

# 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 karboanhidrazių 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 vandenvalo 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 runkelių 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; Grybaitė, Birutė; Mickevičius, Vytautas; Petraitiene, Ruta; Grigalevičiute, 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.

## Organinių puslaidininkių 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 tandeminiams saulės elementais taip pat atskleidžia ir kitą SAM technologijos privalumą, t. y. šie monosluoksniai gali būti sėkmingai formuojami ant šiurkščių arba tekstūrotų 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. Ištirtos susintetintų organinių puslaidininkų 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, vienpakopė sintezė (Fotomolekulės)“, 2017–2020, dr. V. Getautis.
- ES struktūrinių fondų Investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stazuotių 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 stabiliems perovskitiniams saulės elementams (3D HTM)“, 2019–2022, dr. M. Daškevičienė.

## Apgintos disertacijos

- A. Magomedov, Karbazolo ir hidrazono fragmentus turinčios skyles 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; Schlatmann, 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, Vygintas; 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, Vygintas; 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, Vygintas; 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, Vygintas; 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 merkptoaminorūgščių 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 efektyvius saulės elementus išradusio KTU profesoriaus Vytauto Getaučio darbą publikuos žurnalas „Science“, 2020-11-25, portalas Irt.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.

## 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 sintetinė biologija pagrįstas technologijas, kurios pagreitintų 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; Syrcas, 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. Syrcas – Maisto technologų instituto (Institute of Food Technology – IFT) narys.

# 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  $^1\text{H},^{13}\text{C}$ -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.

Mokslo grupės tyrėjai dalyvauja vykdamy projektą "Chemijos inžinerijos ir bioprocėsų kompetencijos centras (CIBKC)". Projekto metu, siekiama sukurti ir išvystyti automatizuotą nepertraukiamą srautinį sintezės procesą, skirtą naujiems heterocikliniams junginiams gauti, tam sukuriant ir sukonstruojant srautinių mikroraktorių sistemą, susidedančią iš atskirai įsigyjamų Syrris kompanijos modulių ir laboratorijoje sukurtų mikroraktorių, turinčių katalizatoriaus įkrovą. Nepertraukiamos srautinės sintezės technologija, panaudojant į vieną technologinę liniją sujungtus mikroraktorius, 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.

### Užsakomieji 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; Dambroso, 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] Milišiūnaitė, 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; Ilciukaite, Aiste; Sackus, Algirdas; Paulauskas, Valdas; Getautis, Vytautas. Triphenylamine-based phenylhydrazone-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.