

## Organinė chemija

### Mokslo kryptys

N 003 Chemija, T 005 Chemijos inžinerija.

### Tyrėjai

Organinės chemijos katedra: dr. V. Getautis, dr. V. Martynaitis, habil. dr. V. Mickevičius, habil. dr. A. Šačkus, dr. M. Daškevičienė, dr. T. Malinauskas, dr. I. Jonuškienė, dr. K. Kantminienė, dr. V. Kederienė, dr. S. Krištolaitytė, dr. L. Miknius, dr. K. Radzevičius, dr. B. Sapijanskaitė-Banevič, dr. J. Solovjova, dr. K. Anusevičius, dr. E. Arbačiauskienė, dr. J. Ardaravičienė, dr. G. Bubnienė, dr. V. Malinauskienė, dr. D. Tomkutė-Lukšienė, dr. I. Tumosienė, dr. S. Urnikaitė, dr. R. Vaickelionienė, dr. T. Braukyla, dr. R. Maldžius, dr. N. Malys, dr. K. Rakštys, M. Iškauskienė, A. Kulbickas, dr. B. Barvainienė, E. Kasparavičius, A. Magomedov, M. Steponaitis.

Sintetinės chemijos institutas: habil. dr. A. Šačkus, dr. S. Burinskas, dr. M. Dagilienė, dr. N. Kleizienė, dr. S. Krištolaitytė, dr. V. Milišiūnaitė, dr. G. Ragaitė, dr. R. Tamulienė, A. Bieliauskas, A. Urbonavičius.

Bioprosesų tyrimų centras: dr. N. Malys, dr. I. Jonuškienė, dr. M. Syrpas, dr. E. Valančienė, E. Augustinienė, P. Matulis, A. Simonavičius.

Podoktorantūros stažuotojai: V. Andrulevičienė.

Doktorantai: B. Balandis, B. Grybaitė, E. Gudelis, E. Kasparavičius, A. Magomedov, A. Peleckis, B. Razmienė, M. Steponaitis, E. Ščerbetkaitė, J. Bruzgulienė, K. Dzedulionytė, L. Jasiūnas, G. Matulevičiūtė, A. Urbonavičius, D. Vaitukaitytė, V. Varnelis, M. Iškauskienė, I. Vaškevičienė.

### Moksliniai tyrimai

- Organinių puslaidininkių sintezė, vadovas dr. V. Getautis.  
Tyrimų kryptys: organinių fotopulsaidininkių energiją taupančioms technologijoms (saulės elementams, šviesos diodams, efektyviems lauko tranzistoriams ir pan.) sintezė ir savybių tyrimas. Dažiklių ir pigmentų bei jų tarpinių produktų sintezė.
- Bioaktyvių junginių sintezė ir išskyrimas iš atsinaujinančių žaliavų, vadovas habil. dr. V. Mickevičius.  
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.
- Sintetinė organinė chemija, vadovas habil. dr. A. Šačkus.  
Tyrimų kryptys: organinės sintezės metodologijų vystymas. Biologiškai aktyvių medžiagų kūrimas ir sintezė. Funkcinių medžiagų kūrimas ir sintezė. Organinių junginių struktūros tyrimai.

### Organinių puslaidininkių sintezė

Toliau buvo kuriami, sintetinami ir tiriama žemo jonizacijos potencialo (4,9-5,3 eV) bei didelio teigiamų krūvininkų judrio originalios struktūros organiniai puslaidininkiai, skirti efektyviems naujos kartos (perovskitiniams) fotovoltiniams elementams. Paprasta sintezės strategija buvo adaptuota efektyvių skyles transportuojančių medžiagų, skirtų perovskitiniams saulės elementams, sintezei. Buvo parodyta, kad spiro-centras organiniuose puslaidininkiuose gali būti pakeistas paprasčiau gaunamu nekonjuguotu tilteliu. Susintetinus seriją karbazolo chromoforą turinčių skyles transportuojančių medžiagų, atliktas molekulinės struktūros įtakos prietaiso efektyvumui tyrimas. Nustatyta, kad: atšakų skaičiaus didinimas nepriveda prie aukštesnio efektyvumo; nors izomerai gali turėti stiprią įtaką krūvininkų transportui, tai tik nežymiai atsiliepia galutiniam prietaiso efektyvumui. Ištirta cheminė sąveika tarp skyles transportuojančių sluoksnių

