



FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS
MOKSLŲ CENTRO

11 DOKTORANTŲ IR JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ KONFERENCIJA

2021 m. spalio 20-21d.
TEZIŲ RINKINYS



FIZINIŲ IR
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ
CENTRAS

TURINYS

Aidas Sadauskas. Mokinių žinių apie astronominius mastelius nustatymas.	 5
Paulius Šlevas. Beselio pluoštų superpozicijų formavimas geometrinės fazės elementais.	 6
Danielius Lingis. Protonų kanaliavimo silicio kristale skaitinis modeliavimas GEANT4 programiniu paketu.	 7
Andrius Kamarauskas. Fabry Pero rezonanso moduliacija grafeno kondensatoriumi suformuotu ant silicio plokštelės.	 8
Martynas Bertašius. Sb ₂ Se ₃ augimo mechanizmo ant žėručio padėklų tyrimas.	 9
Rokas Gegevičius. S-Methylthiuronium Improves the Photostability of Methylammonium Lead Iodide Perovskites.	 10
Rokas Jasiūnas. Krūvininkų judėjimas realiomis organinių saulės elementų veikimo sąlygomis.	 11
Daniil Pashnev. Studying conductance of thin layer on insulating substrate using terahertz spectroscopy.	 12
Ričardas Norkus. THz impulsų emisijos spektroskopija.	 13
Justinas Jorudas. Characterization of graphene electrical properties by combined terahertz and infrared spectroscopy methods.	 14
Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė. Terahercinis Airy vaizdinimas naudojant silicio optiką.	 15
Vladislovas Čižas. THz/sub-THz frequency range thermal metamaterial emitters.	 16
Karolis Stašys. Molekuliųjų pluoštelių epitaksijos sąlygų įtaka kvantinių kaskadinių lazerių paviršiaus kokybei.	 17
Andrea Zelioli. Indium content influence on emission wavelength in InGaAs quantum wells.	 18
Ernesta Bužavaitė-Vertelienė. Stipriosios sąveikos režimas hibridinėse Tamm'o plazmonų - paviršinių plazmonų poliaritonų modose.	 19
Jaroslav Kodz. Sanjako efektu pagrįstas optinis izoliatorius.	 20
Gustas Liaugminas. Šviesolaidinis derinamo bangos ilgio impulsų generatorius, paremtas fazės savimoduliacija ir pakaitiniu spektriniu filtravimu.	 21
Lukas Ramalis. Skulptūrinių plonų sluoksnių pagrindu suformuoti silicio oksido veidrodžiai didelės galios lazeriams.	 22
Romuald Petkevič. Aukštos skyriamosios gebos lazerinio metalo nusodinimo galvutė.	 23
Vitalij Fiodorov. Lazeriu asistuojamas selektyvus dielektrikų padengimas metalu.	 24
Vytautas Vosylius. Lazeriu asistuojamas PTFE padengimas metalu kataliniu būdu.	 25
Karolis Adomavičius. Pilnojo lauko optinė koherentinė tomografija su skaitmenine aberacijos korekcija.	 26
Justas Dilys. Bekvapio Kalmano filtro diegimas skirtu sinchroniniam varikliui su nuolatiniais magnetais greičio valdymui.	 27
Lena Golubewa. Gold-coated black silicon-based SERS-substrate as a robust and versatile bio-sensing platform.	 28
Maliha Parvin. Generation of reactive chlorine species on highly porous thick WO ₃ photoanode.	 29
Raimonda Bogužaitė. Application of Molecularly Imprinted Polypyrrole for Electrochemical Sensor Design.	 30
Vytautas Žutautas. Laidaus vitamino B9 polimero taikymas nustatyti pH.	 31
Antanas Nacys. Skruzdžių rūgšties oksidacijos tyrimas ant Pt-Ni/Ni kietųjų putų katalizatorių.	 32

Julija Petkevičiūtė. Plazminio modifikavimo įtaka vilną dažant PEDOT:PSS polimeru.	... 33
Jokūbas Preikša. Development of new computational methods to determine sublimation enthalpies using crystallographic data.	... 34
Agnė Zdaniauskienė. Adsorbuotų biomolekulių elektrocheminėje fazių riboje charakterizavimas SHINERS metodu.	... 35
Audrė Kalinauskaitė. Kietos fazės formavimas betaino ir ksilitolio natūraliuose eutektiniuose tirpikliuose.	... 36
Paulius Gaigalas. Cisteinu hibridizuotų molibdeno disulfido dangų sintezė ir elektrokatalizinio aktyvumo tyrimas.	... 37
Audrius Sadaunykas. Analizių fokusavimo ir koncentravimo ant dujų chromatografinės kolonėlės galimybių tyrimai.	... 38
Edvinas Navakasas. Deuteracijos įtaka fosfolipidinių monosluoksnių savybėms.	... 39
Raman Novikau. Study of Cesium and Cobalt Adsorption by Composite Based on Clay, Graphene Oxide and Magnetite/Maghemite.	... 40
Katsiaryna Charniakova. Formation of alumina nanofibres during high-field aluminum anodizing.	... 41
Edith Flora Joel. Anti-Bacterial Properties of Thin Films Based on Graphene Oxide Chitosan Copper Platinum Nano Composites.	... 42
Davit Tediashvili. Characterization of Mn-based cathode materials for aqueous Na-ion batteries using the rotating ring-disc technique	... 43
Nadežda Traškina. Optimization of the carbon coating of active materials for aqueous Na-ion batteries.	... 44
Gintarė Gečė. How to control morphology of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ nanoparticles?	... 45
Karolina Maleckaitė. Raudonai fluorescuojantys, aplinkai jautrūs BODIPY fluoroforai.	... 46
Julija Dronina. Real-Time and Label-Free Evaluation of T7 DNA Polymerase Immobilization.	... 47
Skirmantas Norkus. Adityvios gamybos būdu suformuoto β -trikalcio fosfato savybių analizė ir perspektyvos kaulinio audinio regeneracijoje.	... 48
Justina Kavaliauskaitė. Pulsed electric fields activate NF- κ B pathway-controlled gene expression in human cervix carcinoma cells without damage to membrane integrity and viability.	... 49
Neringa Bakutė. Metalinių paviršių biosuderinamumas optoporacijos tyrimams.	... 50
Kamilė Jonynaitė. Plazmos poveikio taikymas vertingų junginių ekstrakcijai iš mikrodumblių, naudotų nuotekų bioremediacijoje.	... 51
Greta Gančytė. Osmosinio šoko poveikio <i>Saccharomyces cerevisiae</i> ląstelių atsakui į elektrinio lauko impulsą tyrimas.	... 52
Ahmed Taha. Applications of green technologies in food processing.	... 53
Daria Pashneva. Source Apportionment of Black Carbon Aerosol and its Deposition on Tree Foliage.	... 54
Touqeer Gill. Investigation of 5-Years Submicron Organic Aerosol Composition in Rūgšteliškis (Lithuania) Rural Environment.	... 55
Vitaliy Romanenko. The estimation of anthropogenic radionuclides levels in the Curonian lagoon due to the increasing environmental risk.	... 56
Vincentas Mindaugas Mačiulis. Evaluation of novel coronavirus SARS-CoV-2 nucleocapsid protein interaction with specific antibodies by total internal reflection ellipsometry.	... 57
Kamilė Kandrotaitė. Medžiaginių kaukių filtravimo efektyvumo nustatymas.	... 58
Sonata Pleskytė. Mikroplastiko dalelių charakterizavimas ir šalinimas skirtingais nuotekų vandens valymo etapais.	... 59
Agnė Minderytė. Taršos aerolio juodąja anglimi lygio nustatymas pėstiesiems ir dviratininkams skirtose vietose Vilniaus mieste.	... 60

