto oro, vandens, dirvožemio valymas ir išteklių atgavimas nano, bio ir kitais pažangiais technologiniais metodais. Atliekų perdirbimas ir vertingų medžiagų atgavimas naudojant aplinkai draugiškus procesus. Skaitmeninis ir eksperimentinis teršalų skaidymo / koncentravimo procesų modeliavimas. Procesų eko-efektyvumo vertinimas, analizė, projektavimas ir valdymas.

Tyrėjai įgyvendina oro teršalų formavimo tyrimus technologiniuose procesuose (pramonės, energetikos), teršalų sulaikymo technologijos tyrimus ir kūrimą, teršalų pernašą aplinkos ore ir skverbimąsi į pastatus, patalpų oro kokybės tyrimus, oro valymo technologijas. Svarbi tyrimų dalis susijusi su nanotechnologijų taikymu oro kokybės gerinimui. Oro filtravimui skirtos nanopluoštinės medžiagos formuojamos elektrinio verpimo ir terminio elektrinio verpimo metodais. Pirmuoju atveju inovatyvių struktūrų medžiagos yra formuojamos derinant skirtingus polimerus ir tirpiklius, antruoju – pluoštai formuojami betirpikliu būdu. Tyrimų metu analizuojama suformuotų pluoštų struktūra, polimerų koncentracijos, tirpiklių sistemos sudėtys, polimero lydymosi temperatūros bei elektrinio verpimo parametrų įtaka pluošto formavimuisi. Tiriamos nanokatalizatoriaus formavimo galimybės elektrinio verpimo būdu, siekiant naudoti jį kompleksinei oro valymo technologijai.

Vandens ir nuotekų technologijų srityje kuriamos didelio efektyvumo technologijos, paremtos plazminių išlydžių generuojamų radikalų panaudojimu nuotekų dumblo nukenksminimui ir denitrifikacijos procesų intensyvinimui. Vystomos biosorbcijos metodais grįstos technologijos probleminių medžiagų iš vandens šalinimui. Ši tematika susijusi su darniosios raidos aplinkosauginiais aspektais. Antropogeninio dumblo ir jo produktų taršos mažinimas lėtina eutrofikacijos procesus, dumblas gali būti papildomu biudžių energijos šaltiniu.

Atliekų ir išteklių atgavimo technologijų srityje kuriami įvairių pavojingų atliekų (medicininų, automobilinių, gyvsidabrio turinčių) susidarymo prognostiniai modeliai, kuriuose derinami įvairūs statistinės analizės metodai (daugialypės linijinės regresijos, atraminio vektoriaus, laiko eilučių ir dirbtinių neuronų tinklo). Analizuojamos išteklių atgavimo iš sąvartynų techninės ir ekonominės galimybės, formuojamas sprendimų priėmimo mechanizmas, tiriama sąvartynų smulkiosios frakcijos sudėtis, įskaitant sunkiuosius metalus ir mikroplastikus. Atliekami eksperimentiniai tyrimai vertingų medžiagų atgavimo iš daugiasluoksnių kompozitų atliekų technologijų kūrimui.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- COST veikla CA17136 „Patalpų oro taršos tinklas“, 2018–2022, dr. V. Kaunelienė.
- COST veikla CA15115 „Išteklių išgavimas iš europinės antroposferos“, 2016–2020, dr. G. Denafas.
- Švedijos instituto finansuojamas projektas 02474/2019 „Baltijos jūros regiono klimato kaitos darbotvarkė (BSRCCC)“, 2019–2020, dr. L. Kliučininkas.

Nacionaliniai

- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 veiklos „Aukšto lygio tyrėjų grupių vykdomi moksliniai tyrimai“ projektas „Inovatyvus pažangios terapijos konstruktas sąvarinės kremzlės regeneracijai (ICAR)“, 2017–2021, dr. D. Martuzevičius.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės J05-LVPA-K „Intelektas. Bendri mokslo-verslo projektai“ projektas „UAB „Tavira“ investicijos į MTEP ir infrastruktūrą“, 2017–2020, dr. D. Jankūnaitė.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Sutinklintos celiuliozės biokompozitai (Cellink)“, 2019–2021, dr. D. Martuzevičius.
- MITA technologinės plėtros projektas „3D nano/mikro pluošto spausdinimo technologijos vystymas ir prototipavimas (Spin3Dp)“, 2019–2020, dr. D. Čiužas.
- MITA technologinės plėtros projektas „Sinergetinės pažangiosios oksidacijos technologijos (SPOT), skirtos valyti užterštą pramoninį ir geriamąjį vandenį, hibridinio prototipo sukūrimas ir testavimas“, 2019–2020, dr. V. Abromaitis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Inovatyvių nano-fotokatalizatorių sintezė ir efektyvumo/taikomumo tyrimas valant sunkiai skaidžiais vaistų likučiais užterštą vandenį (nanoCAT)“, 2020–2022, dr. D. Martuzevičius.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 veiklos „Aukšto lygio tyrėjų grupių vykdomi moksliniai tyrimai“ projektas „Ląsteliniai biojutikliai ant nanopluoštinų matricų – integrali nauja platforma citotoksiniams oro taršos tyrimams (AeroCellTox)“, 2020–2023, dr. D. Martuzevičius.

Užsakovieji MTEP darbai

- Imperial Tobacco Ltd, MTEP darbas SV9-2723 „Naujų tabako kaitinimo gaminių, atsižvelgiant į jų poveikį patalpų oro kokybei, palyginimo metodikos sukūrimas“, 2020–2021, dr. D. Martuzevičius.
- UAB „Nivela“, MTEP darbas SV9-3117 „Geriamojo vandens giluminio valymo ir prisotinimo mikro-makro elementais sistemos kūrimas“, 2020–2021, dr. D. Jankūnaitė.