sudarančių komponentų. Nustatyta, kad: *tert*-butilpiridinas reaguoja su skyles transportuojančios medžiagos katijon-radikalais, susiformavusiais dėl priedų poveikio; reakcijos produktai pasižymi elektrinėmis savybėmis, kurios neigiamai atsiliepiama prietaiso efektyvumui; piridinimas mažina efektyvų skyles transportuojančios medžiagos legiravimą, taip mažinant ilgalaikį prietaiso stabilumą. Buvo pasiūlytas bei išbandytas prietaisuose naujas selektyvaus sluoksnio skylėms formavimo metodas. Parodyta, kad karbazolo chromoforą turinčios fosfono rūgšties monosluoksnis suteikia pakankamą selektyvumą, reikalingą aukštam efektyvumui užtikrinti (pasiektas 17,8% efektyvumas). Susintetintos mažamolekulinės skyles transportuojančios medžiagos, turinčios Triogerio bazės karkasu apjungtus trifenilamino fragmentus su skirtingais išoriniais pakaitais. Iširtos šių junginių struktūrinės, terminės, optinės ir fotofizinės savybės. Vykdam šiuos mokslinius tyrimus buvo įdarbinti keturi doktorantai bei šeši mokslo daktarai.

#### Bioaktyvių junginių sintezė ir išskyrimas iš atsinaujinančių žaliavų

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 adhezyvai): 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 runkelių išspaudų suskystinimas (bio-poliuretano putos ir adhezyvai): 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 adhezyvai): 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 adhezyvai): vykdytos produktų savybių analizės (stipris tempiant, bioskaidumas), taip pat įvertinti ir produktai, gaminami iš filtruotų bei optimaliomis sąlygomis pagamintų biopoliolių.

#### Sintetinė organinė chemija

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 Vienos universiteto (Austrija) mokslininkais, panaudojant sidabro(I) jonų katalizuojamą ciklizacijos reakciją buvo sukurtas efektyvus būdas gauti furo[2,3-*c*]pirazolo heterociklinę sistemą. Taip pat per kelias stadijas iš 1-fenil-3-hidroksi-1*H*-pirazolo, panaudojus acilinimo, Fries pergrupavimo ir ciklizacijos reakcijas susintetinti benzopirano[2,3-*c*]pirazolo-4(2*H*)-onai. Bendradarbiaujant su Palackio universiteto (Čekija) mokslininkais buvo tiriamos gautų naujų heterociklinių junginių biologinės savybės, nustatytas anthelmintinis *in vivo* aktyvumas modeliniams nematodams *Caenorhabditis elegans*. Toliau tiriamas fluorescuojančių agentų panaudojimas ląstelių sandaros ir raidos vizualizacijai. 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  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -HSQC,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -HMBC,  $^1\text{H}$ ,  $^{15}\text{N}$ -HMBC,  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$ -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  $^{77}\text{Se}$ -, o fluorintų junginių atveju –  $^{19}\text{F}$ -branduolių magnetinio rezonanso spektroskopija. Vykdydami šiuos tyrimus dalyvavo 8 doktorantai, 12 mokslo daktarų, eilė magistrantų.

## 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, vienpakopė sintezė (Fotomolekulės)“, 2017–2020, dr. V. Getautis.
- ES struktūrinių fondų investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stažuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Organinių puslaidininkų savybių tyrimas ir modeliavimas kvantinės chemijos metodais“, 2017–2021, dr. V. Getautis.
- 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. I. Jonuškienė.
- LMT mokslininkų grupių projektas „3D struktūros skylės transportuojančios medžiagos efektyviems bei stabiliems perovskitiniams saulės elementams (3D HTM)“, 2019–2022, dr. M. Daškevičienė.
- LMT mokslininkų grupių projektas „Savitvarkiai krūvius transportuojantys monosluoksniai efektyviems perovskitiniams saulės elementams (SAM)“, 2019–2022, dr. T. Malinauskas.

