

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas/ Institutas	Katedra/Skyrius
Optinė spektroskopija	02P	Fizikos institutas	
Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)
paskaitos	3	konsultacijos	1,5
individualus	6	seminarai	1,5

### Dalyko anotacija

#### **Molekulinių medžiagų elektroninė spektroskopija.**

**Teoriniai pagrindai.** Elektroniniai šuoliai atomuose ir molekulėse. Elektroninių šuolių intensyvumai, atrankos taisyklės. Linijų išplitimas. Elektroninių šuolių energijos. Molekulių sugertis ir liuminescencija. Fluorescencija ir fosforescencija. Einšteino sąryšiai. Sudėtingų molekulių sugerties ir fluorescencijos spektrai, jų sąryšiai. Aplinkos įtaka sugerties ir liuminescencijos spektrams. Vanje-Motto, krūvio pernašos ir frenkelio eksitonai. Eksitonų delokalizacija agregatuose ir kietosiose molekulinėse medžiagose. Eksitonų lokalizacijos mechanizmai. Energijos pernaša ir fluorescencijos gesinimas. Krūvio pernaša, Markus teorija.

**Eksperimentiniai tyrimo metodai.** Stacionariosios sugerties ir liuminescencijos spektroskopija. Liuminescencijos dinamikos tyrimo metodai. Nanosekundinė ir ultrasparčioji sugerties žadinimo-zondavimo spektroskopija. Dinaminių gardelių metodas. Dvimatė koherentinė elektroninė ir virpesinė spektroskopija. Elektrosugerties ir elektroluminescencijos spektroskopija. Pavienių molekulių spektroskopija.

#### **Virpesinė spektroskopija.**

**Teoriniai pagrindai.** Infraraudonųjų ir Ramano spektrų prigimtis. Dviatomės molekulės virpesiai. Daugiaatomių molekulių virpesiai. Normaliniai virpesiai. Molekulių ir vibracijų simetrija. Fermi rezonansas. IR ir Ramano spektrų atrankos taisyklės. Rezonansinė Ramano (RR) ir koherentinė anti-stokso Ramano spektroskopija (KARS). Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (PSRS), stiprinimo mechanizmai, paviršiaus plazmonai. Izotopinių molekulių vibracijos. Ramano juostų depoliarizacijos santykis. Anomali poliarizacija. Charakteringieji virpesiai, spektrų interpretacija. Suminio dažnio generacijos (SDG) vibracinės spektroskopijos pagrindai.

**Eksperimentiniai tyrimo metodai.** FTIR spektroskopija. Pažeistojo vidaus atspindžio (angl. ATR), atspindžio-sugerties (angl. RAIRS) ir moduliaciniai IR spektroskopijos metodai. Atrankos taisyklės ant metalo paviršiaus adsorbotų junginių spektrams. Bandinių ruošimo ypatumai. Ramano spektrometro kalibracija. Paviršiai ir nanodalelės naudojami PSRS. Lazeriai Ramano spektroskopijai. UV-RR, Vis-Ramano ir FT-Ramano spektroskopijos metodų palyginimas. Ramano mikroskopija. SDG eksperimento ypatumai.

**Taikymas.** Molekulių cheminio ryšio, tarpmolekulinės sąveikos, vandenilinio ryšio, kompleksų susidarymo tyrimas. Biomolekulių virpesinė spektroskopija. Baltymų aktyvių centrų RR spektroskopija. Adsorbuotų junginių orientacijos ir sąveikos tyrimai, savitvarčių monosluoksnių struktūros tyrimai. Laidžiųjų polimerų tyrimai virpesinės spektroskopijos metodais. Vienos molekulės PSRS.

#### **Puslaidininkinių nanodarinių spektroskopija.**

**Kvantiniai kietojo kūno dariniai.** Kvantinės struktūros: kvantinės duobės, supergardelės, kvantinės gijos, kvantiniai taškai. Eksitonai. Plazmonai. Magnonai. Nepriklausomų dviejų lygmenų sistema. Puslaidininkinės Blocho lygtys. Išsifazavimo procesai. Fazinės relaksacijos laikų matavimo principai. Krūvininkų relaksacija nanodariniuose. Kvantiniai mušimai. Blocho

osciliacijos. Fononų dinamika. Eksitonų dinamika. Nemarkoviški procesai (*non-Markovian processes*). Tuneliavimo reiškiniai puslaidinkiniuose nanodariniuose.

***Eksperimentiniai tyrimo metodai:***

Fotoluminescencija ir žadinimo spektroskopija, optinė moduliacinė spektroskopija, pralaidumo spektroskopija, atspindžio spektroskopija, spektroskopija su laikine skyra; pavienių fotonų skaičiavimo eksperimentuose principai. Ultrasparčiosios spektroskopijos principai bei metodikos: žadinimo-zondavimo (*pump-probe*) spektroskopija, keturių-bangų maišymo metodas (*four-wave-mixing*), terahercinė spektroskopija. Koherentinė spektroskopija ir jos taikymai krūvininkų pernašos puslaidininkiniuose nanodariniuose tyrimams. Terahercinė puslaidininkinių darinių spektroskopija.

Netiesinės kieto kūno ir kvantinių darinių spektroskopijos principai. Didelio sužadavimo sąlygoti reiškiniai kietame kūne. Dvifotonė absorbcija. Motto tankis. Optinis bistabilumas.