Apgintos disertacijos

- D. Buivydienė, Pluoštinių medžiagų formavimas lydalo elektroverpimo metodu ir jų taikymas orui filtruoti, 2020-06-23, vadovas dr. L. Kliučininkas.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; US] Paulauskas, R.; Martuzevičius, D.; Patel, R. B.; Pelders, J. E. H.; Nijdam, S.; Dam, N. J.; Tichonovas, M.; Striūgas, N.; Zakarauskas, K. Biogas combustion with various oxidizers in a nanosecond DBD microplasma burner // *Experimental thermal and fluid science*. New York: Elsevier. ISSN 0894-1777. eISSN 1879-2286. 2020, vol. 118, art. no. 110166, p. 1-11. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2020.110166. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,444; AIF: 3,142; IF/AIF: 1,096; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 006] [Indėlis: 0,222]
- [S1; GB] Garbarienė, I.; Garbaras, A.; Masalaite, A.; Ceburnis, D.; Krugly, E.; Kauneliene, V.; Remeikis, V.; Martuzevicius, D. Identification of wintertime carbonaceous fine particulate matter (PM_{2.5}) sources in Kaunas, Lithuania using polycyclic aromatic hydrocarbons and stable carbon isotope analysis // *Atmospheric environment*. Oxford: Elsevier. ISSN 1352-2310. eISSN 1873-2844. 2020, vol. 237, art. no. 117673, p. 1-9. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2020.117673. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,039; AIF: 3,985; IF/AIF: 1,013; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 002, T 004] [Indėlis: 0,375]
- [S1; CH; OA] Burlakovs, Juris; Vincevica-Gaile, Zane; Krievans, Maris; Jani, Yahya; Horttanainen, Mika; Pehme, Kaur-Mikk; Dace, Elina; Setyobudi, Roy Hendroko; Pilecka, Jovita; Denafas, Gintaras; Grinfelde, Inga; Bhatnagar, Amit; Rud, Vasilij; Rudovica, Vita; Mersky, Ronald L.; Anne, Olga; Kriipsalu, Mait; Ozola-Davidane, Ruta; Tamm, Toomas; Klavins, Maris. Platinum group elements in geosphere and anthroposphere: interplay among the global reserves, urban ores, markets and circular economy // *Minerals*. Basel: MDPI. ISSN 2075-163X. 2020, vol. 10, iss. 6, art. no. 558, p. 1-19. DOI: 10.3390/min10060558. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 2,380; AIF: 2,723; IF/AIF: 0,874; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 004, N 012] [Indėlis: 0,050]
- [S1; NL] Sidaraviciute, Ruta; Kavaliunas, Vytautas; Puodziukynas, Linas; Guobiene, Asta; Martuzevicius, Dainius; Andrulevicius, Mindaugas. Enhancement of photocatalytic pollutant decomposition efficiency of surface mounted TiO₂ via lithographic surface patterning // *Environmental technology and innovation*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 2352-1864. 2020, vol. 19, art. no. 100983, p. 1-9. DOI: 10.1016/j.eti.2020.100983. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,356; AIF: 4,999; IF/AIF: 0,671; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 002, T 004] [Indėlis: 0,336]
- [S1; NL] Baloch, Ramen Munir; Maesano, Cara Nichole; Christoffersen, Jens; Banerjee, Soutrik; Gabriel, Marta; Csobod, Éva; de Oliveira Fernandes, Eduardo; Annesi-Maesano, Isabella; Martuzevičius, Dainius (tyrėj.); Krugly, Edvinas (tyrėj.). Indoor air pollution, physical and comfort parameters related to schoolchildren's health: data from the European SINPHONIE study // *Science of the total environment*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0048-9697. eISSN 1879-1026. 2020, vol. 739, art. no. 139870, p. 1-14. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.139870. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 6,551; AIF: 4,313; IF/AIF: 1,518; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 004] [Indėlis: 0,016]
- [S1; NL] Yousef, Samy; Tatariants, Maksym; Bendikiene, Regita; Kriūkienė, Rita; Denafas, Gintaras. A new industrial technology for closing the loop of full-size waste motherboards using chemical-ultrasonic-mechanical treatment // *Process safety and environmental protection*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0957-5820. eISSN 1744-3598. 2020, vol. 140, p. 367-379. DOI: 10.1016/j.psep.2020.04.002. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,966; AIF: 5,707; IF/AIF: 0,870; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 004] [Indėlis: 0,400]
- [S1; GB] Yousef, Samy; Tatariants, Maksym; Tichonovas, Martynas; Kliučininkas, Linas; Lukošūtė, Stasė Irena; Yan, Libo. Sustainable green technology for recovery of cotton fibers and polyester from textile waste // *Journal of cleaner production*. Oxford: Elsevier. ISSN 0959-6526. eISSN 1879-1786. 2020, vol. 254, art. no. 120078, p. 1-11. DOI: 10.1016/j.jclepro.2020.120078. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 7,246; AIF: 5,584; IF/AIF: 1,297; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 004, T 008, T 006] [Indėlis: 0,498]
- [S1; CH; OA] Yousef, Samy; Sarwar, Zahid; Šereika, Justas; Striūgas, Nerijus; Krugly, Edvinas; Danilovas, Paulius Pavelas; Martuzevicius, Dainius. A new industrial technology for mass production of graphene/PEBA membranes for CO₂/CH₄ selectivity with high dispersion, thermal and mechanical performance // *Polymers*. Basel: MDPI. ISSN 2073-4360. 2020, vol. 12, iss. 4, art. no. 831, p. 1-15. DOI: 10.3390/polym12040831. [Science Citation Index

Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 3,426; AIF: 3,752; IF/AIF: 0,913; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 006, T 004] [Indėlis: 0,355]