Instituciniai:

- KTU MTEPI fondo projektas „o-Chinonmetidų generavimas ir jų konjugatų bei metabolitų tyrimai *Saccharomyces cerevisiae* Lag ir Log fazėse (CHINONMETIDAS)“, 2019, dr. V. Martynaitis.
- KTU MTEPI fondo projektas „Nauji pirazolo[4,3-c]piridino dariniai: sintezė ir priešvėžinių savybių tyrimai (PyrSynth)“, 2019, dr. E. Arbačiauskienė. Užsakovieji:
- 2019 m. buvo vykdyti konfidencialūs užsakovieji MTEP darbai užsienio biofarmacijos kompanijoms.

## Apgintos disertacijos

- V. Milišūnaitė, „Naujų kondensuotųjų heterociklinių sistemų, turinčių pirazolo žiedą, sintezė ir jų savybių tyrimas“, 2019-01-17, vadovai habil. dr. A. Šačkus, dr. W. Holzer (Vienos universitetas).
- E. Valančienė, „Poliolefinų perdirbimas termokataliziniais ir biocheminiais metodais“, 2019-02-04, vadovas dr. L. Miknius.
- T. Braukyla, „Triogero bazės fragmentą turinčių funkcinių molekulių optoelektronikai sintezė ir tyrimas“, 2019-09-20, vadovas dr. V. Getautis.

## Rengiamos disertacijos

- A. Magomedov, „Karbazolo ir hidrazono fragmentus tyrinčios skylės transportuojančios medžiagos: sintezė, savybės ir pritaikymas perovskitiniuose saulės elementuose“ vadovas dr. V. Getautis.
- A. Peleckis, „N-pakeistų aminorūgščių ir jų darinių su azolų bei azinų fragmentais sintezė“, vadovas habil. dr. V. Mickevičius.
- I. Vaškevičienė, „Azolų ir azinų su aminorūgščių fragmentais sintezė ir tyrimas, vadovas: habil. dr. V. Mickevičius.
- B. Grybaitė, „Polifunkcionalizuotų aminotiazolo darinių sintezė ir tyrimas“, vadovas habil. dr. V. Mickevičius.

- B. Balandis, „Funkcionalizuotų azolų ir azinų sintezė bei tyrimas“, vadovas habil. dr. V. Mickevičius.
- L. Jasiūnas, „Atliekinės biomasės termodinaminis suskystinimas ir aukštesnės energetinės vertės bio-produktų sintezė“, vadovas dr. L. Miknius.
- M. Iškauskienė, Funkcinių indolo darinių sintezė ir tyrimas, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- E. Ščerbetkaitė, „Naujų pirazolo žiedo fragmentą turinčių junginių sintezė; jų struktūros ir savybių tyrimas“, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- B. Razmienė, „Pirazolpiridinai: nauji fluorescenciniai molekuliniai zondai“, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- E. Gudelis, „Naujų heterociklinių aminorūgščių darinių kūrimas, sintezė bei struktūros ir savybių tyrimas“, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- J. Bruzgulienė, „Naujų azotingųjų aminorūgščių darinių kūrimas, sintezė bei struktūros ir savybių tyrimas“, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- K. Dzedulionytė, „Naujų funkcionalizuotų penkianarių heterociklinių junginių kūrimas, sintezė ir tyrimas“, vadovė dr. E. Arbačiauskienė.
- E. Kasparavičius, „Organinių puslaidininkių optoelektroniams prietaisams sintezė bei jų savybių tyrimas“, vadovas dr. T. Malinauskas.
- G. Matulevičiūtė, „Naujų karbo- ir heterociklinių aminorūgščių darinių kūrimas, sintezė bei struktūros ir savybių tyrimas“, vadovas habil. dr. A. Šačkus.
- M. Steponaitis, „Organinių puslaidininkių, skirtų perovskitinėms Saulės celėms, sintezė bei savybių tyrimas“, vadovas dr. T. Malinauskas.
- A. Urbonavičius, „Naujų suvaržytos konformacijos aminorūgščių ir jų darinių sintezė ir tyrimas“, vadovė dr. S. Krikštolaitytė.
- D. Vaitukaitytė, „Organiniai puslaidininkiai, galintys *in situ* polimerintis bei efektyviai transportuoti teigiamus krūvininkus perovskitiniuose saulės elementuose“, vadovas dr. V. Getautis.
- V. Varnelis, „N-Heterociklinių aminorūgščių sintezė ir tyrimas“, vadovas V. Martynaitis.