**Pagrindinė literatūra**

W. Demtroder, *Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation*, Springer-Verlag, Berlin 1996.

V. Gulbinas. Šviesos sukelti molekuliniai vyksmai ir jų lazerinė spektroskopija, Vilnius, leidykla TEV, 2008

B. Valeur, M. N. Berberan-Santos „Molecular fluorescence : principles and applications“, Wiley-VCH, 2001.

R. Ferraro, K. Nakamoto, *Introductory Raman spectroscopy*, Academic Press, 2003.

F. Siebert, P. Hildebrandt, *Vibrational spectroscopy in life science*, Wiley-VCH, 2008.

E. C. Le Ru, P. G. Etchegoin, *Principles of surface-enhanced Raman spectroscopy and related plasmonic effects*, Elsevier, Amsterdam, 2009.

V. Vaičiškuskas, G.-J. Babonas, Z. Kuprionis, G. Niaura, V. Šablinskas, *Paviršiaus optinė spektroskopija*, TEV, 2008.

C. F. Klingshirn, *Semiconductor optics*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1997.

Jagdeep Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, Springer-New York, 1999.

**Papildoma literatūra**

J. R. Lakowicz. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Springer, 2006.

S. Mukamel, *Principles of Nonlinear Spectroscopy*, Oxford Univ. Press, 1999.

S. Juršėnas. *Organiniai puslaidininkiai*. Vilniaus universitetas, 2008.

B. Stuart, *Infrared spectroscopy: fundamentals and applications*, John Wiley & Sons, 2004.

K. Nakamoto, *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, Parts A and B*, John Wiley and Sons, 1997.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus (5-ios ISI publikacijos)
	Habil. Dr.	Prof.	A. 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>J. Am. Chem. Soc.</i> , 137, 8192-8198, 2015.

Vidmantas Gulbinas			<p>Augulis, R., Devižis, A., Peckus, D., 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>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>, <b>136</b>, 11331–11338, 2014.</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> <b>4</b>, 2334, 2013.</p> <p>A. Devižis, A. Serbenta, K. Meerholz, D. Hertel and V. Gulbinas “Ultrafast dynamics of carrier mobility in a conjugated polymer probed at molecular and microscopic length scales using an optical second-harmonic-generation technique”, <i>Phys. Rev. Lett.</i> <b>103</b>, 027404 (2009)</p>
Gediminas Niaura	Habil. Dr.		<p>I. Matulaitienė, Z. Kuodis, A. Matijoška, O. Eicher-Lorka, G. Niaura, SERS of positive charge bearing pyridinium ring terminated self-assembled monolayers: structure and bonding spectral markers, <i>J. Phys. Chem. C</i> <b>119</b>, 26481 (2015).</p> <p>I. Matulaitienė, E. Pociūtė, Z. Kuodis, O. Eicher-Lorka, G. Niaura, Interaction of 4-imidazolemethanol with a copper electrode revealed by isotope-edited SERS and theoretical modelling, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>17</b>, 16483 (2015).</p> <p>V. Kocherbitov, J. Latynis, A. Misiūnas, J. Barauskas, Hydration of lysozyme studied by Raman spectroscopy, <i>J. Phys. Chem. B</i> <b>117</b>, 4981 (2013).</p> <p>R. Trusovas, K. Ratautas, G. Račiukaitis, J. Barkauskas, I. Stankevičienė, G. Niaura, R. Mažeikienė, Reduction of graphite oxide to graphene with laser irradiation, <i>Carbon</i> <b>52</b>, 574 (2013).</p> <p>I. Ignatjev, E. Proniewicz, L. M. Proniewicz, G. Niaura, Effect of potential on temperature-dependent SERS spectra of neuromedin B on Cu electrode, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>15</b>, 807 (2013).</p>
	Habil.	Prof.	Maris Bauer, Rimvydas Venckevičius, Irmantas

Gintaras Valušis	Dr.		<p>Kašalynas, Sebastian Boppel, Martin Mundt, Linas Minkevičius, Alvydas Lisauskas, Gintaras Valušis, Viktor Krozer, and Hartmut G. Roskos, <i>Antenna-coupled field-effect transistors for multi-spectral terahertz imaging up to 4.25 THz</i>, <a href="#">Optics Express</a>, 2014, Vol. <b>22</b>, No. 16, p. 19235-19241.</p> <p>R. Nedzinskas, B. Čechavičius, A. Rimkus, E. Poizingytė, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. H. Li and E. H. Linfield, <i>Temperature-dependent modulated reflectance of InAs/InGaAs/GaAs quantum dots-in-a-well infrared photodetectors</i>, <a href="#">Journal of Applied Physics</a>, 2015, Vol. <b>117</b>, art. no. 144304, 7 pages.</p> <p>Uroš Puc, Andreja Abina, Melita Rutar, Aleksander Zidanšek, Anton Jeglič, and Gintaras Valušis, <i>Terahertz spectroscopic identification of explosive and drug simulants concealed by various hiding techniques</i>, <a href="#">Applied Optics</a>, 2015, Vol. <b>54</b>, No.14, P. 4495-4502.</p> <p>Andrius Rimkus, Evelina Poizingytė, Ramūnas Nedzinskas, Bronislovas Čechavičius, Julius Kavaliauskas, Gintaras Valušis, Lianhe Li, Edmund H. Linfield, <i>Temperature-dependent modulated reflectance and photoluminescence of InAs–GaAs and InAs–InGaAs–GaAs quantum dot heterostructures</i>, <a href="#">Optical and Quantum Electronics</a>, 2016, Vol. <b>48</b>, art. no. 202, 6 pages.</p> <p>K. Batrakov, P. Kuzhir, S. Maksimenko, N. Volynets, S. Voronovich, A. Paddubskaya, G. Valusis, T. Kaplas, Yu. Svirko, and Ph. Lambin, <i>Enhanced microwave-to-terahertz absorption in graphene</i>, <a href="#">Applied Physics Letters</a>, 2016, Vol. <b>108</b>, art. no. 123101, 4 pages.</p>
------------------	-----	--	---

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

Komiteto pirmininkas S. Juršėnas