- [S1; CH; OA] Kavaliunas, Vytautas; Krugly, Edvinas; Sriubas, Mantas; Mimura, Hidenori; Laukaitis, Giedrius; Hatanaka, Yoshinori. Influence of Mg, Cu, and Ni dopants on amorphous TiO₂ thin films photocatalytic activity // Materials. Basel: MDPI. ISSN 1996-1944. 2020, vol. 13, iss. 4, art. no. 886, p. 1-14. DOI: 10.3390/ma13040886. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 3,057; AIF: 5,274; IF/AIF: 0,579; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 002, T 004] [Indėlis: 0,166]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. G. Denafas – MITA ekspertų tarybos narys.
- Dr. D. Martuzevičius – EU-LCI ekspertų grupės narys (EK generalinis direktoratas: Vidaus rinka, pramonė, verslumas ir MVĮ), Lietuvos standartizacijos departamento TK 83 „Cheminių ir biologinių veiksnių darbo vietoje vertinimas“ narys, tarptautinės asociacijos „Patalpų oras ir klimatas“ narys.
- Dr. L. Kliučininkas – programos „Europos horizontas“ komiteto „Klimatui neutralūs ir išmanūs miestai“ nacionalinis atstovas.
- Dr. V. Kaunelienė – Nacionalinio klimato kaitos komiteto narė, tarptautinės asociacijos „Patalpų oras ir klimatas“ narė.
- Dr. E. Krugly – Amerikos chemijos asociacijos narys, Pasaulinės biomedžiagų asociacijos narys.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. G. Denafas – mokslo leidinio „Environmental Research, Engineering and Management“ asocijuotasis redaktorius, mokslo leidinių „Environmental Problems“, „PNRPU Bulletin, Applied Ecology. Urban Development“ redakcinės kolegijos narys.
- Dr. L. Kliučininkas – mokslo leidinio „Sustainability“ redakcinės kolegijos narys.

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. D. Martuzevičius, Vilniaus savivaldybė ir KTU mokslininkai tiria gautas priemones medikams, 2020-04-03, portalas 15min.lt. [15 min.](#)
- Dr. D. Martuzevičius, D. Martuzevičiaus interviu apie apsauginių kaukių tyrimus, 2020-04-08, lrt.lt radijo laida „Ryto garsai“.
- Dr. D. Martuzevičius, Neužtenka dėvėti, reikia prižiūrėti: kaip teisingai rūpintis savo apsaugine veido kauke?, 2020-04-10, LRT laida „Labas rytas, Lietuva“.
- Dr. D. Martuzevičius, Mokslininkai patikrino respiratorius: kokybė prastesnė nei iki pandemijos, 2020-04-12, portalas lrt.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, Video reportažas su D. Martuzevičiumi apie apsauginių priemonių testavimą, 2020-04-12, LRT žinių laida „Panorama“.
- Dr. D. Čiužas, V. Kaunelienė, Mokslininkė: 3D spausdintuvai – tik gerai vėdinamoje patalpoje. 2020-05-06, lrt.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, Mokslininkai įvardijo, kodėl veido kaukės kelia tiek daug susierzinimo?, 2020-05-08, Delfi TV laida „Delfi diena“.
- Dr. D. Martuzevičius, Profesorius daugiau papasakojo apie kaukių nešiojimą: viena taisyklė yra pati svarbiausia, 2020-05-08, Delfi TV laida „Delfi diena“.
- Dr. D. Martuzevičius, Kare dėl kaukių įmanoma viskas: brukamas niekalas ir falsifikuojami dokumentai, 2020-05-14, portalas lrt.lt / LRT tyrimas.
- Dr. V. Kaunelienė, Aplinkosauga: lyderystės turi imtis visuomenė, 2020-06-05, portalas Statybunaujienos.lt.
- Dr. V. Kaunelienė, Kokie aplinkosaugos iššūkiai laukia per ateinančius 10 metų, 2020-06-26, portalas delfi.lt
- Dr. V. Kaunelienė, Oro tarša kasmet lemia 4,2 mln. ankstyvų žmonių mirčių – kaip tai pakeisti?, 2020-07-09, portalas delfi.lt
- Dr. D. Martuzevičius, Prof. D. Martuzevičius: jeigu žmogus nori pats saugotis nuo išorės poveikio, tada geriau naudoti ne kaukę, 2020-08-02, portalas delfi.lt.
- Dr. V. Kaunelienė, Antibiotikai, hormonai, analgetikai: nepageidaujama šių vaistų dozė kasdien gauname su maistu, 2020-08-18, portalas 15min.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, KTU mokslininkas apie šalies mokyklų oro kokybę: laukia iššūkiai, 2020-08-20, dienraštis „Kauno diena“.
- Dr. V. Kaunelienė, Diena be automobilio – tik pakalbėti, bet nieko nedaryti?, 2020-09-05, radijo laida Žinių radijas.

- Dr. G. Denafas, Kokios atliekų deginimo Latvijoje perspektyvos lyginant su patirtimi Lietuvoje?, 2020-09-28, Jelgavos miestui skirtas audioreportažas rusų kalba bendrovei „JSC Komunikacija ir konsultantai“.
- Dr. V. Kaunelienė, KTU aplinkosaugininkė apie mirtinai pavojingus ftalatus: jų rasime higienos priemonėse, kvepaluose ir vaikų žaisluose, 2020-10-01, portalas 15min.lt.
- Dr. V. Kaunelienė, Buitinė chemija: kokį pavojų slepia dailios etiketės?, 2020-10-03, portalas 15min.lt, video reportažas.
- Dr. D. Martuzevičius, KTU prof. D. Martuzevičius: virusas neplistų, jeigu kaukes dėvėtume tinkamai, 2020-10-07, portalas 15min.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, Lietuvos mokslininkų asociacijos narys: skubotai liejant lėšas į mokslą daug išsitaškys, 2020-10-19, portalas 15min.lt
- Dr. D. Martuzevičius, Eksperimentas: kuri apsauginė kaukė efektyvesnė – vienkartinė ar daugkartinė?, 2020-10-25, portalas lrt.lt; 2020-11-29, portalas lrt.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, Lietuvių mokslininkai tyrė, ar medžiaginės kaukės apsaugo nuo koronaviruso: kai kurių efektyvumas siekia vos 20 proc., 2020-11-11, portalas lrt.lt.
- Dr. D. Martuzevičius, Iš ko rinktis netrūksta, tačiau apsaugo ne visos: kriterijai kokybiškoms apsauginėms veido kaukėms, 2020-12-04, LRT televizijos laida „Vartotojų kontrolė“.
- Dr. D. Martuzevičius, Beveik metai su veido kaukėmis – profesorius paaiškino, kodėl neturėtume abejoti jų veiksmingumu, 2020-12-24, portalas lrt.lt/LRT faktai.
- Dr. D. Martuzevičius, Fejerverkai. Deja, ne tik grožis, bet ir didžiulė tarša, 2020-12-30, portalas diena.lt.