### Tyrėjai, kėlę mokslinę kvalifikaciją užsienio institucijose

- Dr. I. Jonuškienė, Aarhus universitetas, Danija, 2019 m. sausio 28 d. – vasario 1 d., tema *Bacillus* – identification, phylogeny and potential pathogenicity.

### Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Al-Ashouri, Amran; Magomedov, Artiom; Roß, Marcel; Jošt, Marko; Talaikis, Martynas; Chistiakova, Ganna; Bertram, Tobias; Márquez, José A.; Köhnen, Eike; Kasparavičius, Ernestas; Levenco, Sergiu; GilEscrig, Lidón; Hages, Charles J.; Schlatmann, Rutger; Rech, Bernd; Malinauskas, Tadas; Unold, Thomas; Kaufmann, Christian A.; Korte, Lars; Niaura, Gediminas; Getautis, Vytautas; Albrecht, Steve. Conformal monolayer contacts with lossless interfaces for perovskite single junction and monolithic tandem solar cells // *Energy & environmental science*. Cambridge: Royal Society of Chemistry. ISSN 1754-5692. eISSN 1754-5706. 2019, vol. 12, iss. 11, p. 3356-3369. DOI: 10.1039/c9ee02268f. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 33,250; AIF: 4,955; IF/AIF: 6,710; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 002, N 003] [Indėlis: 0,180]
- [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: 0,600]

