

## Fizikinė ir neorganinė chemija

### Mokslo kryptys

N 003 Chemija, T 005 Chemijos inžinerija.

### Tyrėjai

Tyrėjai: dr. S. Kitrys, dr. I. Ancutienė, dr. A. Šulčius, dr. E. Valatka, dr. R. Šlinkšienė, dr. R. Paleckienė, dr. G. Dabrilaitė-Kudžmienė, dr. A. Jaskūnas, dr. K. Jančaitienė, dr. R. Alaburdaitė, dr. N. Dukštienė, dr. E. Griškonis, dr. R. Ivanauskas, dr. A. Ivanauskas, dr. K. Kantminienė, dr. V. Krylova, dr. E. Paluckienė, dr. N. Petrašauskienė, dr. S. Ostachavičiūtė, dr. D. Sinkevičiūtė, dr. R. Stokienė, dr. A. Šulčiūtė, dr. S. Žalenskienė, dr. N. Žmuidzinavičienė, dr. V. Valeika, dr. I. Barauskienė, dr. R. Mardosaitė.

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

### Moksliniai tyrimai

- Elektrochemija ir chalkogenų chemija, vadovė dr. I. Ancutienė.
- Tyrimų kryptys: metalų chalkogenidų ir oksidų plonųjų sluoksnių sintezė ir charakterizavimas. Metalų ir jų lydinių elektrolitinis nusodinimas ir korozijos tyrimai. Medžiagų elektrocheminiam energijos generavimui ir kaupimui sintezė ir charakterizavimas.
- Neorganinės daugiakomponentės heterogeninės sistemos ir jų taikymo technologijos, vadovas dr. S. Kitrys.
- Tyrimų kryptys: katalizatorių, adsorbentų ir skystųjų chemosorbentų kūrimas, tyrimai ir taikymas technologijose. Specialiųjų sudėtinių trąšų su įvairiais, pvz., bioaktyviais priedais, kūrimas, tyrimas ir taikymas technologijose.

### Elektrochemija ir chalkogenų chemija

Tyrėjai vykdė metalų oksidų ir chalkogenidų dangų nusodinimo ant įvairių substratų tyrimus, tyrė gautų dangų savybes. Tirtas sukurtų daugiakomponenčių oksidinių ir chalkogenidinių kompozitų sudarymo mechanizmas, morfologija, cheminė ir fazinė sudėtis, tirta sintezės sąlygų įtaka gautų dangų kokybei, fazinei sudėčiai ir savybėms naudojant įvairius tyrimo metodus. Gautos špinelio struktūros  $\text{NiCo}_2\text{O}_4$  plonasluoksnės dangos suformuotos ant elektrai laidaus FTO stiklo sluoksninio elektrocheminio nusodinimo metodu. Iškaitinus dangas esant skirtingoms temperatūroms gautos puikomis pseudotalpinėmis charakteristikomis išsiskiriančios medžiagos, gebančios generuoti staigų didelės galios elektrinį impulsą. Tirtos grafito veltinio modifikavimo metaliniu Pb bei Pb(II) ir Pb(IV) oksidais sąlygos, tam taikant elektrocheminį nusodinimą iš įvairių elektrolitų srautiniame reaktoriuje bei terminį kai kurių Pb(II) karboksilatų skaidymą ore bei inertinėje atmosferoje. Pb ir jo oksidais modifikuoto grafito veltinio elektrodai yra perspektyvūs panaudoti juos rūgštinių švino akumuliatorių gamyboje, padidinant tokio tipo akumuliatorių savitąją energiją bei elektrinę talpą. Ištirtos grafito oksido ir Ag nanokompozito dangos elektroforetinio nusodinimo sąlygos, nustatyta šio kompozito sudėtis, morfologija, struktūra bei ištirtos elektrocheminės savybės. Toks nanokompozitas pasižymi elektrokatalitinėmis savybėmis redukuojant  $\text{H}_2\text{O}_2$  neutraliame tirpale ir gali būti panaudotas gaminant elektrocheminius sensorius, tinkamus vandenilio peroksido kiekybinei analizei. Ištirtos W-Co lydinio nanodalelių sonoelektrocheminės sintezės sąlygos esant elektrodo potencialo pulsacijai bei veikiant elektrolitą nuolatiniu ultragarsu, nustatyta susintetintų nanodalelių morfologija, jų elementinė sudėtis bei pasiskirstymas pagal dydį.