11. Polimerų tyrimai

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedančioji tyrėja dr. R. Rutkaitė

Tyrėjai: dr. O. Baniukaitienė, dr. J. Bendoraitienė, dr. V. Navikaitė-Šnipaitienė, dr. L. Pečiulytė, dr. V. Valeika, dr. P. P. Danilovas, dr. M. Bulota, D. Liudvinavičiūtė, K. Almonaitytė

Doktorantai: K. Almonaitytė, D. Liudvinavičiūtė, A. Krinickaitė, S. Sriubaitė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: atliekami gamtinių polimerų modifikavimo ir taikymo tyrimai; tyrinėjamos dispersinės sistemos, polimerinių kompleksų susidarymas, bioaktyvių medžiagų imobilizavimas gamtiniuose ir modifikuotuose biopolimeruose; kuriamos veikliosios maisto pakavimo medžiagos, mikroteršalų sorbentai; sintetiniai chromatografiniai sorbentai, tiriamas jų taikymas baltymų chromatografijai, fermentų imobilizavimui; kuriamos naujos medžiagos audinių inžinerijai ir tvarsčiai žaizdoms gydyti. Taip pat kuriami inovatyvūs kosmetikos preparatai; vystomos bioplastikų ir biokompozitų gamybos technologijos, kuriami bioskaidūs plastikiniai gaminiai, atliekami biokompozitų formavimo iš gamtinės kilmės medžiagų tyrimai bei kuriamos mažiau taršios odų išdirbimo technologijos, sprendžiamos odų išdirbimo atliekų panaudojimo problemos.

Atliekant mokslinius tyrimus projekte „Chemijos inžinerijos ir bioprocesų kompetencijos centras (CIBKC)“, chemiškai ir fiziškai modifikuojant gamtinius polisacharidus, siekiama gauti termoplastinių savybių medžiagas ir jų kompozitus, skirtus injekcinio liejimo būdu formuojamų gaminių gamybai. Šių tyrimų rezultatai gali prisidėti prie žiedinės (beatliekinės) ekonomikos plėtros Lietuvoje ir kitose šalyse, plačiai prieinamas atsinaujinantis gamtinės žaliavos panaudojant aukštos pridėtinės vertės produktų gamybai, pakeičiant sintetines žaliavas. Viešinant šių tyrimų rezultatus ugdomas visuomenės aplinkosauginis sąmoningumas.

Lietuvos ir Prancūzijos programos „Žiliberas“ projekte BIOPOLBIO tyrimai vykdyti bendradarbiaujant su Bordo universiteto mokslininkais. Gamtinius polisacharidus modifikuojant cheminiais ir fizikiniais metodais gautos naujos funkcinės biopolimerinės matricos. Įvertinus ir atrinkus bioaktyvius gamtinės kilmės komponentus, ištirta jų sąveika su modifikuotais polisacharidais. Bioaktyvių junginių imobilizavimas tyrinėtas sudarant emulsijas, bioaktyvių medžiagų ir polisacharidų daleles formuojant liofilizavimo ir purkštuvinio džiovinimo metodais. Ištirtos gautų medžiagų antioksidacinės ir antimikrobinės savybės, įvertintos galimybės šias medžiagas panaudoti, kuriant ekologiškus biopesticidus ir bioaktyvių savybių pakuočių komponentus.

Vykdyti projektai

Tarptautiniai

- Tarptautinė Lietuvos–Prancūzijos programos „Žiliberas“ projektas „Naujų bioaktyvių medžiagų biopolimerų pagrindu kūrimas“, 2019–2021, dr. R. Rutkaitė.
- COST veikla CA19124 „Ateities pakuotės žiedinei ir tvariai maisto tiekimo grandinei“, 2020–2024, dr. R. Rutkaitė.
- COST veikla CA16110 „Žmogui patogeninių mikroorganizmų kontrolė augalų produkcijos sistemose“, 2017–2020, dr. P. P. Danilovas.
- COST veikla CA18101 „Raugų biotechnologijos tinklas naujiems, sveikesniems ir tvaresniems maisto produktams ir bioprocesams“, 2019–2023, dr. J. Bendoraitienė.

Užsakovieji MTEP darbai

- AB „Achema“, MTEP darbas SV9-2827 „Naujo ureazės inhibitoriaus preparato sukūrimas“, 2020, dr. R. Rutkaitė.
- UAB „BS Chemical“, MTEP darbas SV9-2844 „Katijoninio bulvių krakmolo pasižymintio flokuliacinėmis savybėmis gavimas ir reakcijos sąlygų optimizavimas“, 2020, dr. J. Bendoraitienė.
- UAB „BS Chemical“, MTEP darbas SV9-3729 „Vandenvalai skirto gamtinės kilmės katijoninio koagulianto / flokulianto sukūrimas išsaugant krakmolo mikrogranulių struktūrą ir reakcijos sąlygų optimizavimas“, 2020–2021, dr. J. Bendoraitienė.
- UAB „Medicata Filia“, MTEP darbas SV9-2811 „Polimerinio pluošto su įkapsuliuotomis funkcionaliomis medžiagomis, skirtos odos biofarmacijai, gavimas ir tyrimas“, 2020, dr. O. Baniukaitienė.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; NL] Rosliuk, Deimante; Rutkaite, Ramune; Ivanauskas, Liudas; Jakstas, Valdas. Interaction between cross-linked cationic starch microgranules and chlorogenic acid isomers in artichoke and green coffee bean aqueous extracts // Journal of chromatography B. Amsterdam: Elsevier. ISSN 1570-0232. eISSN 1873-376X. 2020, vol. 1160, art. no. 122385, p. 1-7. DOI: 10.1016/j.jchromb.2020.122385. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 3,205; AIF: 4,374; IF/AIF: 0,732; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 5,70; SNIP: 1,027; SJR: 0,729; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005, M 003] [Indėlis: 0,500]
- [S1; NL] Almonaityte, Karolina; Bendoraitiene, Joana; Babelyte, Migle; Rosliuk, Deimante; Rutkaite, Ramune. Structure and properties of cationic starches synthesized by using 3-chloro-2-hydroxypropyltrimethylammonium chloride // International journal of biological macromolecules. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0141-8130. eISSN 1879-0003. 2020, vol. 164, p. 2010-2017. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.08.089. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 6,953; AIF: 5,270; IF/AIF: 1,319; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,50; SNIP: 1,579; SJR: 1,140; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Liudvinaviciute, Dovile; Rutkaite, Ramune; Bendoraitiene, Joana; Klimaviciute, Rima; Dagys, Laurynas. Formation and characteristics of alginate and anthocyanin complexes // International journal of biological macromolecules. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0141-8130. eISSN 1879-0003. 2020, vol. 164, p. 2010-2017. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.07.157. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 6,953; AIF: 5,270; IF/AIF: 1,319; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,50; SNIP: 1,579; SJR: 1,140; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,800]
- [S1; GB] Zadeike, Daiva; Vaitkeviciene, Ruta; Marksa, Mindaugas; Juodeikiene, Grazina; Bendoraitiene, Joana; Bartkiene, Elena; Lele, Vita; Viskelis, Pranas; Bernatoniene, Jurga; Jakstas, Valdas. Structural and functional characterisation of compositionally optimised rice bran and lingonberry dietary fibre-based gepe product enriched with phytochemicals // International journal of food science and technology. Edinburg: John Wiley & Sons. ISSN 0950-5423. eISSN 1365-2621. 2020, vol. 55, iss. 11, p. 3372-3380. DOI: 10.1111/ijfs.14668. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,713; AIF: 4,309; IF/AIF: 0,861; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,90; SNIP: 1,049; SJR: 0,831; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: A 003, M 003, T 005] [Indėlis: 0,400]
- [S1; CH; OA] Yousef, Samy; Sarwar, Zahid; Šereika, Justas; Striūgas, Nerijus; Krugly, Edvinas; Danilovas, Paulius Pavelas; Martuzevicius, Dainius. A new industrial technology for mass production of graphene/PEBA membranes for CO₂/CH₄ selectivity with high dispersion, thermal and mechanical performance // Polymers. Basel: MDPI. ISSN 2073-4360. 2020, vol. 12, iss. 4, art. no. 831, p. 1-15. DOI: 10.3390/polym12040831. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 4,329; AIF: 4,680; IF/AIF: 0,925; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,70; SNIP: 1,200; SJR: 0,770; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 006, T 004] [Indėlis: 0,568]
- [S1; NL] Palaveniene, Alisa; Songailiene, Kristina; Baniukaitiene, Odeta; Tamburaci, Sedef; Kimna, Ceren; Tihminlioglu, Funda; Liesiene, Jolanta. The effect of biomimetic coating and cuttlebone microparticle reinforcement on the osteoconductive properties of cellulose-based scaffolds // International journal of biological macromolecules. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0141-8130. eISSN 1879-0003. 2020, vol. 152, p. 1194-1204. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2019.10.213. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF:

6,953; AIF: 5,270; IF/AIF: 1,319; Q1 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,50; SNIP: 1,579; SJR: 1,140; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,574]

- [S1; GB; OA] Bartkiene, Elena; Zokaityte, Egle; Lele, Vita; Sakiene, Vytaute; Zavistanaviciute, Paulina; Klupsaite, Dovile; Bendoraitiene, Joana; Navikaite-Snipaitiene, Vesta; Ruzauskas, Modestas. Technology and characterisation of whole hemp seed beverages prepared from ultrasonicated and fermented whole seed paste // International journal of food science and technology. Hoboken: Wiley. ISSN 0950-5423. eISSN 1365-2621. 2020, vol. 55, no. 1, p. 406-419. DOI: 10.1111/ijfs.14285. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; BIOSIS Previews] [IF: 3,713; AIF: 4,309; IF/AIF: 0,861; Q2 (2020, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 4,90; SNIP: 1,049; SJR: 0,831; Q1 (2020, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005, A 003, A 002] [Indėlis: 0,222]