- [S1; DE] Braukyla, Titas; Xia, Rui; Daskeviciene, Maryte; Malinauskas, Tadas; Gruodis, Alytis; Jankauskas, Vygintas; Fei, Zhaofu; Momblona, Cristina; Roldán-Carmona, Cristina; Dyson, Paul J.; Getautis, Vytautas; Nazeeruddin, Mohammad Khaja. Inexpensive hole transporting materials derived from Tröger's base afford efficient and stable perovskite solar cells // *Angewandte chemie international edition*. Weinheim: Wiley-VCH. ISSN 1433-7851. eISSN 1521-3773. 2019, vol. 58, iss. 33, p. 11266-11272. DOI: 10.1002/anie.201903705. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 12,257; AIF: 5,878; IF/AIF: 2,085; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,336]
- [S1; NL] Yousef, Samy; Tatarants, Maksym; Tichonovas, Martynas; Sarwar, Zahid; Jonuškienė, Ilona; Kliucininkas, Linas. A new strategy for using textile waste as a sustainable source of recovered cotton // *Resources, conservation and recycling*. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0921-3449. eISSN 1879-0658. 2019, vol. 145, p. 359-369. DOI: 10.1016/j.resconrec.2019.02.031. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 7,044; AIF: 4,891; IF/AIF: 1,440; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005, T 009] [Indėlis: 0,166]
- [S1; GB] Steponaitis, Matas; Komskis, Regimantas; Kamarauskas, Egidijus; Malinauskas, Tadas; Jursenas, Saulius; Getautis, Vytautas. Investigation of photophysical properties of triphenylamine phenylethenyl derivatives containing tertiary amine groups // *Dyes and pigments*. London: Elsevier. ISSN 0143-7208. eISSN 1873-3743. 2019, vol. 166, p. 122-129. DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.03.026. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 4,018; AIF: 3,281; IF/AIF: 1,224; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,502]
- [S1; DE] Milišiūnaitė, Vaida; Paulavičiūtė, Rūta; Arbačiauskienė, Eglė; Martynaitis, Vytas; Holzer, Wolfgang; Šačkus, Algirdas. Synthesis of 2H-furo[2,3-c]pyrazole ring systems through silver(I) ion-mediated ring-closure reaction // *Beilstein journal of organic chemistry*. Frankfurt am Main: Beilstein-Institut. ISSN 1860- 5397. 2019, vol. 15, p. 679-684. DOI: 10.3762/bjoc.15.62. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 2,595; AIF: 3,349; IF/AIF: 0,774; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,666]
- [S1; CH] Tumosienė, Ingrida; Kantminienė, Kristina; Jonuškienė, Ilona; Peleckis, Artūras; Belyakov, Sergei; Mickevičius, Vytautas. Synthesis of 1-(5-Chloro-2-hydroxyphenyl)-5-oxopyrrolidine-3-carboxylic Acid Derivatives and their antioxidant activity // *Molecules*. Basel: MDPI AG. eISSN 1420-3049. 2019, vol. 24, iss. 5, art. no. 971, p. 1-15. DOI: 10.3390/molecules24050971. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 3,060; AIF: 5,147; IF/AIF: 0,594; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005, N 003] [Indėlis: 0,668]
- [S1; GB] Daskeviciene, Maryte; Paek, Sanghyun; Magomedov, Artiom; Cho, Kyoung Taek; Saliba, Michael; Kizeleviciute, Ausra; Malinauskas, Tadas; Gruodis, Alytis; Jankauskas, Vygintas; Kamarauskas, Egidijus; Nazeeruddin, Mohammad Khaja; Getautis, Vytautas. Molecular engineering of enamine-based small organic compounds as hole-transporting materials for perovskite solar cells // *Journal of materials chemistry C*. London: Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-7534. eISSN 2050-7526. 2019, vol. 7, iss. 9, p. 2717-2724. DOI: 10.1039/c8tc06297h. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 6,641; AIF: 4,591; IF/AIF: 1,446; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,377]
- [S1; GB] Vaškevičienė, Irena; Paketurytė, Vaida; Pajanok, Nikita; Žukauskas, Šarūnas; Sapjanskaitė, Birutė; Kantminienė, Kristina; Mickevičius, Vytautas; Zubrienė, Asta; Matulis, Daumantas. Pyrrolidinonebearing methylated and halogenated benzenesulfonamides as inhibitors of carbonic anhydrases // *Bioorganic and medicinal chemistry*. London: Elsevier. ISSN 0968-0896. eISSN 1464-3391. 2019, vol. 27, iss. 2, p. 322-337. DOI: 10.1016/j.bmc.2018.12.011. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; PubMed] [IF: 2,802; AIF: 3,585; IF/AIF: 0,781; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,445]
- [S1; DE] Lipp, Benjamin; Kammer, Lisa Marie; Küçükdisli, Murat; Luque, Adriana; Kühlborn, Jonas; Pusch, Stefan; Matulevičiūtė, Gita; Schollmeyer, Dieter; Šačkus, Algirdas; Opatz, Till. Visible light-induced sulfonylation/arylation of styrenes in a double radical three-component photoredox reaction // *Chemistry - A European journal*. Weinheim: Wiley-VCH. ISSN 0947-6539. eISSN 1521-3765. 2019, vol. 25, iss. 38, p. 89658969. DOI: 10.1002/chem.201901175. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; MEDLINE] [IF: 5,160; AIF: 5,878; IF/AIF: 0,877; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,150]

## Patentai, patentinės paraiškos

### Patentai:

- [N4; DE] Magomedov, Artiom (išrad.); Amran, Al-Ashouri (išrad.); Kasparavicius, Ernestas (išrad.); Steve, Albrecht (išrad.); Getautis, Vytautas (išrad.); Marko, Jost (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Kegelmann, Lukas (išrad.); Köhnen, Eike (išrad.). Verbindung und Verfahren zur Bildung von selbstorganisierten Monolagen auf TCO-Substraten zur Verwendung in Perowskit-Solarzellen in invertierter Architektur / Erfinder: Artiom Magomedov, Al-Ashouri Amran, Ernestas Kasparavicius, Albrecht Steve, Vytautas Getautis, Jost Marko; Tadas Malinauskas, Lukas Kegelmann, Eike Köhnen ; Patentinhaber: Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Kaunas University of Technology. DE 102018115379 B3. 2019-10-10. 35 p. [Espacenet; DEPATISnet] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,445]
- [N4; CN] Sackus, Algirdas (išrad.); Martynaitis, Vytas (išrad.); Krikstolaityte, Sonata (išrad.); Ragaite, Greta (išrad.); Vengris, Mikas (išrad.). New photochromic compounds and intermediate compounds for production thereof / Inventors: Sackus, Algirdas, [et al.]; Applicant: Kaunas University of Technology. CN 107207523 B. 2019-08-09. 17 p. [Espacenet] [M.kr.: N 002, N 003] [Indėlis: 0,500]

### Patentinės paraiškos:

- [N11; CH] Magomedov, Artiom (išrad.); Amran, Al-Ashouri (išrad.); Kasparavicius, Ernestas (išrad.); Steve, Albrecht (išrad.); Getautis, Vytautas (išrad.); Marko, Jost (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Kegelmann, Lukas (išrad.); Köhnen, Eike (išrad.). Hole-transporting self-organised monolayer for perovskite solar cells : international patent application / inventors: Artiom Magomedov, Al-Ashouri Amran, Ernestas Kasparavicius, Albrecht Steve, Vytautas Getautis, Jost Marko; Tadas Malinauskas, Lukas Kegelmann, Eike Köhnen ; applicants: Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Kaunas University of Technology. WO 2019207029 A1. 2019-10-31. 58 p. [Espacenet] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,445]
- [N7; DE] Getautis, Vytautas (išrad.); Daskeviciene, Maryte (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Nazeeruddin Mohammad, Khaja (išrad.); Paek, Sanghyun (išrad.); Rakstys, Kasparas (išrad.). Hole transporting organic molecules containing enamine groups for optoelectronic and photoelectrochemical devices: European patent application / inventors: Getautis Vytautas, [et al.]; applicants: Kauno technologijos universitetas, École Polytechnique Fédérale de Lausanne. EP 3515884 A2. 2019-07-31. 14 p. [Espacenet] [M.kr.: N 003] [Indėlis: 0,668]
- [N8; US] Getautis, Vytautas (išrad.); Daskeviciene, Maryte (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Nazeeruddin, Mohammad Khaja (išrad.); Paek, Sanghyun (išrad.); Rakstys, Kasparas (išrad.). Hole transporting organic molecules containing enamine groups for optoelectronic and photoelectrochemical devices: United States patent application / inventors: Getautis Vytautas, [et al.]; applicants: Kauno technologijos universitetas, École Polytechnique Fédérale de Lausanne. US 20190229272 A1. 2019-07-25. 27 p. [USPTO Patent Full-text and Image Database; Espacenet] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,668]
- [N9; US] Getautis, Vytautas (išrad.); Daskeviciene, Maryte (išrad.); Malinauskas, Tadas (išrad.); Nazeeruddin, Mohammad Khaja (išrad.); Paek, Sanghyun (išrad.); Rakstys, Kasparas (išrad.). Hole transporting organic molecules containing enamine groups for optoelectronic and photoelectrochemical devices : Japan patent application / inventors: Vytautas Getautis, Maryte Daskeviciene, Tadas Malinauskas, Mohammad Khaja Nazeeruddin, Sanghyun Paek, Kasparas Rakstys; applicants: Kauno technologijos universitetas, École Polytechnique Fédérale de Lausanne. JP 2019530746 A. 2019-10-24. 37 p. [Espacenet] [M.kr.: N 003] [Indėlis:0,668]

## Reikšmingiausi pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose

- European Materials Research Society Spring Meeting / E-MRS, Nica, Prancūzija, 2019 m. gegužės 27–31 d., A. Magomedov, A. Al-Ashouri, E. Kasparavicius, T. Malinauskas, S. Albrecht, V. Getautis. Dopant-free hole transporting monolayers for inverted perovskite solar cells – žodinis pranešimas.