### Neorganinės daugiakomponentės heterogeninės sistemos ir jų taikymo technologijos

Tyrėjai vykdė mokslinius tiriamuosius darbus, susijusius su specialiųjų trąšų, ypač lazdelių formos, gamyba. Koncentruotos lazdelių formos trąšos, praturtintos bioaktyviomis medžiagomis, gamintos iš kalio nitrato, kalio dihidrofosfato, kalcio hipofosfito, kalio sulfato, magnio sulfato, biologinio preparato–Fosfix, skystų huminių rūgščių trąšos

Humicop. Pagamintos 5–18–38–5(CaO)–2(S) markės trąšų lazdelės yra nehidroskopiškos, o jų savybės priklauso nuo naudojamos rišamosios medžiagos kiekio ir koncentracijos. Įvertinus eksperimentinių tyrimų duomenis, pasiūlyta principinė technologinė schema NPK trąšų lazdelėms gaminti, kai jų formavimui naudojamas ekstruderis.

### Vykdyti projektai

Tarptautiniai:

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

### Apgintos disertacijos

- I. Barauskienė, „Kobalto oksidinių dangų sintezė, struktūra ir elektrocheminės savybės“, 2019-01-18, vadovas dr. E. Valatka.
- R. Mardosaitė, „Sieros turinčių Co-Mo oksidinių dangų sintezė, struktūra ir elektrokatalizinės savybės“, 2019-03-08, vadovas dr. E. Valatka.

### Rengiamos disertacijos

- L. Samardokas, „Metalų chalcogenidų sluoksnių polimerų paviršiuje sudarymas ir tyrimas“, vadovas dr. R. Ivanauskas.
- A. Bronušienė, „Vario-alavo sulfidų sluoksnių sudarymas ir tyrimas“, vadovė dr. I. Ancutienė.
- A. Ilginis, „Modifikuoto grafito veltinio panaudojimo galimybės elektros energijos kaupikliuose“, vadovas dr. E. Griškonis.
- A. Mikolaitienė, „Sudėtinių trąšų su bioaktyviais priedais kūrimas, fizikinės cheminės savybės ir taikymas“, vadovė dr. R. Šlinkšienė.

### Tyrėjai, kėlę mokslinę kvalifikaciją užsienio institucijose

- Dr. R. Šlinkšienė, dr. R. Paleckienė, dr. K. Jančaitienė. Europos komisijos renginys „Europos mokslinių tyrimų ir inovacijų dienos“, mokslinių tyrimų ir inovacijų politikos konferencija, investuotojų, inovatorių, tyrėjų, verslininkų, pilietinių organizacijų bei agentūrų atstovų susitikimai ir paroda „Science is Wonderful!“, dalyvavimas renginiuose, Briuselis, Belgija, 2019 m. rugsėjo 23–27 d.
- Dr. I. Barauskienė, dr. A. Šulčiūtė. COST būstinė Briuselyje, Belgija, 2019 m. lapkričio 17–18 d., COST programos veiklos aptarimas.

### Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; NL] Krylova, V.; Dukštienė, N. The structure of PA-Se-S-Cd composite materials probed with FTIR spectroscopy // Applied surface science. Amsterdam: Elsevier B.V. ISSN 0169-4332. eISSN 1873-5584. 2019, vol. 470, p. 462-471. DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.11.121. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 5,155; AIF: 4,680; IF/AIF: 1,101; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]
- [S1; RO] Dukštienė, N.; Krylova, V. Silver-cadmium chalcogenide/polyamide composite materials investigated from morphological and optical viewpoint // Chalcogenide Letters. Bucharest: Virtual Institute of Physics. ISSN 1584-8663. 2019, vol. 16, iss. 12, p. 615-629. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 0,977; AIF: 4,591; IF/AIF: 0,212; Q4 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]

