

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Pereinamųjų metalų oksidų zolių-gelių chemija	Chemija N 003	CHGF Chemijos institutas	Neorganinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	
Individualus	10	Seminarai	

Dalyko anotacija

Pagrindinės dispersinių sistemų sąvokos. Klasifikacija. Zolių susidarymo bendrieji dėsniniai. Fizikiniai ir cheminiai metodai. Zolių gryninimas. Zolių patvarumas ir koaguliacija. Zolių reologinės ir optinės savybės.

Zolių-gelių sintezės metodas. Pereinamųjų metalų oksidų sintezė. Zolių-gelių procesas vandeninėje terpėje. Hidrolizės ir kondensacijos procesai pereinamųjų metalų vandeniniuose tirpaluose. Metalų katijonų hidrolizė. Krūvis - pH diagramos. Kondensacijos reakcijų iniciavimas. Oliacijos mechanizmas. Nuosėdų ir gelių susidarymas. M(II) metalų oksidų zoliai ir geliai. M(III) metalų oksidų zoliai ir geliai. Oksoliacijos mechanizmas. Polianijonai. Anijonų įtaka zolių-gelių procese. Metalų katijonų kompleksavimas. Bazinių druskų formavimas. Oksidacijos – redukcijos reakcijos pereinamųjų metalų oksidų zolių-gelių chemijoje. Pereinamųjų metalų zolių-gelių proceso netiesioginis tyrimas.

Zolių-gelių procesas nevandeninėje terpėje. Metalų alkoholiatų hidrolizė ir kondensacija. Metalų alkoholiatų cheminis modifikavimas. Metalų karboksilatai. Metalų alkoholiatai su polidentatiniais ligandais. Ligandų mainų reakcijos. Hidrolizės ir kondensacijos reakcijos aliuminio neorganinių druskų ir alkoholiatų tirpaluose.

Agregacija ir interkaliacija. Anizotropiniai agregatai. Vanadžio pentoksido gelių interkaliacinės savybės. Pereinamųjų metalų oksidų gelių fizikinės savybės. Daugiakomponenčių metalų oksidų sintezė zolių-gelių metodu. Aukštatemperatūriniai superlaidininkai. Feroelektrinės medžiagos. Silikageliai. Aliuminatai. Legiruotų aliuminio oksidų ir aluminatų sintezė. Karboksilatoaliumoksanų sintezės metodas. Perovskitinių medžiagų sintezė ir taikymas. Optinės medžiagos. Biokeraminės medžiagos. Plonų ir storų plėvelių formavimas zolių-gelių metodu.

Pagrindinė literatūra

1. C. J. Brinker and G. W. Scherer. Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing. Academic Press, London, 1990.
2. J. Livage, M. Henry and C. Sanchez. Sol-Gel Chemistry of Transition Metal Oxides. Progress in Solid State Chemistry. 18 (1988) 259-342.
3. A. Kareiva. Aqueous sol-gel synthesis methods for the preparation of garnet crystal structure compounds. *Materials Science (Medžiagotyra)*, **17** (2011) 428-437.
4. K. Ishikawa and A. Kareiva. Sol-gel synthesis of calcium phosphate-based coatings – a review. *Chemija*, **31** (2020) 25-41.
5. K. Ishikawa, E. Garskaite and A. Kareiva. Sol-gel synthesis of calcium phosphate-based biomaterials - A review of environmentally benign, simple and effective synthesis routes. *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, **94** (2020) 551-572.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Aivaras Kareiva	Habil. dr.	<ol style="list-style-type: none"> 1. L. Sinusaite, A. Popov, E. Raudonyte-Svirbutaviciene, J. C. Yang, A. Kareiva and A. Zarkov. Effect of Mn doping on hydrolysis of low-temperature synthesized metastable alpha-tricalcium phosphate. <i>Ceramics Int.</i> 47 (2021) 12078-12083. 2. A. Laurikenas, D. Sakalauskas, A. Marsalka, R. Raudonis, A. Antuzevics, V. Balevicius, A. Zarkov, A. Kareiva. Investigation of lanthanum substitution effects in yttrium aluminium garnet: Importance of solid state NMR and EPR methods. <i>J. Sol-Gel. Sci. Technol.</i>, 97 (2021) 479-487. 3. L. Sinusaite, A. Kareiva and A. Zarkov. Thermally induced crystallization and phase evolution of amorphous calcium phosphate

		<p>substituted with divalent cations having different size. <i>Crystal Growth & Design</i>. 21 (2021) 1242-1248.</p> <p>4. D. Karoblis, A. Zarkov, E. Garskaite, K. Mazeika, D. Baltrunas, G. Niaura, A. Beganskiene, A. Kareiva. Study of gadolinium substitution effects in hexagonal yttrium manganite $YMnO_3$. <i>Scientific Reports</i>. 11 (2021) 2875.</p> <p>5. A. Čiuladienė and A. Kareiva. Application of red paint data library for the characterization of the manuscript from Grand Duchy of Lithuania. <i>Microchem. J.</i>, 164 (2021) 105961.</p> <p>6. R. Diliautas, A. Beganskiene, D. Karoblis, K. Mazeika, D. Baltrunas, A. Zarkov, R. Raudonis and A. Kareiva. Reinspection of formation of $BiFe_{1-x}Mn_xO_3$ solid solutions via low temperature sol-gel synthesis route <i>Solid State Sci.</i>, 111 (2021) 106458.</p>
--	--	--

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