Patentai, patentinės paraiškos

Tarptautiniai patentai

- [N2; US] Danilovas, Paulius Pavelas (išrad.). Method of disinfection of drinking water using ozone and silver cations: United States patent; assignee: Kaunas University of Technology. US 10597315 B2. 2020-03-24. [USPTO Patent Full-text and Image Database; Espacenet] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. R. Rutkaitė – MITA ekspertė, M-ERA.NET programos ekspertė, Europos mokslo fondo (ESF) ekspertė, programos „Horizontas 2020“ ekspertė, programos „Horizontas 2020“ projektų recenzentė (MSCA Innovative training Networks (ITN) ir Bio-based Industries Joint Undertaking (BBI JU)).
- Dr. J. Bendoraitienė – Nacionalinio akreditacijos biuro (NAB) techninė ekspertė, LVPA ekspertė.
- Dr. P. P. Danilovas – MITA, LVPA ekspertas.
- Dr. L. Pečiulytė – LVPA ekspertė.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. J. Bendoraitienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos (LBTA) narė.
- Dr. O. Baniukaitienė – Chemijos pramonės draugijos (Society of Chemical Industry (SCI)) narė.
- Dr. R. Rutkaitė – Tarptautinės inžinierių asociacijos (International Association of Engineers (IAENG)) ir Tarptautinės inžinierių asociacijos Chemijos inžinerijos draugijos (IAENG Society of Chemical Engineering) narė, Lietuvos biotechnologų asociacijos (LBTA) narė.
- Dr. V. Valeika – mokslo leidinių „History of Engineering Sciences and Institutions of Higher Education“ (Latvija), „Bulletin of the Kyiv National University of Technologies and Design“ (Ukraina) redkolegijos narys, tarptautinės mokslinės konferencijos „Leather and Fur in the XXI Century: Technology, Quality, Environmental Management, Education. XVI International Scientific-Practical Conference“, vykusios lapkričio 11-13 d., Ulan-Ude, Rusija, organizacinio komiteto narys.
- Dokt. K. Almonaitytė LMA 13-ojoje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Bioateitis: gamtos ir gyvybės mokslų perspektyvos“ apdovanota kaip geriausio pranešimo trečiosios vietos autorė už pranešimą „Modifikuotų (3-chlor-2-hidroksipropil) trimetilamonio chloridu krakmolo darinių naudojimas vandenvaloje“ (biochemijos ir biotechnologijos sekcija).

Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. O. Baniukaitienė, KTU chemikų sukurti produktai naudojami farmacijos, kosmetikos srityse ir net audinių inžinerijoje, 2020-02-05, žurnalas „Kuo būti“.
- Dr. O. Baniukaitienė, Specialistė apie dezinfekcijos būdus: pirmiausia svarbu laikytis asmens higienos taisyklių, 2020-03-10, straipsnis portale lrt.lt.
- Dr. J. Bendoraitienė, Plačiai buityje paplitę klajai ne tik gelbėja, bet ir sukelia problemas: ką daryti sulipus pirštams ar jiems patekus į akis?, 2020-02-03, LRT televizijos laida „Vartotojo kontrolė“.
- Dr. P. P. Danilovas, Plastiko maišelius toliau stumia į užribį: už jų dalybas žada solidžias baudas, 2020-01-28, portalas lrytas.lt.
- Dr. P. P. Danilovas, Banko kortelė arba butelio dangtelis – tiek plastiko per savaitę patenka į žmogaus organizmą, 2020-03-09, LRT televizijos laida „Klauskite daktaro“.

12. Sintetinė biologija ir biotechnologija

Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas dr. N. Malys

Tyrėjai: E. Augustinienė, dr. I. Jonuškienė, I. Kutraitė, P. Matulis, dr. M. Syrpas, dr. E. Valančienė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: mikroorganizmų genų ekspresija ir metabolizmas, bioinformacinis ir eksperimentinis genų ekspresijos reguliavimo procesų ir mažamolekulinių junginių metabolizmo tyrimas ir modeliavimas taikant bioinformacinius, skaitmeninius ir eksperimentinius metodus, ląstelinių biojutiklių paieška, kūrimas ir pritaikymas mažamolekulinių junginių nustatymui ir kiekybinei analizei, sintetinių metabolinių kelių modeliavimas, kūrimas ir pritaikymas aukštos vertės mažos molekulinės masės biomedžiagų biosintezei.

Siekiant sumažinti priklausomybę nuo iškastinių resursų ir apriboti neigiamus klimato kaitos padarinius, yra būtina rasti naujas įvairių produktų, tarpe jų ir biomedžiagų bei jų platformos cheminių junginių, gamybos technologijas. Žemės ūkio ir maisto gamybos atliekų naudojimas mikroorganizmų fermentacijos procese gaminant bioenergiją ir biomedžiagas yra patraukli gamybos technologija tiek nacionaliniame, tiek globaliame lygmenyje. Pastaruoju metu daug dėmesio yra skiriama mikroorganizmų pagrindu paremtų biosintezės ir atliekų perdirbimo technologijų vystymui bei sintetinės biologijos panaudojimui šių priemonių įgyvendinimui. Tačiau, nors daugelis biologinių procesų turi potencialo pakeisti tradicinius cheminės sintezės būdus, jų produktyvumas dažnai yra nepakankamas ir turi būti optimizuojamas iki ekonomiškai našaus proceso. Šiai problemai spręsti yra reikalinga įdiegti mažų kaštų ir didelio našumo mikrobiologinės inžinerijos strategijas. KTU 2019 metais įkurtas Bioprocėsų tyrimų centras siekia sukurti ir pritaikyti sintetine biologija pagrįstas technologijas, kurios pagreintų mažos molekulinės masės junginių, tokių kaip fenolinės, itakono ir kitos rūgštys, nustatymą aplinkoje ir mikroorganizmų ląstelėse bei naujų biotechnologinių procesų vystymą ir pritaikymą aukštos vertės biomedžiagų biosintezei.

Vykdyti projektai

Nacionaliniai

- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 01.2.2-LMT-K-718 veiklos „Mokslininkų iš užsienio pritraukimas vykdyti mokslinius tyrimus“ projektas „Genetiškai užkoduotų biosensorių kūrimas ir taikymas kaip priemonė natūralių junginių kiekybinei analizei siekiant pagerinti biorafinavimo schemas“, 2019–2023, dr. N. Malys.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; CH; OA] Valanciene, Egle; Jonuskiene, Ilona; Syrpas, Michail; Augustiniene, Ernesta; Matulis, Paulius; Simonavicius, Andrius; Malys, Naglis. Advances and prospects of phenolic acids production, biorefinery and analysis // Biomolecules. Basel: MDPI. ISSN 2218-273X. 2020, vol. 10, iss. 6, art. no. 874, p. 1-41. DOI: 10.3390/biom10060874. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,082; AIF: 4,696; IF/AIF: 0,869; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 2,30; SNIP: 1,078; SJR: 1,614; Q3 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. I. Jonuškienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos valdybos narė, Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narė.
- Dr. M. Syrpas – Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) narys.