Matas Tartėnas. Juodųjų skylių akrecijos ir grįžamojo ryšio skaitmeninio modeliavimo tobulinimas.	 61
Monika Jokubauskaitė. Influence of parabolic AlGaAs barrier on the photoluminescence of GaAsBi quantum wells.	 62
Arnas Pukinskas. GaAsBi kvantinių duobių atkaitinimas MBE reaktoriuje.	 63
Karolis Redeckas. Kvantinių duobių infraraudonosios srities fotodetektorius, veikiantis kambario temperatūroje.	 64
Benas Bužinskas. Teraherzinio vaizdinimo taikymas mene ir pramonėje.	 65
Sukomol Barua. Investigation of 3D NiMo coatings decorated with Au particles for borohydride oxidation.	 66
Ignas Bitinaitis. Comparison of in-situ and ex-situ investigations of ultrathin sputtered silver film growth.	 67
Mantas Drazdys. SiO ₂ plonų sluoksnių atominio storio sluoksnio nusodinimo technologinio proceso optimizavimas.	 68
Kazimieras Petrauskas. Perovskitų fotoelektrinių savybių priklausomybė nuo cezio koncentracijos.	 69
Laura Tauraitė. Našesnis lazerinis mikroapdirbimas panaudojant modifikuotus Beselio pluoštus.	 70
Aliona Klimovich. SERS-active substrates based on black silicon for the detection of analytes with a high potential for reusability and storage.	 71
Laurynas Bučinskas. Stabiliųjų sieros izotopų santykio ir radioanglies metodų taikymai aerozolių šaltinių charakterizavimui.	 72
Maryia Drobysh. Development of electrochemistry-driven biosensing methods for determining antibodies against SARS-CoV-2 protein.	 73
Paulius Kizevičius. Plokščio THz elemento, pagaminto abliuojant silicį femtosekundiniais lazeriniais impulsais, analizė.	 74
Laurynas Butkus. Itin mažai anglies turinčių medžiagų grafitizavimas su sistema AGE-3.	 75
Karolis Mundrys. Optinių Airy pluoštų erdvinio valdymo metodai pasitelkus fazinius elementus.	 76
Adomas Charevičius. Electrical properties of InGaAs terahertz detectors with integrated diffraction optics.	 77
Shathya Duobienė. Design of a wireless sensor network for temperature and humidity monitoring	 78
Nargis Sardar. Photo-active hydrogel: an alternative to treat chronic wound infections.	 79

MOKINIŲ ŽINIŲ APIE ASTRONOMINIUS MASTELIUS NUSTATYMAS

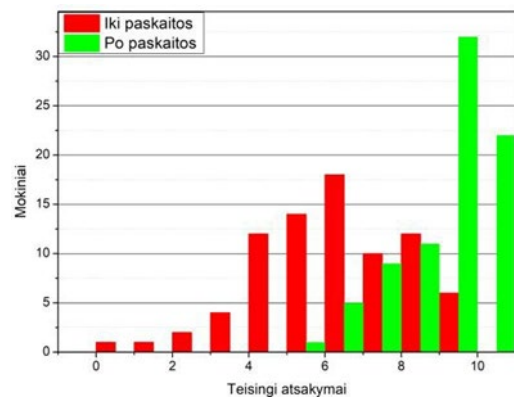
Aidas Sadauskas, Kastytis Zubovas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: a.sadauskas@gmail.lt

Fiziniuose moksluose, ypač astronomijoje yra svarbu suprasti objektų bei reiškinių mastelį. Šiais laikais astronomijos edukacijoje prie to labiausiai prisideda kompiuterinės vizualizacijos [1], bei erdvinio mąstymo gebėjimai [2]. Astronominiai objektai bei reiškiniai pasižymi labai skirtingais laiko bei fizinių matmenų masteliais. Astronomijos edukacijoje dažnai susiduriama su sunkumais aiškinant sudėtingas koncepcijas, o prie to stipriai prisideda menkas mokinių gebėjimas įsivaizduoti skirtingus mastelius. Norit mokiniams padėti suprasti astronominius reiškinius bei objektus, labai svarbu išsiaiškinti kaip gerai jie supranta skirtumus tarp įvairių mastelių ir kokie metodai padeda tai padaryti efektyviausiai.

Šiame tyrime buvo įvertinamos mokinių žinios susijusios su Paukščių Tako galaktika, bei skirtingo dydžio komponentais joje. Tyrimo metu buvo siekiama įvertinti mokinių žinias apie astronominių objektų dydį ir atstums tarp jų Saulės sistemoje, jos aplinkoje, bei Paukščių Tako galaktikoje. Taip pat buvo siekiama nustatyti kokias klaidas mokiniai daro bandydami suprasti procesus vykstančius įvairiuose astronominiuose masteliuose.

Darbe pateikiami duomenys surinkti iš įvairių Lietuvos mokyklų. Iš viso ištirti 78 moksleiviai iš 4-8 klasių. Mokiniais buvo pateikiamas dešimties klausimų klausimynas apie įvairius mastelius, susijusius su atstumais tarp planetų, planetų dydžiais, Saulės sistema bei mūsų Galaktika. Po klausimyno mokiniams buvo skaitoma specialiai paruošta paskaita apie mastelius Galaktikoje ir vėl pateikiamas tas pats testas.



1 pav. pavaizduoti mokinių klausimyno rezultatai raudona spalva prieš paskaitą, žalia spalva - po paskaitos.

Tolimesni šio darbo tikslai yra įvertinti skirtingų metodikų efektyvumą supažindinant mokinius su astronominiais masteliais, bei klaidingų įsivaizdavimų (angl. *misconceptions*), susijusių su masteliais, identifikavimas.

Reikšminiai žodžiai: masteliai astronomijoje, astronomijos edukacija, Galaktika.

Literatūra

1. Roger S. Taylor, Erika D. Grundstrom Astronomy Education Review v. 10, n. 1 (2011).
2. Merryn Cole, Cheryl Cohen, Jennifer Wilhelm, and Rebecca Lindell Phys. Rev. Phys. Educ. Res. 14, 010139 -(2018).

BESELIO PLUOŠTŲ SUPERPOZICIJŲ FORMAVIMAS GEOMETRINĖS FAZĖS ELEMENTAIS

Paulius Šlevas^{a,b}, Erminas Kozlovskis^{a,b}, Ernestas Nacius^{a,b}, Sergejus Orlovas^{a,b},
Orestas Ulčinas^{a,b}

^a Fizinių ir technologijos mokslų centras, fundamentinių tyrimų skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