- Open readings 2019, Vilnius, Lietuva, 2019 m. kovo 19–22 d., A. Magomedov, A. Al-Ashouri, E. Kasparavicius, S. Strazdaite, G. Niaura, T. Malinauskas, S. Albrecht, V. Getautis. Monolayer as a hole-selective contact for efficient perovskite solar cells – žodinis pranešimas.
- 11th International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics / HOPV-19, Roma, Italija, 2019 m. gegužės 12–15 d. A. Magomedov, A. Al-Ashouri, E. Kasparavicius, G. Niaura, T. Malinauskas, S. Albrecht, V. Getautis. Hole-Selective Monolayers: Synthesis, Deposition, and Application in Efficient Perovskite Solar Cells – stendinis pranešimas.
- 5th International Conference on Perovskite Solar Cells and Optoelectronics / PSCO-2019, Šveicarija, 2019 m. rugsėjo 30 – spalio 2 d., T. Malinauskas. Long-term Instability of Doped Hole Transporting Materials and Means to Circumvent It via Hole-selective Monolayer – žodinis pranešimas.
- ASM/ESCMID conference on drug development to meet the challenge of antimicrobial resistance, Bostonas, Masačiūsetso Valstija, JAV, 2019 m. rugsėjo 3–6 d., P. Kavaliauskas, V. Mickevičius, R. Petraitiene, I. Dobtsis, P. Gialanella, V. Petraitis. In vitro activity of KTU286, a novel butanehydrazide derivative with antimicrobial activity against drug resistant *Staphylococcus aureus* with defined resistance mechanisms – stendinis pranešimas.
- VIII EFMC International Symposium on Advances in Synthetic and Medicinal Chemistry, Atėnai, Graikija, 2019 m. rugsėjo 1–5 d., V. Milišūnaitė, E. Arbačiauskienė, E. Řezníčková, R. Jorda, V. Malínková, A. Žukauskaitė, W. Holzer, V. Kryštof, A. Šačkus. Synthesis and evaluation of anti-mytotic activity of novel 2Hpyrazolo[4,3-c]pyridines – stendinis pranešimas.
- A. Corbella, International Summer School on Organic Synthesis, Gargnanė, Italija, 2019 m. birželio 9–13 d., E. Ščerbetkaitė, R. Tamulienė, E. Gudelis, U. Šachlevičiūtė, N. Kleizienė, A. Šačkus, F. A. Sløk. Synthesis of novel achiral constrained analogues of 4-aminobutanoic acid (GABA) possessing the azetidine structural unit – stendinis pranešimas.
- 21st JCF Frühjahrs-symposium & 2nd EYCheM, Bremenas, Vokietija, 2019 m. kovo 20–23 d., G. Matulevičiūtė, V. Kederienė, I. Jonuškienė, A. Šačkus. Synthesis and biological investigation of (het)arylquinazolin-4(3H)-one analogues – stendinis pranešimas.
- 26th Croatian meeting of chemists and chemical engineers with international participation. 4th Symposium Vladimir Prelog, Kroatija, 2019 m. balandžio 9–12 d., J. Kuginytė, G. Ragaitė, M. Dagilienė, V. Milišūnaitė, G. Matulevičiūtė, A. F. Sløk, A. Šačkus. Synthesis of methyl 5-cycloaminyl-1,2-oxazole-4-carboxylates – stendinis pranešimas.
- Bioheterocycles 2019, XVIII International Conference on Heterocycles in Bioorganic Chemistry, Gentas, Belgija, 2019 m. birželio 17–20 d., E. Gudelis, N. Kleizienė, V. Milišūnaitė, U. Šachlevičiūtė, Fr. A. Slok, A. Šačkus. Synthesis of novel heterocyclic analogues of 4-aminobutanoic acid (GABA) – stendinis pranešimas.
- 21st JCF Frühjahrs-symposium & 2nd EYCheM, Bremenas, Vokietija, 2019 m. kovo 20–23 d., V. Varnelis, M. Iškauskienė, J. Solovjova, N. Kleizienė, G. Ragaitė, F. A. Sløk, A. Šačkus, Synthesis of azetidiny-substituted 1H-pyrazole carboxylates – stendinis pranešimas.

### 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.
- Dr. V. Martynaitis – Tarpžinybinės psichoaktyvų efektą sukeliančių medžiagų rizikos vertinimo komisijos narys prie Narkotikų, tabako ir alkoholio kontrolės departamento.
- Dr. I. Jonuškienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos valdybos narė.
- Dr. V. Kederienė – MITA ekspertė, Lietuvos biotechnologų asociacijos narė.
- Dr. I. Tumosienė – Lietuvos biotechnologų asociacijos narė.
- Dr. E. Arbačiauskienė – MITA ekspertė.

### Kiti individualūs tyrėjų pasiekimai

- Dr. V. Getautis – pripažintas 2019 m. KTU inovatyviausiu mokslininku.
- Doktorantas E. Kasparavičius – apdovanotas už geriausią stendinį pranešimą konferencijoje „Chemistry & Chemical Technology“; 9-osios Jaunųjų mokslininkų konferencijos „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ laureatas, šis darbas buvo pristatytas INFOBALT komisijai ir gauta INFOBALT premija.
- Doktorantas A. Magomedov – 9-oje Jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“ apdovanotas už geriausią pranešimą, šis darbas pristatytas INFOBALT komisijai ir gauta INFOBALT premija.
- Dr. E. Arbačiauskienė – JAV chemikų draugijos „American Chemical Society“ narė.
- Dr. T. Malinauskas – JAV medžiagų mokslininkų draugijos „Materials Research Society“, JAV chemikų draugijos „American Chemical Society“ ir Europos medžiagų mokslininkų draugijos „European Materials Research Society“ narys.

### Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- A. Magomedov. Lietuvos mokslininkų pasiekimai kuriant medžiagas naujos kartos saulės elementams. 2019-12-08. Lietuvos radijo laida „Lietuvos diena“, lrt.lt.
- Dr. V. Getautis. KTU chemikų pasiekimai, kuriant naujos kartos saulės elementus. 2019-11-30. TV laida „Smalsumo genas“, lrt.lt.
- Dr. V. Getaučio mokslo grupė. Lietuviai rado būdą, kaip prailginti saulės elementų gyvavimo trukmę. 2019-01-02, portalas delfi.lt.
- Dr. V. Getaučio mokslo grupė. Kaip KTU sumušė dar vieną rekordą ir sukėlė didelę sensaciją mokslo bendruomenėje bei kas tai yra tikras skystas auksas naujos kartos saulės elementų rinkoje. 2019-09-30, portalas technologijos.lt.
- Dr. V. Getaučio mokslo grupė. Lietuvos mokslininkai sugalvojo būdą, kaip prailginti naujos kartos saulės elementų gyvavimo trukmę. 2019-01-05, portalas technologijos.lt.
- Dr. V. Getaučio mokslo grupė. Breakthrough innovation enabling cheaper solar energy production is one step closer to the market. 2019-12-19, portalas TechXplore.com.
- Habil. dr. A. Šačkaus mokslo grupė. Vaistų nuo vėžio prototipai: mokslininkai sukūrė pamatinius blokus, padėsiančius kovoti su šia liga. 2019-05-07, portalas lrt.lt.
- Habil. dr. A. Šačkaus mokslo grupė. Lithuanian scientists create building blocks for anti-cancer medicine. 2019-05-19, portalas l24.lt.
- Habil. dr. A. Šačkaus mokslo grupė. Kovai su vėžiu KTU kuria sintetines aminorūgštis. 2019-05-14, portalas vz.lt.
- Habil. dr. A. Šačkaus mokslo grupė. KTU mokslininkai sukūrė pamatinius blokus, padėsiančius kovoti su vėžiu. 2019-05-07, portalas mokslolietuva.lt.
- Habil. dr. A. Šačkaus mokslo grupė. Chemotherapy for Cancerous Cells, Anti-Cancer Drugs. 2019-05-16, sveikatos apsaugos informacijos ir komunikacijos platforma MedsBla.com.
- Padalinio mokslininkai 2019 m. aktyviai skaitė paskaitas Lietuvos mokyklų moksleiviams.