13. Sintetinė organinė chemija

Mokslo kryptys

N 003 Chemija

Tyrėjai

Vedantysis tyrėjas habil. dr. A. Šačkus

Tyrėjai: dr. E. Arbačiauskienė, dr. V. Kederienė, dr. S. Krikštolaitytė, dr. V. Malinauskienė, dr. V. Martynaitis, dr. J. Solovjova, A. Bieliauskas, dr. S. Burinskas, dr. M. Dagilienė, M. Iškauskienė, dr. N. Kleizienė, dr. V. Milišiūnaitė, dr. G. Ragaitė, dr. R. Tamulienė

Doktorantai: J. Bruzgulienė, V. Dargytė, K. Dzedulionytė, E. Gudelis, G. Matulevičiūtė, E. Plytninkienė, B. Razmienė, U. Šachlevičiūtė, A. Urbonavičius, V. Varnelis, G. Varvuolytė

Moksliniai tyrimai

Tyrimų kryptys: Organinės sintezės metodologijų vystymas. Biologiškai aktyvių medžiagų kūrimas ir sintezė. Funkcinių medžiagų kūrimas ir sintezė. Organinių junginių struktūros tyrimai.

Tyrimai buvo vykdomi šiose tematikose: funkcinių heterociklinių junginių kūrimas ir tyrimai; naujų sintetinių aminorūgščių darinių, skirtų DNR-koduojamoms bibliotekoms, kūrimas ir tyrimai; organinių junginių struktūros tyrimai, taikant branduolių magnetinio rezonanso spektroskopiją. Atliekant tyrimus heterociklinių junginių chemijos srityje, bendradarbiaujant su Palackio universiteto (Čekija) mokslininkais, panaudojant Pd-katalizuojamas reakcijas ir jodo inicijuojamą ciklizacijos reakciją iš 3-alkinil-1-fenil-1*H*-pirazol-4-karbaldehidų gauti įvairiai pakeisti 2*H*-pirazolo[4,3-*c*]piridinai, ištirtos jų antivėžinės savybės. Toliau tiriama fluorescuojančių agentų panaudojimas ląstelių sandaros ir raidos vizualizacijai. Susintetinti pirazolo ir 3*H*-indolo fragmentus turintys dariniai ir nustatytos jų fotodinaminės savybės prieš odos vėžio ląsteles. Pradėti vykdyti pirazolo darinių dalyvavimo multikomponentinėse reakcijose tyrimai. Aminorūgščių chemijos srityje buvo sukurtos naujos suvaržytos konformacijos aminorūgštys, savo struktūroje turinčios farmakoforinius struktūrinius fragmentus. Sukurti metodai, įgalinantys gauti sintetines mažos molekulinės masės aminorūgštis, kurių enantiomerinis grynumas yra daugiau nei 96 proc. Enantiomerinis medžiagų grynumas buvo nustatomas taikant chiralinės skystinės chromatografijos metodus. Susintetintos aminorūgštys buvo praktiškai panaudotos kuriant DNR-koduojamas biologiškai aktyvių molekulių bibliotekas. Taikant branduolių magnetinio rezonanso metodus, tokius kaip ^1H , ^{13}C -HSQC, ^1H , ^{13}C -HMBC, ^1H , ^{15}N -HMBC, ^1H , ^1H -NOESY, 1,1-ADEQUATE ir LR-HSQMBC buvo tiriama sudėtingų heterociklinių sistemų struktūra, atliekama visų molekules sudarančių žiedų atomų branduolių identifikacija. Tiriant selenazolų struktūrą, buvo taikoma ^{77}Se -, o fluorintų junginių atveju – ^{19}F -branduolių magnetinio rezonanso spektroskopija.

Mokslo grupės tyrėjai dalyvauja vykdamą projektą "Chemijos inžinerijos ir bioprocesų kompetencijos centras (CIBKC)". Projekto metu, siekiama sukurti ir išvystyti automatizuotą nepertraukiamą srautinį sintezės procesą, skirtą naujiems heterocikliniams junginiams gauti, tam sukuriant ir sukonstruojant srautinių mikrotekatorių sistemą, susidedančią iš atskirai įsigyjamų Syrris kompanijos modulių ir laboratorijoje sukurtų mikrotekatorių, turinčių katalizatoriaus įkrovą. Nepertraukiamos srautinės sintezės technologija, panaudojant į vieną technologinę liniją sujungtus mikrotekatorius, kuriuose bus vykdomi organinių medžiagų reakcijų procesai, įgalins efektyviai ir saugiai gauti naujus heterociklinius junginius.

Vykdyti projektai

Nacionaliniai

- LMT mokslininkų grupių projektas „Naujos pirazolo žiedą turinčios poliheterociklinės sistemos: sintezė, derivatizacija ir funkcinių savybių tyrimas“, 2020–2022, dr. E. Arbačiauskienė.

Užsakovieji MTEP darbai

- Vykdyti MTEP darbai pagal sutartis su Danijos įmone ApS Vipergen.

Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Varvuolytė, Gabrielė; Malina, Lukáš; Bieliauskas, Aurimas; Hošíková, Barbora; Simerská, Helena; Kolářová, Hana; Kleizienė, Neringa; Kryštof, Vladimír; Šačkus, Algirdas; Žukauskaitė, Asta. Synthesis and photodynamic properties of pyrazole-indole hybrids in the human skin melanoma cell line G361 // *Dyes and pigments*. Oxford: Elsevier. ISSN 0143-7208. eISSN 1873-3743. 2020, vol. 183, art. no. 108666, p. 1-12. DOI: 10.1016/j.dyepig.2020.108666. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,613; AIF: 3,831; IF/AIF: 1,204; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 7,10; SNIP: 1,051; SJR: 0,827; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,400]
- [S1; NL] Musio, Biagia; Ragone, Rosa; Todisco, Stefano; Rizzuti, Antonino; Latronico, Mario; Mastrorilli, Piero; Pontrelli, Stefania; Intini, Nicola; Scapicchio, Pasquale; Triggiani, Maurizio; Di Noia, Tommaso; Acquotti, Domenico; Airoldi, Cristina; Assfalg, Michael; Barge, Alessandro; Bateman, Lorraine; Benevelli, Francesca; Bertelli, Davide; Bertocchi, Fabio; Bieliauskas, Aurimas; Borioni, Anna; Caligiani, Augusta; Callone, Emanuela; Čamra, Ales; Cesare Marincola, Flaminia; Chalasani, Dinesh; Consonni, Roberto; Dambruoso, Paolo; Davalli, Silvia; David, Taylor; Diehl, Bernd; Donarski, James; Gil, Ana M.; Gobetto, Roberto; Goldoni, Luca; Hamon, Erwann; Harwood, John S.; Kobrlová, Andrea; Longobardi, Francesco; Luisi, Renzo; Mallamace, Domenico; Mammi, Stefano; Martin-Biran, Magali; Mazzei, Pierluigi; Mele, Andrea; Milone, Salvatore; Molero Vilchez, Dolores; Mulder, Roger J.; Napoli, Claudia; Ragno, Daniele; Randazzo, Antonio; Rossi, Maria Cecilia; Rotondo, Archimede; Šačkus, Algirdas; Sáez Barajas, Elena; Schievano, Elisabetta; Sitaram, Bhavaraju; Stevanato, Livio; Takis, Panteleimon G.; Teipel, Jan; Thomas, Freddy; Torregiani, Elisabetta; Valensin, Daniela; Veronesi, Marina; Warren, John; Wist, Julien; Zailer-Hafer, Elina; Zuccaccia, Cristiano; Gallo, Vito. A community-built calibration system: the case study of quantification of metabolites in grape juice by qNMR spectroscopy // *Talanta*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0039-9140. eISSN 1873-3573. 2020, vol. 214, art. no. 120855, p. 1-9. DOI: 10.1016/j.talanta.2020.120855. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 5,339; AIF: 4,070; IF/AIF: 1,311; Q1 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 8,60; SNIP: 1,299; SJR: 1,178; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,028]
- [S1; CH] Iškauskienė, Monika; Ragaitė, Greta; Sløk, Frank A.; Šačkus, Algirdas. Facile synthesis of novel amino acid-like building blocks by N-alkylation of heterocyclic carboxylates with N-Boc-3-iodoazetidine // *Molecular diversity*. Basel: Springer. ISSN 1381-1991. eISSN 1573-501X. 2020, vol. 24, iss. 4, p. 1235-1251. DOI: 10.1007/s11030-019-09987-8. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 2,013; AIF: 4,527; IF/AIF: 0,444; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,80; SNIP: 0,735; SJR: 0,368; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,750]
- [S1; CH] Milišūnaitė, Vaida; Kadlecová, Alena; Žukauskaitė, Asta; Doležal, Karel; Strnad, Miroslav; Voller, Jiří; Arbačiauskienė, Eglė; Holzer, Wolfgang; Šačkus, Algirdas. Synthesis and anthelmintic activity of benzopyrano[2,3-c]pyrazol-4(2H)-one derivatives // *Molecular diversity*. Basel: Springer. ISSN 1381-1991. eISSN 1573-501X. 2020, vol. 24, iss. 4, p. 1025-1042. DOI: 10.1007/s11030-019-10010-3. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 2,013; AIF: 4,527; IF/AIF: 0,444; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 3,80; SNIP: 0,735; SJR: 0,368; Q2 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,334]
- [S1; NL] Solovjova, Joana; Malinauskas, Tadas; Daskeviciene, Maryte; Kasparavicius, Ernestas; Iliciukaite, Aiste; Sackus, Algirdas; Paulauskas, Valdas; Getautis, Vytautas. Triphenylamine-based phenylhydrazon-indolium cationic dyes for solid-state DSSC applications // *Materials letters*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0167-577X. eISSN 1873-4979. 2020, vol. 274, art. no. 128001, p. 1-5. DOI: 10.1016/j.matlet.2020.128001. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,204; AIF: 4,950; IF/AIF: 0,647; Q2 (2019, InCites JCR SCIE)] [CiteScore: 5,50; SNIP: 0,941; SJR: 0,753; Q1 (2019, Scopus Sources)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,875]

Patentai, patentinės paraiškos

Tarptautinės patentinės paraiškos

- G. Varvuolytė, L. Malina, A. Bieliauskas, B. Hošíková, H. Simerská, H. Kolářová, N. Kleizienė, M. Strnad, E. Arbačiauskienė, V. Kryštof, A. Šačkus, A. Žukauskaitė. Pyrazol-indolové konjugáty pro fotodynamickou léčbu rakoviny a bakteriálních infekcí / Pyrazole-indole conjugates for photodynamic treatment of cancer and bacterial infections. National patent application number: PV 2020-78. Pirmoji išradimo patentinė paraiška pateikta Čekijos patentų biurui.

Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. V. Martynaitis – Tarpžinybinės psichoaktyvų efektą sukeliančių medžiagų rizikos vertinimo komisijos narys prie Narkotikų, tabako ir alkoholio kontrolės departamento.
- Dr. E. Arbačiauskienė – MITA ekspertė.

- Dr. V. Kederienė – MITA, LVPA ekspertė.

Narystė mokslinėse organizacijose, redkolegijose, kiti individualūs pasiekimai

- Dr. E. Arbačiauskienė – JAV chemikų draugijos „American Chemical Society“ narė.
- Dr. V. Kederienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos narė.