^b Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412, Vilnius

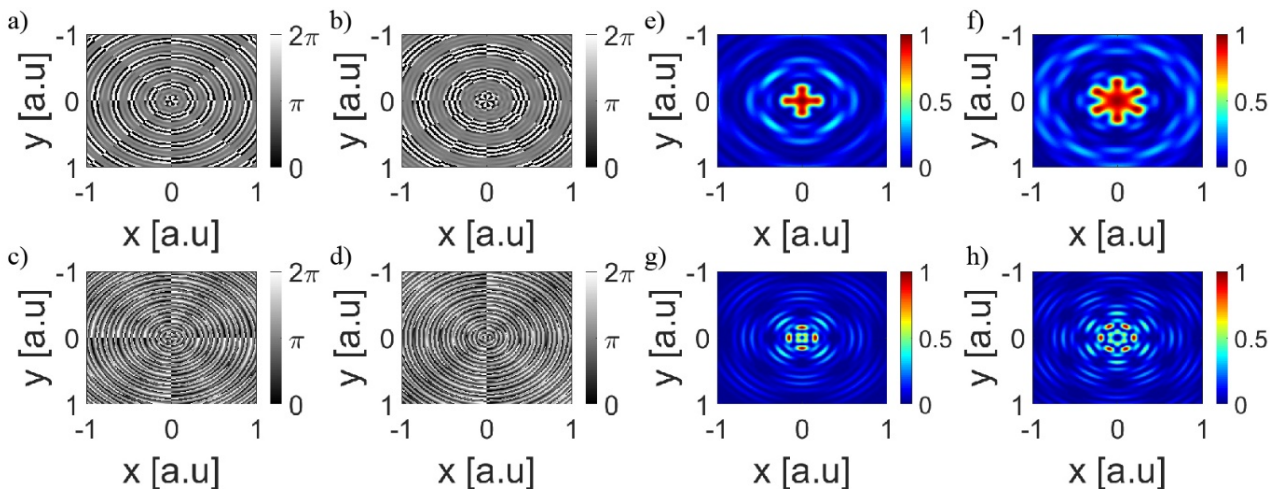
el. p.: paulius.slevas@ftmc.lt

Nulinės eilės Beselio pluoštai pasižymi ilga nedifraguojančia židinio zona. Dėl šios savybės šie pluoštai tinka įvairioms mikro apdirbimo užduotims, pavyzdžiui, Brego gardelių įrašymui, mikrokanalų gręžimui, lazerinei polimerizacijai ir kitoms [1]. Naudojant pluoštą formuojančius difrakcinius elementus arba erdvinį šviesos moduliatorių galima sukurti Beselio pluošto variacijų su reikiamu skersinio intensyvumo skirstinių, o tokie pluoštai gali būti panaudoti, pavyzdžiui, stiklo pjovimui [2]. Aukštesnės eilės sūkuriniai Beselio pluoštai taip pat pasižymi įdomia savybe pernešti orbitinį judesio kiekio momentą [3]. Sudėjus kelis skirtingų topologinių krūvių Beselio pluoštus, gaunami pluoštai turintys sudėtingą skersinio intensyvumo struktūrą ir pasižymintys dideliu pločio ir gylio santykiu [4]. Tai gali būti realizuota pasitelkiant geometrinės fazės elementus, kurių gamybos metu lydyto kvarco bandinyje įrašomos dvejetainių savybių turinčios nano gardelės. Bandinyje lokaliai kontroliuojant šių gardelių kampą bei ilgį galima sukurti įvairius pluošto formavimui skirtus optinius elementus [5].

Šiame darbe mes pristatome metodą skirtą aukštesnės eilės Beselio pluoštų, su skirtingais topologiniais krūviais, superpozicijų formavimui. Pirmiausia tokius pluoštus skaitmeniškai sumodeliavome bei eksperimentiškai patikrinome jų formavimosi ypatumus naudojant erdvinį šviesos moduliatorių. Tada į lydyto kvarco bandinį įrašėme nanogardelių struktūras, taip pagamindami geometrinės fazės elementus skirtus dviejų skirtingų pluoštų superpozicijos atvejų formavimui. Galiausiai pademonstravome galimybę naudoti šiuos elementus sudėtinių Beselio pluoštų formavimui bei tokių superpozicijų poveikį skaidrioms medžiagoms.

Literatūra

1. S. N. Khonina, N. L. Kazanskiy, S. V. Karpeev, and M. A. Butt, *Micromachines*, **11**, 997, (2020).
2. M. Jenne, D. Flamm, K. Chen, M. Schäfer, M. Kumkar, and S. Nolte, *Opt. Express*, **28**, 6552, (2020).
3. L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, *Phys. Rev. A*, **45**, 8185, (1992).
4. P. Šlevas, S. Orlov, E. Nacius and O. Ulčinas, *Optics Communication*, **505**, 127509 (2022).
5. M. Beresna, M. Gecevičius, and P. G. Kazansky, *Adv. Opt. Photon.*, **6**, 293, (2014).



1 pav. Suskaičiuotos fazinės kaukės reikalingos dviejų Besselio pluoštų superpozicijos formavimui. Parinkti dedamųjų kūgio kampai (a) $\theta_1=0.52$ rad, $\theta_2=0.15$ rad ir topologiniai krūviai $m=4$ ir $n=0$, (b) $\theta_1=0.52$ rad, $\theta_2=0.09$ rad, $m=6$, $n=0$, (c) $\theta_1=0.52$ rad, $\theta_2=0.73$ rad, $m=3$, $n=-1$, (d) $\theta_1=0.52$ rad, $\theta_2=0.73$ rad, $m=4$, $n=-2$. (e) (f) (g) (h) atitinkamai yra skersinio pluošto intensyvumo profiliai.

PROTONŲ KANALIAVIMO SILICIO KRISTALE SKAITINIS MODELIAVIMAS

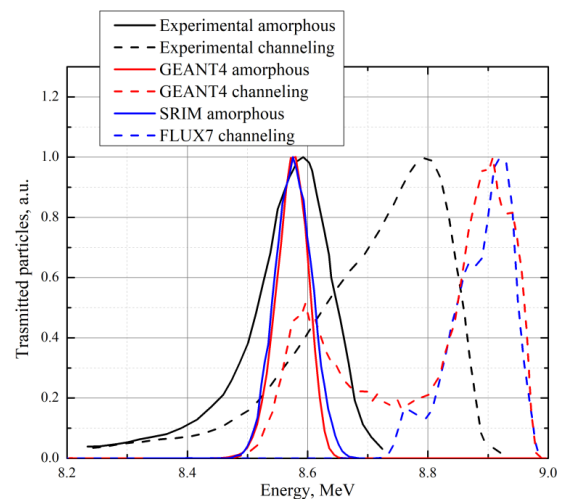
Danielius Lingis, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: danielius.lingis@ftmc.lt

Puslaidininkinių struktūrų savybes stipriai keičia priemaišos ir defektai, todėl šių struktūrų tobulinimams ir tyrimams būtina įvertinti defektų evoliucijos procesus. Šią evoliuciją galima stebėti Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopijos (angl. Rutherford Backscattering spectroscopy, RBS) metodu. Periodinėje struktūroje galimos tokios kryptis, kuriose atomai tvarkingai išsidėstę eilėmis ir atsiranda „kanalai“, kur atomų, idealiu atveju, nėra. Tokiu būdu dalelės yra kristalo atomų fokusuojamos į kanalo centrą. Kanale sufokusuoto pluoštelio artimosios sąveikos su kristalo atomais tikimybė sumažėja, o su priemaiša, kuri yra kanalo viduje, tikimybė padidėja, todėl stipriai išauga technikos jautrumas. Šiuo metu nėra daug įrankių, kurie galėtų modeliuoti kanaliuojančių dalelių RBS ir PIXE. Siekiant sukurti teorinį įrankį kanaliavimo RBS modeliavimui, pradžioje sukurtas modelis amorfinių medžiagų RBS modeliavimui [1]. Rezultatai parodė, kad GEANT4 paketas yra tinkamas tokio tipo užduotims. Šio darbo metu buvo validuojamas teorinis kanaliavimo modelis GEANT4 [2] programinio paketo aplinkoje, kuris bus naudojamas kuriant kanaliavimo RBS modeliavimo modelį. Pirminiai modeliavimai parodė, kad teorinis modelis nekorektiškai vertina 2-10 MeV energijos kanaliuojančių dalelių energijos nuostolius, taip pat kanaliavimo sąlygas. Dėl šių priežasčių buvo atliktos kodo modifikacijos.

Didelės energijos dalelių energijos nuostoliai medžiagoje daugiausia priklauso nuo lokalaus elektronų tankio dalelės judėjimo kryptimi. Kanaliuojančios dalelės sąveikauja su santykinai mažesniu elektronų tankiu, lyginant su amorfine medžiaga. Teoriniame modelyje energijos nuostoliams įvertinti buvo naudojamas reakcijos skerspjūvio modifikavimo algoritmas, pagal kurį skerspjūvis modifikuojamas atsižvelgiant į teorinį dalelės pozicijoje esančių kristalo atomų branduolių ir elektronų tankį. Modeliavimai parodė, kad energijos nuostoliai yra tokie, lyg dalelės sąveikautų su amorfine medžiaga. Vietoje skerspjūvio nuspręsta naudoti sąveikos atstumo modifikaciją. GEANT4 programinio paketo aplinkoje dalelės judėjimas susideda iš žingsnių (angl. step) ir ties kiekvienu žingsniu skaičiuojami fizikinių

procesų sąveikos atstumai. Kanaliuojančioms dalelės šie atstumai yra modifikuojami atsižvelgus į elektronų ir branduolių tankį. Modifikuoto modelio rezultatai palyginti su kodais FLUX7 [3], SRIM-2013 [4] ir eksperimentiniais rezultatais [5]. Modifikuoto modelio energijos nuostoliai 9 MeV protonams, krintantiems lygiagrečiai <110> silicio kristalo atomų ašiai, gerai sutampa su FLUX7 rezultatais (žr. 1 pav.). Pagrindinės skirtumų tarp eksperimentinių ir teorinių rezultatų priežastys yra eksperimentinių sąlygų fluktuacijos (pluoštelio energijos stabilumas, detektoriaus energinė skyra ir pan.) bei eksperimente naudoto kristalo netobulumai (defektų kiekis ir kt.). Kritinio kampo sąlyga modeliavimo atveju taip pat atitinka teorinius rezultatus. Modifikuotas modelis toliau tobulinamas ir kuriamas kanaliavimo RBS skaitinio modeliavimo įrankis.



