

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Kristalinių ir magnetinių struktūrų nustatymas	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Neorganinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	3
Individualus	7	Seminarai	

Dalyko anotacija

Kurso tikslas perteikti teorinius ir praktinius medžiagų kristalinės ir magnetinės struktūros nustatymo metodus iš rentgeno spindulių (XRD) bei neutronų difrakcijos duomenų.

Kurse nagrinėjamos temos: kristalinės medžiagos; magnetinės medžiagos; kristalografijos pagrindai; rentgeno spindulių generavimas; neutronų srauto generavimas; rentgeno spindulių ir neutronų srauto ypatumai bei taikymo galimybės; difraktogramos anatomija; kristalinės struktūros nustatymas (XRD duomenys): Le Bail tikslinimo metodas ir Rietveld analizė; mėginių paruošimas; duomenų užrašymo sąlygos; magnetinių savybių nustatymas; kristalinės ir magnetinės struktūros nustatymas Rietveld metodu analizuojant neutronų difrakcijos duomenis; kristalinės ir magnetinės struktūrų vizualizavimas; instrumentinis failas; kristalinių dydžio nustatymas; ryšių ilgiai ir kampai; monokristalų difrakcija; monokristalų orientavimas.

Studento pasirinktų bent 3 junginių kristalinės struktūros nustatymas Le Bail ir Rietveld metodais.

Pagrindinė literatūra

1. Cullity, B. D., & Stock, Stuart R. (2014). Elements of x-ray diffraction (3rd ed.; Pearson new international edition., p. ii). Pearson.
2. Will, Georg. (2006). Powder diffraction: the Rietveld method and the two-stage method to determine and refine crystal structures from powder diffraction data (p. ix). Springer.
3. Furrer A., Mesot J., Strassle T. (2009) Neutron Scattering in Condensed Matter Physics, World Scientific.
4. Rodrigues-Carvajal J. (2000) An Introduction to the Program FullProf.
5. Pynn R. (1990) Neutron Scattering – A primer, LANSCE.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Ramūnas Skaudžius	Dr.	<ol style="list-style-type: none"> 1. G. Inkrataite, M. Kemere, A. Sarakovskis, R. Skaudžius. Influence of Boron on the Essential Properties for New Generation Scintillators. <i>J. Alloy. Compd.</i> (2021) https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160002. 2. A. Pakalniškis, R. Skaudžius, D. V. Zhaludkevich, A. L. Zhaludkevich, D. O. Alikin, A. S. Abramov, T. Murauskas, V. Ya. Shur, A. A. Dronov, M. V. Silibin, A. Selskis, R. Ramanauskas, A. Lukowiak, W. Streck, D. V. Karpinsky, A. Kareiva. Morphotropic Phase Boundary in Sm-Substituted BiFeO₃ Ceramics: Local vs Microscopic Approaches. <i>J. Alloy. Compd.</i> (2021) https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159994. 3. G. Inkrataite, A. Zabaliute-Karaliune, J. Aglinskaite, P. Vitta, K. Kristinaityte, A. Marsalka, R. Skaudžius. Study of YAG:Ce and Polymer Composite Properties for Application in LED Devices. <i>ChemPlusChem</i> 85(7) (2020) 1504-1510, https://doi.org/10.1002/cplu.202000318.

		<ol style="list-style-type: none"> 4. A. Pakalniškis, A. Lukowiak, G. Niaura, P. Głuchowski, D.V. Karpinsky, D.O. Alikin, A.S. Abramov, A. Zhaludkevich, M. Silibin, A.L. Kholkin, R. Skaudžius, W. Streck, A. Kareiva. Nanoscale ferroelectricity in pseudo-cubic sol-gel derived barium titanate - bismuth ferrite (BaTiO₃-BiFeO₃) solid solutions. <i>J. Alloy. Compd.</i> 830 (2020) 154632, https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.154632. 5. Karpinsky, D.V., Fesenko, O.M., Silibin, M.V., Dubkov, S.V., Chaika, M., Yaremkevich, A., Lukowiak, A., Gerasymchuk, Y., Stręk, W., Pakalniškis, A., Skaudzius, R., Kareiva, A., Fomichov, Y.M., Shvartsman, V.V., Kalinin, S.V., Morozovsky, N.V., Morozovska, A.N. Ferromagnetic-like behavior of Bi_{0.9}La_{0.1}FeO₃-KBr nanocomposites. <i>Sci. Rep-UK.</i> 9 (2019) 10417, DOI: 10.1038/s41598-019-46834-0 6. M. Skruodiene, A. Katelnikovas, L. Vasylechko, R. Skaudzius, Tb³⁺ to Cr³⁺ Energy transfer in a co-doped Y₃Al₅O₁₂ host. <i>J. Lumin.</i> 208 (2019) 327-333. 7. J. Raudonienė, R. Skaudzius, A. Zarkov, A. Selskis, E. Garskaite, Wet-chemistry synthesis of shape-controlled Ag₃PO₄ crystals and their 3D surface reconstruction from SEM imagery. <i>Powder Technol.</i> 345 (2019) 26-34. 8. A. Smalenskaite, A.N. Salak, M.G.S.Ferreira, R.Skaudzius, A.Kareiva, Sol-gel synthesis and characterization of hybrid inorganic-organic Tb(III)-terephthalate containing layered double hydroxides. <i>Opt. Mat.</i> 80 (2018) 186-196. 9. A. Laurikenas, A. Katelnikovas, R. Skaudzius, A. Kareiva, Synthesis and characterization of Tb³⁺ and Eu³⁺ metal-organic frameworks with TFBDC²⁻ linkers. <i>Opt. Mat.</i> 83 (2018) 363-369. 10. R. Skaudzius, M. Misevicius, V. Brimiene, M. Beniuse, G. Brimas, A. Kareiva, SEM (EDX) is an indispensable tool for the characterization of subcutaneous, preperitoneal and visceral adipose tissue of obese patients. <i>Chemija</i> 29 (2018) 67-80. 11. R. Skaudžius, D. Enseling, M. Skapas, A. Selskis, E. Pomjakushina, T. Jüstel, A. Kareiva, C. Rüegg. Europium-Enabled Luminescent Single Crystal and Bulk YAG and YGG for Optical Imaging. <i>Opt. Mat.</i> 60 (2016) 467-473. 12. M. Skruodiene, M. Misevicius, M. Sakalauskaite, A. Katelnikovas, R. Skaudzius. Doping effect of Tb³⁺ ions on luminescence properties of Y₃Al₅O₁₂:Cr³⁺ phosphor. <i>J. Lumin.</i> 179 (2016) 355-360. 13. R. Skaudzius, T. Juestel, A. Kareiva. Luminescence properties of Ln³⁺-doped (Ce³⁺, Eu³⁺, Tb³⁺ or Er³⁺) Mixed-Metals Y₃(Al,In)₅O₁₂ and Y₃Al_{4.75}Cr_{0.25}O₁₂ garnets synthesized by Sol-Gel method. <i>Mater. Chem. Phys.</i>, 170 (2016) 229-238.
--	--	---

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2021 m. rugsėjo 28 d., protokolo Nr. 610000-KT-142.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva

