

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Institutas	Padalinys
Cheminė fizika	Fizika 02P	Fizinių ir technologinių mokslų centras	Molekulinių darinių fizikos skyrius
Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)
Paskaitos		Konsultacijos	4,5
Individualus	4,5	Seminarai	

Dalyko anotacija

Cheminės fizikos kaip mokslo krypties samprata. Organinių junginių pagrindinės klasės, jų savybės, sandaros ypatumai. Organinių junginių elektroninė sandara, energijos lygmenų įvairovė. Cheminių ryšių tipai. Joniniai, kovalentiniai ir vandeniliniai ryšiai. Atominės ir molekulinės orbitalės. Orbitalių hibridizacijos tipai: Electron transfer sp³d². Orbitalių sanklota. Elektronų delokalizacija. Chromoforinės grupės.

Kvantiniai šuoliai organinėse medžiagose. Šuolių intensyvumas. Optinė sugertis ir liuminescencija. Sužadintos elektroninės-vibracinės būsenos ir jų evoliucijos kanalai. Sukinio ir orbitalės sąveika. Atrankos taisyklės. Franko-Kondono principas. Singuletiniai ir tripletiniai molekulių sužadinimai.

Tarpmolekulinės sąveikos jėgos: dispersinės, orientacinės ir indukcinės. Solvatacija. Elektroninė ir branduolinė solvatacijos dalys. Solvatacijos įtaka chromoforų spektrams. Sužadintų chromoforų solvatacijos dinamika.

Sužadinimo energijos pernaša. Fiorsterio ir Deksterio energijos pernašos mechanizmai. Energijos migracija. Sužadinimų anihiliacija.

Elektrono pernaša organiniuose junginiuose. Markuso teorija. Susidūrimo kompleksai, eksimerai, eksipleksai. Donorinė-akceptorinė sąveika. Krūvio pernašos kompleksai. Malikeno teorija. Vidumolekulinė krūvio pernaša. Fotoizomerizacija. „TICT“ būsenos.

Molekuliniai dimerai ir agregatai. Dimerų ir agregatų sugertis ir liuminescencija. Eksitonai.

Kietosios molekulinės medžiagos. Molekuliniai kristalai, amorfinės medžiagos, polimerai, konjuguotieji polimerai. Neutralios sužadintosios ir jonizuotosios būsenos organiniuose kristaluose ir polimeruose. Krūvininkų fotogeneracija. Fotogeneracijos kvantinis našumas. Pirminiai krūvio atskyrimo ir rekombinacijos vyksmai. Onzagerio mechanizmas. CT- ir CP-būsenos. Krūvininkų judris.

Molekulinės elektronikos prietaisai: organiniai lauko tranzistoriai, Saulės elementai, šviestukai, jų sandara ir veikimo principai.

Pagrindinė literatūra
1. Atkins P.W. Physical Chemistry. Oxford University Press, 1998. 1014 p.
2. E. Silinsh, V. Capek, Organic Molecular Crystals: Interaction, Localization, and Transport Phenomena, American Institute of Physics, 1997.
3. Pope M., Svenberg C.E. Electronic processes in organic crystals. N.Y.: Oxford Uni. Press, 1999, 1328 p.
4. 4. Gulbinas V. Molekulinių vyksmų fizika: lazerinė spektroskopija. Vilniaus universitetas, 2007, 167 psl.
5. Juršėnas S. Organiniai puslaidininkiai. Vilniaus universitetas, 2008, 137 psl.
6. Undžėnas A. Organinių junginių fotonikos pagrindai. Vilnius, 1999. 270 p.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Vidmantas Gulbinas	habil. dr.	prof.	<p>D. Peckus, A. Devižis, R. Augulis, S. Graf, D. Hertel, K. Meerholz, V. Gulbinas, “Charge Transfer States in Merocyanine Neat Films and Its Blends with [6,6]-Phenyl-C-61-butyric Acid Methyl Ester”, <i>Journal Of Physical Chemistry C</i> 117, 6039-6048, 2013.</p> <p>D. Amarasinghe Vithanage, A. Devižis, V. Abramavičius, Y. Infahsaeng, D. Abramavičius, R.C.I. MacKenzie, P.E. Keivanidis, A. Yartsev, D. Hertel, J. Nelson, V. Sundstrom, V. Gulbinas, “Visualizing charge separation in bulk heterojunction organic solar cells”, <i>Nature Communications</i> 4, 2334, 2013.</p> <p>V. Abramavičius, D. Amarasinghe Vithanage, A. Devižis, Y. Infahsaeng, A. Bruno, S. Foster, P. E. Keivanidis, D. Abramavičius, J. Nelson, A. Yartsev, V. Sundstrom and V. Gulbinas, “Carrier motion in as-spun and annealed P3HT:PCBM blends revealed by ultrafast optical electric field probing and Monte Carlo simulations” <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 16, 2686-2692, 2014.</p> <p>V. Pranculis, Y. Infahsaeng, Z. Tang, A. Devižis, D. A. Vithanage, C. S. Ponseca, Jr., O. Inganäs, A. P. Yartsev, V. Gulbinas, V. Sundström, “Charge Carrier Generation and Transport in Different Stoichiometry APFO3:PC61BM Solar Cells” <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 136, 11331–11338, 2014.</p> <p><i>Melianas, V. Pranculis, A. Devižis, V. Gulbinas, O. Inganäs, M. Kemerink, “Dispersion-dominated photocurrent in polymer:fullerene solar cells” Advanced Functional Materials, 24, 4507-4514, 2014.</i></p> <p>Kadashchuk, Yu. Skryshevski, A. Vakhnin, S. Toliautas, J. Sulskus, R. Augulis, V. Gulbinas, S.</p>

		<p>Nespurek, J. Genoe, L. Valkunas, “Highly efficient intrinsic phosphorescence from a σ-conjugated poly(silylene) polymer” <i>J. Phys. Chem. C</i>, 118, 22923–22934, 2014.</p> <p>Devižis, J. De Jonghe-Risse, R.Hany, F. Nuesch, S. Jenatsch, V. Gulbinas, J.-E . Moser, “Dissociation of Charge Transfer States and Carrier Separation in Bilayer Organic Solar Cells: A Time-Resolved Electroabsorption Spectroscopy Study”, <i>Journal of the American Chemical Society</i>, 137, 8192-8198, 2015.</p> <p>R. Augulis, A. Devižis, D. Peckus, V. Gulbinas, D. Hertel, K. Meerholz, “High electron mobility and its role in charge carrier generation in merocyanine/fullerene blend”, <i>Journal of Physical Chemistry C</i>, 119, 5761-5770, 2015.</p> <p>K. Kanosue, R. Augulis, D. Peckus, R. Karpicz, T. Tamulevicius, S. Tamulevicius, V. Gulbinas, S. Ando, “Polyimide and Imide Compound Exhibiting Bright Red Fluorescence with Very Large Stokes Shifts via Excited-State Intramolecular Proton Transfer II. Ultrafast Proton Transfer Dynamics in the Excited State” <i>Macromolecules</i>, 49, 1848-1857, 2016.</p>
--	--	---

Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2017 m. vasario mėn. 21 d.,
protokolo Nr. 108

Komiteto pirmininkas S. Juršėnas