1 pav. 9 MeV energijos protonų, praėjusių 48 μm silicio kristalą, energijos spektras.

Literatūra

1. D. Lingis, et. al., Comput. Phys. Commun., In press 108187.
2. S. Agostineli, et. al, Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A, Vol. 3 No 506, 250 (2003).
3. P. J. M. Smulders, D. O. Boerma, Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B, Vol 29, No 3, 471 (1987).
4. J. F. Ziegler, et. al., SRIM: The stopping and Range of Ions in matter (Morrisville, Lulu Press, USA, 2007).
5. B. R. Appleton, et. al., Phys. Rev., Vol 161, No 2, 330 (1967).

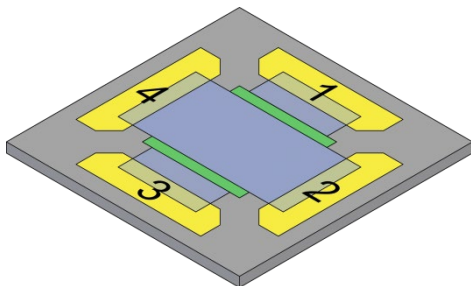
FABRY PERO REZONANSO MODULIACIJA GRAFENO KONDENSATORIUMI SUFORMUOTU ANT SILICIO PLOKŠTELĖS

Andrius Kamarauskas, Gediminas Šlekas, Dalius Seliuta, Laurynas Staišiūnas, Žilvinas Kancleris

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fizikinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: andrius.kamarauskas@ftmc.lt

Yra žinoma, kad keičiant plokštelės, į kurią krenta elektromagnetinė (EM) banga, paviršinį laidumą galima moduluoti Fabry Pero rezonansą (FP) [1]. Šiame darbe mes parodėme FP rezonanso valdymą, išorine įtampa keičiant užnešto ant dielektrinės plokštelės dviejų grafeno sluoksnių su HfO_2 intarpu elektrinį laidumą.

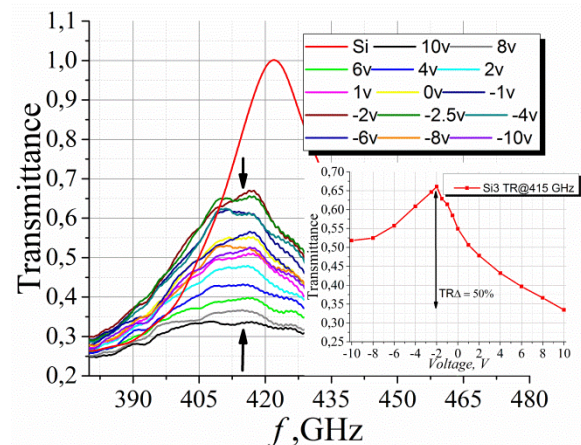
Paprasčiausiu atveju, kai EM banga krenta į dielektriko plokštelę dėl daugkartinių jos atspindžių pasireiškia FP rezonansas. Praėjusios per plokštelę EM bangos galios maksimumas (išnykus atspindžiui) formuojasi, kai plokštelėje telpa sveikas pusbangių skaičius [2].



1 pav. Tirto darinio su persiklojančiais grafeno sluoksniais scheminis vaizdas. Izoliuojančio Si ($\epsilon = 11,9$) plokštelės storis 0,5 mm, persiklojančių grafeno sluoksnių srities dydis 5 mm x 5 mm.

Mūsų tyrimo objektas pavaizduotas 1 pav. Ant Si plokštelės padengtos 60 nm storio HfO_2 ($\epsilon = 30$) sluoksniu užgarintos aukso kontaktinės aikštelės. Pirmasis grafeno sluoksnis šlapio perkėlimo būdu užnešamas ant kontaktų 1-3. Sritis kuri persidengs kitu grafeno sluoksniu padengiama 60 nm storio HfO_2 sluoksniu. Po to užklojamas viršutinis grafeno sluoksnis tarp kontaktų 2-4. Taip pagamintas darinys yra kaip kondensatorius, kurio metalinės plokštelės pakeistos grafeno sluoksniais. Keičiant prie grafeno sluoksnių prijungtą elektrinį potencialą, kinta Fermi lygio padėtis grafene ir taip pakeičiamas grafeno paviršinys laidumas [3].

Eksperimentiniai modulatoriaus pralaidumo tyrimai nuo pridėto elektrinio potencialo atlikti 380-460 GHz ruože teraherciniu spektrometru Toptica Terascan 780. THz spindulys nukreiptas statmenai į grafeno sluoksnių persiklojimo sritį.



2 pav. Eksperimentiškai išmatuota pralaidumo priklausomybė nuo THz spinduliuotės dažnio, esant skirtingai įtampai tarp sluoksnių. Įdėtiniame grafike pralaidumo priklausomybė nuo pridėtos įtampos ties FP rezonansu (415 GHz). Įtampos poliškumas grafike nurodytas viršutinio grafeno sluoksnio atžvilgiu.

Eksperimento rezultatai parodyti 2 pav. rodo, kad pridėjus įtampą modulatoriaus pralaidumas FP rezonanso srityje ženkliai sumažėja. Kaip matyti iš įdėtinio grafiko maksimalus THz pralaidumas stebimas, kai prie viršutinio sluoksnio įtampa -2 V.

Atlikus eksperimentus DC elektriniame lauke nustatėme, kad keičiant pridėtą įtampą apatinio sluoksnio varža ženkliai sumažėjo, kai tuo tarpu viršutinio silpnai priklausė nuo išorinės įtampos. Pastebėtą skirtumą matomai sąlygoja tai, kad grafeno sluoksnius supa skirtingos terpės. Apatinis sluoksnis 1-3 iš abiejų pusių padengtas 60 nm storio HfO_2 , o viršutinis iš vienos pusės padengtas PMMA sluoksniu.

Dielektrinėje plokštelėje su dvigubu grafeno sluoksniu pademonstruotas elektromagnetinės spinduliuotės valdymas išoriniu elektriniu lauku.

Literatūra

1. G. Šlekas, et al, Elect. Let., **51**, p. 1908 (2015).
2. Ž. Kancleris et al, Int. J. Inf. Mil. W., **25**, p. 1099 (2004).
3. H. Zhang et al., J. Appl. Phys. **125**, 094501 (2019);

Sb₂Se₃ AUGIMO MECHANIZMO ANT ŽĖRUČIO PADĖKLŲ TYRIMAS

Martynas Bertašius, Rokas Kondrotas, Arnas Naujokaitis, Vidas Pakštas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Medžiagų struktūrinės analizės skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: martynas.bertasius@ftmc.lt