- [S1; US] Barauskienė, Ieva; Valatka, Eugenijus. Layer-by-layer electrodeposition of high-capacitance nickel-cobalt oxides on FTO substrate // *Journal of materials science: materials in electronics*. New York, NY: Springer. ISSN 0957-4522. eISSN 1573-482X. 2019, vol. 30, iss. 11, p. 10311-10320. DOI: 10.1007/s10854-019-01369-y. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,195; AIF: 4,388; IF/AIF: 0,500; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]
- [S1; US] Barauskienė, Ieva; Valatka, Eugenijus. Layered nickel-cobalt oxide coatings on stainless steel as an electrocatalyst for oxygen evolution reaction // *Electrocatalysis*. New York: Springer. ISSN 1868-2529. eISSN 1868-5994. 2019, vol. 10, iss. 1, p. 63-71. DOI: 10.1007/s12678-018-0495-x. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,311; AIF: 5,254; IF/AIF: 0,439; Q3 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003]
- [S1; US] Sacevičienė, Virginija; Jucienė, Milda; Dobilaitė, Vaida; Krylova, Valentina; Žalenkienė, Skirma; Dukštienė, Nijolė; Bliūdžius, Raimondas. Investigation of the changes in physical properties of PES/PVC fabrics after aging // *Journal of applied polymer science*. Hoboken, NJ: John Wiley and Sons. ISSN 0021-8995. eISSN 1097-4628. 2019, vol. 136, iss. 21, art. no. 47523, p. 1-10. DOI: 10.1002/app.47523. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,188; AIF: 3,469; IF/AIF: 0,630; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003, T 002] [Indėlis: 0,426]
- [S1; PL] Plaipaitė-Nalivaiko, Rita; Griškonis, Egidijus; Adlienė, Diana; Gilys, Laurynas. Continuous ultrasound assisted sonoelectrochemical synthesis of W-Co alloy nanoparticles // *Acta Physica Polonica A: proceedings of the 12th international conference „Ion implantation and other applications of ions and electrons”, ION 2018*, Kazimierz Dolny, Poland, June 18-21, 2018. Warsaw: Polish Academy of Sciences. ISSN 0587-4246. 2019, vol. 136, iss. 2, p. 267-273. DOI: 10.12693/APhysPolA.136.267. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 0,545; AIF: 3,170; IF/AIF: 0,171; Q4 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003, N 002] [Indėlis: 0,250]
- [S1; NL] Balandis, Benas; Anusevičius, Kazimieras; Šiugždaitė, Jūratė; Kantminienė, Kristina; Mickevičius, Vytautas. Synthesis and antibacterial activity of 3-substituted 1-(2-methyl-5-nitrophenyl)-5-oxopyrrolidine derivatives // *Research on chemical intermediates*. Dordrecht: Springer. ISSN 0922-6168. eISSN 1568-5675. 2019, vol. 45, iss. 11, p. 5499-5517. DOI: 10.1007/s11164-019-03916-y. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Chemical Industry Notes] [IF: 2,064; AIF: 5,878; IF/AIF: 0,351; Q3 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003, N 004] [Indėlis: 0,200] [Indėlis: 1,000]
- [S1; RS] Mardosaitė, Rasa; Valatka, Eugenijus. S-containing molybdenum oxide films as pH neutral hydrogen evolution electrocatalyst prepared by electrodeposition // *International journal of electrochemical science*. Belgrade: Electrochemical science group. eISSN 1452-3981. 2019, vol. 14, iss. 1, p. 387-401. DOI: 10.20964/2019.01.37. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 1,284; AIF: 4,672; IF/AIF: 0,274; Q4 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]
- [S1; LT] Vaškelienė, Vaida; Šlinkšienė, Rasa. The influence of extraction method and conditions on the concentration of flavonoids in the extracts of rowanberries = Ekstrakcijos metodo ir sąlygų įtaka flavonoidų koncentracijai šermukšnio uogų ekstraktuose // *Chemija*. Vilnius: Lietuvos mokslų akademija. ISSN 0235-7216. eISSN 2424-4538. 2019, vol. 30, iss. 3, p. 168-175. DOI: 10.6001/chemija.v30i3.4051. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 0,424; AIF: 5,878; IF/AIF: 0,072; Q4 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]
- [S1; LT] Osipovaitė, Viktorija; Ancutienė, Ingrida. Composition and morphology of copper bismuth selenide layer on glass prepared by chemical conversion technique // *Chemija*. Vilnius: Lietuvos mokslų akademija. ISSN 02357216. eISSN 2424-4538. 2019, vol. 30, iss. 1, p. 33-40. DOI: 10.6001/chemija.v30i1.3923. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; Academic Search Complete] [IF: 0,424; AIF: 5,878; IF/AIF: 0,072; Q4 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 1,000]

## Patentai

Nacionaliniai patentai:

- [N5; LT] Milašienė, Daiva (išrad.); Ivanauskas, Remigijus (išrad.). Multifunkcinių medžiagų su EML slopinimo savybėmis gavimas modifikuojant minkštąsias polimerines medžiagas sidabro selenidais ( $\text{Ag}_2\text{Se}$ ) / išradėjai: Daiva Milašienė, Remigijus Ivanauskas; savininkas: Kauno technologijos universitetas. LT 6597 B. 2019-02-25. 16 p. [Espacenet] [M.kr.: T 008] [Indėlis: 0,500]

## Reikšmingiausi pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose, mokslo rezultatų pristatymas tarptautinėse parodose

- Technorama 2019: From Vision to Innovation! Kaunas, 2019 m. gegužės 9 d., A. Ilginis, E. Griškonis, K. Kantminienė, N. Žmuidzinaičienė. „Innovative microbial fuel cells“ – parodos dalyviai, standiniai pranešimai ir vizualizacijos.
- Technorama 2019: From Vision to Innovation! Kaunas, 2019 m. gegužės 9 d., A. Mikolaitienė, E. Griškaitis, R. Šlinkšienė. „Algae and ash as plant food in granulated fertilizers-cells“ – parodos dalyviai, standiniai pranešimai ir vizualizacijos.
- Technorama 2019: From Vision to Innovation! Kaunas, 2019 m. gegužės 9 d., L. Jatautė, V. Krylova. „Formation and investigation of silver-indium selenide layers on architectural textile-cells“ – parodos dalyviai, standiniai pranešimai ir vizualizacijos.

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

- Dr. R. Paleckienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 57 „Trašos“ vadovė. LVPA projektų ekspertė.
- Dr. R. Šlinkšienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 57 „Trašos“ narė. MITA ir LVPA projektų ekspertė.

## Kiti individualūs tyrėjų pasiekimai

- Dr. E. Valatka – Tarptautinės elektrochemijos draugijos (ISE) narys. Lietuvos chemijos pramonės įmonių asociacija 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.
- Magistrantė V. Rutkauskaitė – skirta UAB „Agro fertis“ įsteigta skatinamoji stipendija už trąšų srityje vykdomų mokslinių tyrimų darbų svarbą ir aktualumą.

## Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. R. Šlinkšienė. Apie ledo ir sniego tirpinimo mišinį „Ledo siaubas“. „Mokslo langai“ – radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laida (laidą finansuoja Spaudos, radijo ir televizijos rėmimo fondas). 2019-03-13.
- Dr. R. Paleckienė. Lngas į pasaulio mokslą – kokias trąšas naudoja kitos Europos šalys. „Mokslo langai“ – radijo stočių „Pūkas“ ir „Pūkas-2“ laida (laidą finansuoja Spaudos, radijo ir televizijos rėmimo fondas). 2019-03-20.

- Dr. R. Šlinkšienė. Interviu tema „Idėjos kelius barstyti sūriu ar kavos tirščiais Lietuvos mokslininkams kelia abejonių“. 2019-02-27. Pagal šį interviu paskelbtos publikacijos portaluose: 15min.lt; lrt.lt; valstietis.lt; etaplius.lt; delfi.lt.
- Dr. A. Šulčius. Seminaras Kauno m. chemijos mokytojams „Oksidacijos-redukcijos procesai chemijoje. Oksidacijos laipsniai neorganinėje ir organinėje chemijoje. Probleminis mokymas tema „Cheminės elementų savybės“. 2019-02-19.
- Dr. A. Šulčius. Seminaras „Metalų korozija: veiksniai, lemiantys korozijos atsiradimą, korozijos nustatymo būdai, tyrimo metodai“. AVGO GROUP. 2019-04-03.
- Dr. A. Šulčius. UAB EMEKO, konsultacija „Nerūdijančiojo plieno suvirinimo siūlės korozija“. 2019-10-07.
- Dr. A. Šulčius. Pranešimas konferencijoje „Scientia et historia-2019“ „Mokslas ir politika: valdžios palankumas mokslininko atradimo prioriteto pripažinimui“. 2019-03-28.
- Dr. E. Griškonis, dr. N. Žmuidzinavičienė, dr. A. Jaskūnas, dr. R. Šlinkšienė, dr. R. Paleckienė, dr. K. Jančaitienė. Skaitytos paskaitos moksleiviams 14 Lietuvos mokyklų.