Plonasluoksnių saulės elementų technologijos pastaraisiais dešimtmečiais yra padariusios didelę pažangą. Jose naudojamų kadmio telūrido (CdTe), vario indžio galio selenido (CIGS) ar perovskitų saulės elementų konversijos našumo koeficientai jau yra pasiekę >20% [1]. Tačiau tokie medžiagų junginiai nėra sudaryti iš pakankamai žemėje paplitusių elementų, jog jų būtų užtektinai komercinei gamybai, bei taip pat yra toksiški aplinkai. Kaip viena iš nekenkiančių aplinkai „žaliųjų“ alternatyvų absorberio sluoksniui yra naudojamas plačiai paplitusių elementų junginys stibio selenidas (Sb₂Se₃). Turėdamas didelį šviesos absorbcijos koeficientą (apie 10⁵cm⁻¹), Sb₂Se₃ gali pasiekti pageidaujamą konversijos našumo koeficientą, jau ties ~200nm storio, ir dėl to yra labai svarbi absorberio ir padėklo sandūros kokybė, kur nutrūkę kovalentiniai ryšiai gali ženkliai sustiprinti nepageidaujamą paviršinę krūvininkų rekombinaciją [2]. Yra žinoma, kad van der Valso heterostrukūros gali sudaryti bedefektinius paviršius, nes nėra arba yra labai mažai nutrūkusių kovalentinių ryšių, bei gali pasitarnauti optoelektroninių prietaisų veikimui, sumažindamos paviršiaus krūvininkų rekombinacijos greitį [3]. Sb₂Se₃ yra kvazivienmatė medžiaga, galinti suformuoti tokias van der Valso heterostrukūras ant kitų žemadimensinių ar trimačių padėklų [4]. Šio darbo tikslas buvo ištirti Sb₂Se₃ augimo mechanizmą ant žėručio padėklų, turinčių gerą epitaksinį sąryšį su Sb₂Se₃ sluoksniu [5], bei padidinti Sb₂Se₃ kristalizacijos centrų tankį įterpiant vario ar NaCl pasluoksnius.

Sb₂Se₃ sluoksniai buvo suformuoti ant lygiai nupjautų žėručio lakštų paviršių naudojant garų terminį nusodinimo metodą, optimalią žėručio paviršiaus plokštumos orientaciją apskaičiuojant nesudėtingu geometrinu gardelės nesutapimo algoritmu. Garinimui naudota trijų zonų krosnis (1 pav.).

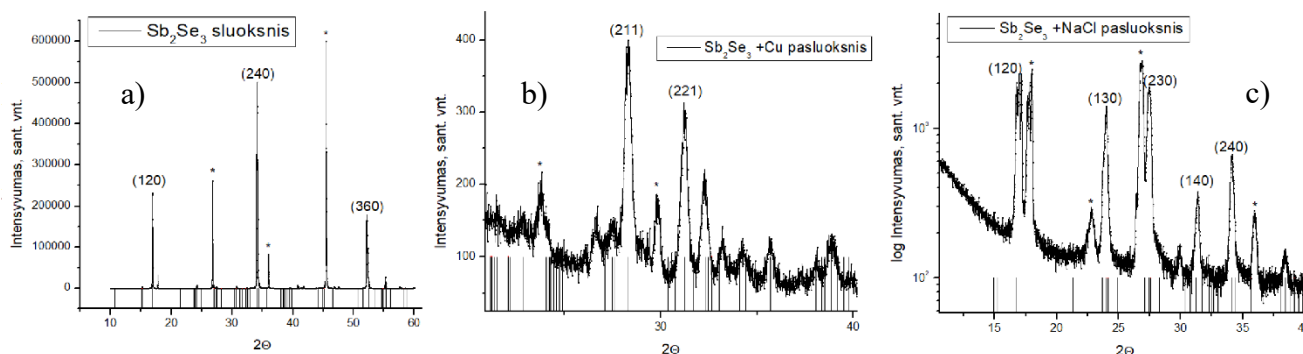


1 pav. Eksperimentinės trijų zonų kvarco krosnies schema.

Eksperimento parametrų režiai: kraštinių krosnies zonų Z1 ir Z3 temperatūra - [380-420°C], šaltinio zonos Z2 - [450-550°C], pasiekto vakuumo slėgis - [3•10⁻³-2•10⁻² mbar]. Optimalūs bandiniai buvo gauti prie 380°C kraštinių ir 530-550°C šaltinio krosnies zonų temperatūrų. Bandiniai su užgarintais sluoksniais buvo tiriami skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) bei rentgeno spindulių difraktometru *Rigaku* (XRD). Gauti rezultatai parodė, kad Sb₂Se₃ ant žėručio augimo palankiausia plokštuma yra (120). Rezultatai taip pat parodė padidėjusį kristalizacijos centrų tankį bandiniuose su užgarintais tiek vario, tiek NaCl pasluoksniais, tačiau įterpti vario atomai suardė epitaksinį Sb₂Se₃ ir žėručio sąryšį, sluoksniui įgaunant polikristalinę įvairių sluoksniu augimo krypčių struktūrą. NaCl, tuo tarpu, šio sąryšio nesuardė, todėl jo pasluoksniu įterpimas gali būti naudojamas kaip pagalbinis būdas padidinti Sb₂Se₃ kristalizacijos centrų tankį.

Literatūra

1. Valdman L., Wen X., Lu Z., Chen X., Hiebel F., Zhang L., Kisslinger K., Tao Y., Washington M., Lu T. M. and Wang G. C., *Applied Surface Science*, **567**, 150859 (2021). doi:10.1016/j.apsusc.2021.150859
2. Wen X., Chen C., Lu S. et al., *Nat Commun*, **9**, 2179 (2018). doi:10.1038/s41467-018-04634-6
3. Xia W., Dai L., Yu P., Tong X., Song W., Zhang G., and Wang Z., *Nanoscale*, **9**(13), 4324-4365 (2017). doi:10.1039/c7nr00844a
4. Ma Z., Chai S., Feng Q., Li L., Li X., Huang L., Liu D., Sun J., Jiang R., Zhai T., Xu H., Small, **15**(9), 1805307 (2019). doi:10.1002/sml.201805307
5. Liu J., Li M., Liu M., Cai H., Lin Y., Zhou Y., Huang Z., and Fachun Lai, *ACS Applied Materials & Interfaces*, **12**(8), 9909-9917 (2020). doi:10.1021/acsami.9b20142



2 pav. Rentgeno spindulių (XRD) difrakcijos spektrai: a) Sb₂Se₃, b) Sb₂Se₃ su vario, ir c) Sb₂Se₃ su NaCl pasluoksniu. Bandinių eksperimentinės sąlygos: T_{šaltinis}=470°C, T_{Z1,3}=380°C, „*“ - padėklo paviršiaus intensyvumo pikai.

S-METHYLTHIOURONIUM IODIDE IMPROVES PHOTOSTABILITY OF MAPbI₃ PEROVSKITE

Rokas Gegevičius¹, Gabrielė Kavaliauskaitė¹, Edvinas Orentas²,
Vidmantas Gulbinas¹, Marius Franckevičius¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Molecular Compound Physics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: rokas.gegevicius@ftmc.lt

²Department of Organic Chemistry, Faculty
of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, LT-03225, Vilnius

Metal-organic perovskites have emerged as a cost-effective alternative to conventional semiconductor materials in the fields of solar cells, light-emitting diodes, and photodetectors. Although the need for high efficiency of perovskite solar cells is almost solved, the application of perovskites is still threatened due to their low stability under standard conditions. Various strategies have been employed to address the stability problem of perovskite solar cells, such as modifying the perovskite layer by using mixed dimensionality perovskite¹, using a polycationic lattice², and optimizing the device structure by adding defect passivation layers³ and hydrophobic charge transport materials⁴.

In this work we demonstrate the use of the organic cation S-methylthiouronium as an alternative material for the preparation of hybrid perovskites. We show that a mixture of S-methylthiouronium iodide (SMTI) and methylammonium iodide (MAI) salts forms a stable perovskite structure with composition (MA)_x(SMTI)_{1-x}PbI₃, despite S-methylthiouronium significantly exceeds the Goldschmidt tolerance factor. The perovskite solar cells containing SMTI exhibit enhanced stability under ambient conditions and have improved tolerance to photooxidation. The ease of synthesis, low cost, and ability to improve the stability of perovskite materials against photooxidation by using SMTI suggest excellent prospects for future applications.

References

1. A. Zhiping Wang *et al.*, *Nature Energy* (2017), **2**, 17135.
2. T. Singh, T. Miyasaka, *Advanced Energy Materials* (2018), **3**, 1700677.
3. S. B. Naghadeh *et al.*, *Journal of Physical Chemistry C* (2018), **122**, 15799.
4. Christians, J. A. *et al.* *Nat. Energy* **3**, 68–74 (2018)

KRŪVININKŲ JUDĖJIMAS REALIOMIS ORGANINIŲ SAULĖS ELEMENTŲ VEIKIMO SĄLYGOMIS

Rokas Jasiūnas¹, Vidmantas Jašinskas¹, Huotian Zhang², Feng Gao², Vidmantas Gulbinas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: rokas.jasiunas@ftmc.lt

²Department of Physics Chemistry and Biology (IFM), Linköping University,
Linköping SE-58183, Švedija

Nors per tris savo egzistavimo dešimtmečius organinių saulės elementų technologija ženkliai išstobulėjo, tačiau fizikinis krūvininkų judėjimo suvokimas vis dar plačiai diskutuojamas tarp bendro sutarimo dėl jo nerandančių mokslininkų. Ypač daug klausimų kelia krūvininkų judris - esminis, tačiau sudėtingas ir sunkiai perprantamas parametras. Esant realioms saulės elementų veikimo sąlygoms, krūvininkų pagavimas žemos energijos būsenų gaudyklėse kelia papildomus iššūkius mėginant išnarplioti krūvininkų judėjimo fiziką.

Šiame darbe [1] tyrinėjome krūvininkų judėjimą artimose realioms veikimo sąlygoms skirtinguose organiniuose saulės elementuose. Tam naudojome keletą skirtingų laikinių tyrimo metodų bei matematinį modeliavimą.

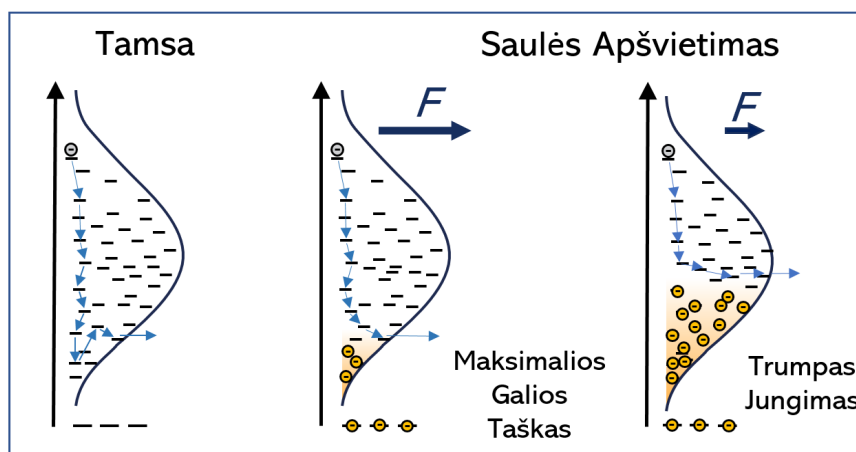
Parodėme, kad krūvininkų pagavimas žemos energijos būsenose ženkliai priklauso nuo aktyviojo sluoksnio medžiagų bei efektyviojo elektrinio lauko.

Nurodėme sąlygas, kuriose toks krūvininkų pagavimas padidina krūvininkų judrį, sumažina jo laikinę priklausomybę mikrosekundinėje laiko skalėje ir kuomet tai neturi reikšmingos įtakos krūvininkų judėjimui.

Taipogi, parodėme, kad pradinis krūvininkų judrio kritimas, nulemtas krūvininkų relaksacijos iš aukštos energijos būsenų, nepriklauso nuo žemos energijos būsenų užpildymo.

Literatūra

1. Jasiūnas, R.; Jašinskas, V.; Zhang, H.; Upreti, T.; Gao, F.; Kemerink, M.; Gulbinas, V. Carrier Mobility Dynamics under Actual Working Conditions of Organic Solar Cells. *J. Phys. Chem. C*, **125** (27), 14567–14575, (2021).



Pav.1 Krūvininkų relaksacijos būsenų pasiskirstyme schematinis atvaizdavimas tamsos, maksimalios galios taško bei trumpo jungimo atvejais.

STUDYING CONDUCTANCE OF THIN LAYER ON INSULATING SUBSTRATE USING TERAHERTZ SPECTROSCOPY

Daniil Pashnev, Justinas Jorudas, Roman Balagula, Andrzej Urbanowicz, and Irmantas Kašalynas

Terahertz Photonics Laboratory, Department of Optoelectronics, Center for Physical Sciences and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: daniil.pashnev@ftmc.lt

Thin conductive layers of graphene or two-dimensional (2D) electron gas (2DEG) in heterostructures are widely used for the development of high-frequency electronics and terahertz (THz) photonics [1], [2]. Development progress of such 2D materials requires non-contact characterization and quality control methods [3]. THz spectroscopy allows investigation of complex dielectric permittivity of material by measuring the amplitude and phase spectra in transmission and reflection geometries [4], [5]. Usually, Drude conductivity model is used to describe THz wave interaction with free carriers [6], [7]. Analytical equations of the transmission coefficients have been derived solving Maxwell's equations for simplified system composed of a 2D conductive layer on an insulating substrate of fixed thickness [8]. It was confirmed that analytical modelling accurately describes experimental spectra providing values of the substrate thickness and the sheet conductance and scattering time of the conductive layer [9]. Interesting feature of the analytical approach is the Fabry-Perot oscillations employed in fitting procedure which leads to higher spectral resolution analysis. On other hand, transfer matrix method is widely used to describe spectra of multi-layer samples [10]. In this case, full layer set of the heterostructure under investigation can be used to find material parameters [3, 9].

In this work, transmission spectra of AlGaIn/GaN high electron mobility transistor (HEMT) structures on semi-insulating SiC substrate are investigated in the IR and THz-frequency ranges. Corresponding spectra were obtained using THz time-domain spectroscopy (TDS) and Fourier transform infrared (FTIR) systems in the frequency range of 0.1-22 THz at two temperatures of 77 K and 300 K. The results analysis is based on the analytical and transfer matrix methods [3, 9].

The samples were fabricated of commercial AlGaIn/GaN HEMT structures with 2DEG density and mobility values being of the range of $(3.5-11) \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and $(1500-1800) \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, respectively. Van der Pauw geometry samples were processed for material characterization in Hall experiment under dc-bias. For detail analysis, three mesas of various depths were prepared on two samples by reactive ion etching in order to find performance of a 2DEG and heterostructure layers individually. Typical transmission spectrum of zone on AlGaIn/GaN HEMT structures with 2DEG is shown in Figure 1. Experimental spectra were fitted

by analytical model revealing the values of sheet conductance and scattering time of 2DEG layer. Electron mobility and density values were found in good agreement with those directly found in Hall experiment. Additional modeling by transfer matrix method confirmed results of analytical analysis [9].

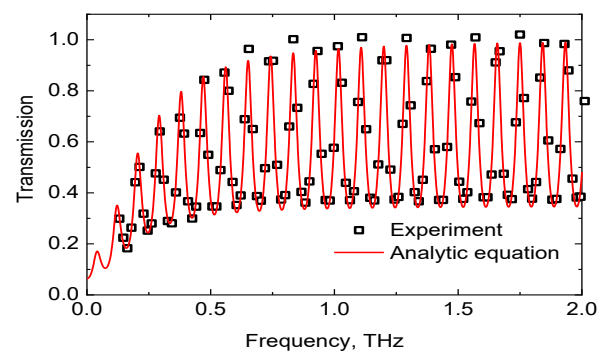


Fig. 1. Transmission spectrum of HEMT structure: black square symbols show experiment, solid line is the analytical model data at best fit parameters: $\sigma_c = 15.66 \text{ mS/sq.}$, $n = 6.2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu = 15785 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, $\tau = 1975 \text{ ps}$, $D_s = 532 \text{ }\mu\text{m}$. Hall data for the same sample: $\sigma_c = 15.65 \text{ mS/sq.}$, $n = 10.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu = 10140 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

The dependence of transmission spectra on temperature reveals existence of renormalization phenomenon of the electron effective mass in different AlGaIn/GaN heterostructures, which is better pronounced above critical temperature of 134 K [11]. Effective mass changes with temperature were observed in different commercial AlGaIn/GaN HEMT structures, value of which was similar to recent results [3, 11, 12].

The work was supported by the Research Council of Lithuania (Lietuvos mokslo taryba) under the "TERAGANWIRE" project (grant No. S-LL-19-1).

References

1. J. Sun *et al.*, Opt. Express, **28**(4), 4911 (2020).
2. R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė *et al.*, Opt. Mater. Express, **9**(11), 4438. (2019).
3. R. B. Adamov *et al.*, Appl. Sci., **11**(13), 6053 (2021)
4. D. Pashnev *et al.*, Appl. Phys. Lett., **117**(5), 051105 (2020).
5. P. U. Jepsen, D. G. Cooke, and M. Koch, Laser Photon. Rev., **5**(1), 124-166 (2011).
6. J. Horng *et al.*, Phys. Rev. B, **83**(16), 165113 (2011).
7. J. D. Buron *et al.*, Nano Lett., **12**(10), 5074 (2012).
8. G. I. Syngayivska and V. V. Koroteyev, Ukr. J. Phys., **58**(1), 40-55 (2013).
9. D. Pashnev *et al.*, Proc. 46th Int. Conf. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves, 2021
10. S. Khorasani and B. Rashidian, J. Opt. A Pure Appl. Opt., **4**(3), 251-256 (2002).
11. D. Pashnev, *et al.*, Appl. Phys. Lett., **117**, 162101 (2020).
12. T. Hofmann, *et al.*, Appl. Phys. Lett., **101**, 192102 (2012).

THz IMPULSŲ EMISIJOJOS SPEKTROSKOPIJA

Ričardas Norkus, Ignas Nevinskas, Vaidas Pačebutas, Vitaly Leonidovich Malevich,
Pavel Aliaksandravich Ziaziulia, Arūnas Krotkus

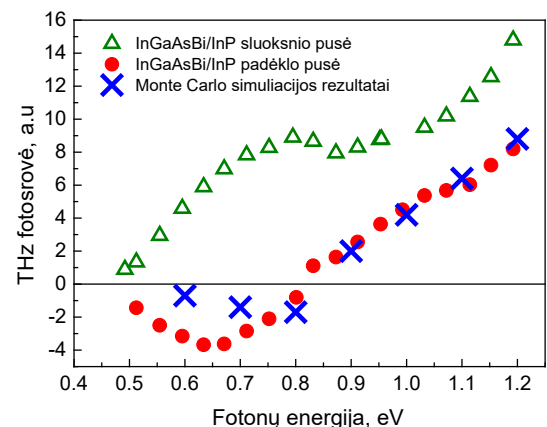
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: ricardas.norkus@ftmc.lt

Medžiagos žadinamos ultratrumpais lazerio impulsais gali skleisti elektromagnetinę spinduliuotę, kurios dažnis yra terahercų dažnių diapazone. Šis THz impulsų emisijos būdas buvo stebėtas puslaidininkiuose, dielektriniuose kristaluose, metaluose, dujose ir skysčiuose. Dėl šios priežasties THz emisijos spektroskopija (TES) yra universalus būdas tyrinėti įvairias medžiagas bekontakčiu būdu. Kadangi gali būti skirtingi mechanizmai atsakingi už THz impulsų mechanizmą skirtingoms medžiagoms gali būti galima nustatyti skirtingus parametrus. Įprastai puslaidininkiuose generacija vyksta dėl paviršiuje sugeneruotų sparčiai kintančių fotosrovių. Šios atsiranda dėl puslaidininkyje esančių vidinių laukų, skirtingų skylių ir elektronų judrių ar balistinio elektronų judėjimo. Suprantant šiuos mechanizmus ir juos įvertinus galime nagrinėti medžiagų juostinės struktūros parametrus kaip draustinių juostų tarpą, šoninių slėnių padėtis [1] ar heterosandūrų laidumo juostos trūkio vertes [2,3].

Laidumo juostos trūkį heterosandūrose naudodami TES galime nustatyti esant tam tikroms sąlygoms. Kadangi įprastai THz impulsai paviršiuje generuojami dėl krūvininkų atsiskirimo ir jų balistinio judėjimo. Jei puslaidininkis, kurio draustinių juostos tarpas yra mažesnis bus pakankamai plonas, galėsime riboti krūvininkų atsiskyrimą. Tai įvyks dėl to, jog sužadinti elektronai negalės įveikti susidariusio barjero heterosandūros laidumo juostoje ir nepateks į puslaidininkį su didesniu draustinių juostų tarpu. Tačiau suteikiant pakankamai perteklinės energijos elektronai galiausiai galės atsiskirti ir patekti į minėtą puslaidininkį. Taip bus generuojamas pakankamai efektyvus THz impulsas, o šis lūžis bus gerai matomas TES spektre. Šie eksperimentai iki šiol buvo atlikti GaAsBi/GaAs [2], InGaAs/InP, InGaAsBi/InP [3] heterosandūrose, kuriuose buvo nustatyti laidumo juostos trūkiai. Šie eksperimentai atliekami bandinį apšviečiant iš sluoksnio pusės, dėl to reikalingas plonas sluoksnis, jog elektronai galėtų pasiekti heterosandūrą. Pastaruoju metu buvo atlikti eksperimentai norint rasti alternatyvų būdą šiam parametru nustatyti, jog nereikėtų plono sluoksnio. Tai galima pasiekti apšviečiant bandinį iš padėklo pusės.

Šiame darbe buvo tyrinėjama THz impulsų emisija būtent apšviečiant heterosandūrą iš padėklo pusės. Buvo atlikti tiek eksperimentiniai matavimai, tiek analitiniai ir skaitmeniniai Monte Karlo skaičiavimai. Buvo tyrinėjamos InGaAs/InP ir InGaAsBi/InP

heterosandūros [4]. Šiuo atveju buvo užauginti sluoksniai buvo 600 nm ir 250 nm storio. Eksperimentiniai rezultatai parodė, jog spektruose (1pav.) atsiranda THz impulso fazės virtimas ties 0.85 eV. Įvertinus tai kiek perteklinės energijos fotonai perduoda elektronams. Ši vertė gana gerai sutampa su prieš tai gautomis vertėmis nusakančiomis laidumo juostos trūkį. Tuo tarpu apšviečiant iš sluoksnio pusės tokio fazės virtimo nėra. Norint įvertinti dėl ko atsiranda fazės virtimas buvo pritaikytas gana paprastas fotosrovės generacijos modelis, tiek analitiniai, tiek Monte Karlo skaičiavimai parodė, jog fotosrovė yra didesnė padėklo pusėje, kai elektronai turi pakankamą energiją įveikti heterosandūros laidumo juostos barjerą. Taigi šie matavimai parodė, jog galime nustatyti heterosandūros laidumo juostos trūkio vertę alternatyviu būdu apšviečiant bandinį iš padėklo pusės.



1 pav. TES spektrai InGaAsBi/InP heterosandūros, ją apšviečiant iš padėklo pusės (raudoni apskritimai) ir sluoksnio pusės (žali trikampiai). Mėlynu kryžiumi pažymėti Monte Karlo skaičiavimo rezultatai.

Literatūra

1. A. Arlauskas and A. Krotkus, "THz excitation spectra of AlInBIV semiconductors," *Semicond. Sci. Technol.* 27, 115015 (2012).
2. Karpus, V.; Norkus, R.; Čechavičius, B.; Krotkus, A. THz-excitation spectroscopy technique for band-offset determination. *Opt. Express* 2018, 26, 33807–33817
3. V. Pačebutas, R. Norkus, V. Karpus, A. Geizutis, V. Strazdienė, S. Stanionytė, A. Krotkus „Band-offsets of GaInAsBi-InP heterojunctions“, *Infrared Physics and Technology*, 109, 103400 (2020)
4. Malevich, V.L.; Ziaziulia, P.A.; Norkus, R.; Pačebutas, V.; Nevinskas, I.; Krotkus, A. Terahertz Pulse Emission from Semiconductor Heterostructures Caused by Ballistic Photocurrents. *Sensors*, 21, 4067. (2021).

CHARACTERIZATION OF GRAPHENE ELECTRICAL PROPERTIES BY COMBINED TERAHERTZ AND INFRARED SPECTROSCOPY METHODS

Justinas Jorudas, Daniil Pashnev, Ilja Ignatjev, Irmantas Kašalynas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: justinas.jorudas@ftmc.lt

Graphene is two-dimensional (2D) material, with many potential applications in the terahertz (THz) and infrared (IR) ranges, such as a absorber/modulator [1], transparent gate contact [2] and etc. Since synthesis, transfer of the graphene and its device fabrication are extremely sensitive to the technological steps involved in the process flow, the development of the non-destructive characterization methods of 2D materials electrical properties is very important [3].

In this work, we combine the THz time-domain spectroscopy (TDS) and Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy methods for the characterization of graphene electrical parameters. The graphene samples were prepared by different wet-transfer techniques on various substrates [4] including a high resistivity (HR) Si wafers. Structural quality of the graphene was controlled by well adapted Raman spectroscopy [5]. The transmission spectra were numerically described in terms of high-frequency Drude conductivity, results of which were found to correlate with the electrical dc-conductivity estimated from Hall experiment [6], [7]. Developed remote characterization method allowed us to compare different graphene samples measuring the sheet resistance, carrier density and mobility values.

A CVD graphene synthesized on a copper foil was used for the sample fabrication onto a semi-insulating Si using wet-transfer technique. Dissolution-based removal of the supporting PMMA layer after transfer process was realized by chloroform (Si-Cl), acetone (Si-A), and alcohol (Si-IP) solutions. 2D material parameters were evaluated on base of Raman spectra and optical microscope images analysis, summary of the results is given in Table 1. All graphene films demonstrated narrow line of 2D mode and relatively high 2D/G mode ratios in Raman spectra.

A THz TDS system were used to investigate the transmission spectra of graphene in the range of 0.1-2.5 THz. Optical spectra at higher frequencies up to 18 THz were acquired by

FTIR spectrometer. The obtained characteristics were fitted by Drude conductivity model to determine the sheet resistance, carrier density and mobility values in graphene. Traditional contact-based Hall effect measurements in Van der Pauw (VdP) configuration with contacts placed at edges of graphene film were fulfilled also. In Table 1, the sheet resistance obtained from TDS and Hall experiments are labeled as R_{S-TDS} and R_{S-VdP} , respectively. For all samples, the R_{S-VdP} values were much higher, than R_{S-TDS} , indicating, that carrier hopping dominates conductivity in the samples [8].

Table 1. Comparison of Raman spectra properties and sheet resistance for graphene under study.

Sample	2D FWHM (cm ⁻¹)	2D/G ratio	R_{S-TDS} (Ω/sq.)	R_{S-VdP} (Ω/sq.)
Si-Cl	29.5	2.5	846	2728
Si-A	31.5	3.1	845	2132
Si-IP	27.9	2.9	1114	3116

The work was supported by the Research Council of Lithuania (Lietuvos mokslo taryba) through the “T-HP” Project (grant No. DOTSUT-184) funded by the European Regional Development Fund according to the Measure No.01.2.2-LMT-K-718-03-0096.

References

- [1] A. C. Tasolamprou *et al.*, *ACS Photonics*, vol. 6, no. 3, pp. 720–727, Mar. 2019
- [2] M. Dub *et al.*, *Materials (Basel)*, vol. 13, no. 18, p. 4140, Sep. 2020
- [3] R. B. Adamov *et al.*, *Appl. Sci.*, vol. 11, no. 13, p. 6053, Jun. 2021
- [4] G. Deokar *et al.*, *Carbon N. Y.*, vol. 89, pp. 82–92, Aug. 2015
- [5] J. E. Lee, G. Ahn, J. Shim, Y. S. Lee, and S. Ryu, *Nat. Commun.*, vol. 3, no. 1, p. 1024, Jan. 2012
- [6] J. Jorudas *et al.*, *Proc. 46th Int. Conf. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves*, 2021.
- [7] D. Pashnev *et al.*, *2021 46th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, 2021.
- [8] H. S. Song *et al.*, *Sci. Rep.*, vol. 2, no. 1, p. 337, Dec. 2012

TERAHERCINIS AIRY VAIZDINIMAS NAUDOJANT SILICIO OPTIKĄ

Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė¹, Linas Minkevičius¹, Domas Jokubauskis¹,
Pavel Gotovski², Ernestas Nacius², Paulius Kizevičius², Sergėjus Orlovas²,
Gintaras Valušis¹

¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius

² Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: rusne.ivaskeviciute@ftmc.lt

Terahercų (THz) fotonika yra viena aktualiausių optoelektronikos tyrimo kryptų. Pastaruoju metu vienas iš svarbiausių THz mokslo tikslų yra sukurti kuo labiau kompaktiškas THz spektroskopines bei vaizdinimo sistemas ir rasti naujus būdus spinduliuotei valdyti. Iš ankstesnių tyrimų yra žinoma, jog tam puikiai tinka kompaktiški silicio optiniai elementai [1,2,3].

Terahercų vaizdinimo sistemose vienas iš svarbiausių parametrų yra pluošto forma. Įprastai atliekant vaizdinimo eksperimentus naudojamas Gausinis pluoštas, tačiau vis daugiau dėmesio susilaukia nedifraguojantys pluoštai. Vienas iš pavyzdžių yra Airy pluoštas, kuris fokusuojasi ne į vieną židinio tašką, o sklinda išlenkta paraboline trajektorija (1 pav. (c)). Nėgama to, Airy pluoštas yra savaime atsistatantis, todėl net susidūręs su kliūtimi, jis vėl susiformuos išilgai sklidimo ašies [4].

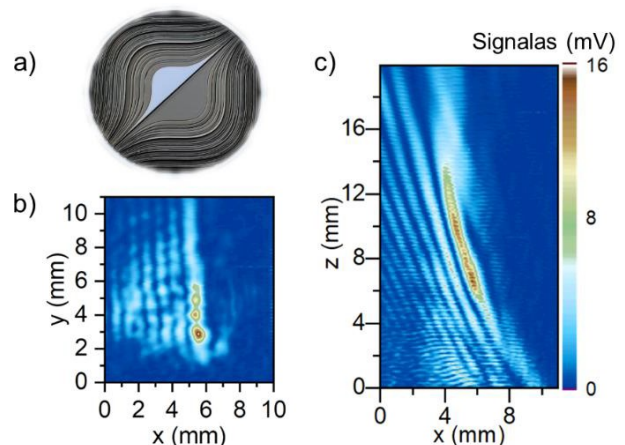
Darbo tikslas – ištirti Airy pluošto savybes ir pritaikyti fazinę Airy plokštelę THz vaizdinimo sistemoje.

Airy pluoštas generuojamas su fazine kauke, suformuota and silicio padėklo, naudojant lazerinės abliacijos metodiką (1 pav. (a)). Airy elementą kombinuojant kartu su kitais optiniais elementais, galima lengvai valdyti THz spinduliuotę.

Vienas iš THz spinduliuotės formavimo būdų yra pluošto išlenkimas. Šis metodas gali būti pritaikomas atliekant THz vaizdinimą, kai tarp difrakcinio optinio elemento ir vaizdinamo bandinio yra THz spinduliuotei neskaidri kliūtis [5]. Naudojant tik įprastus difrakcinius elementus, tokia kliūtis uždengtų THz spinduliuotę. Tačiau išlenktas Airy pluoštas netrikdomas apeina kliūtį, todėl rezultate gaunamas geros kokybės vaizdas.

Taip pat THz vaizdinimo sistema, kurioje naudojamas Airy pluoštas, gali būti pritaikoma tiriant bandinius su skirtingais grafeno sluoksniais. Šiuo metu tai yra aktualu, nes anglies nanomedžiagos, tokios kaip grafenas, yra plačiai naudojamos šiuolaikinėse technologijose. Grafeno kokybė ir jo sluoksnių

skaičius yra svarbus kriterijus gaminant anglies pagrindo optinius elementus. Šis metodas pranašus tuo, kad jis leidžia bekontakčiu būdu per trumpą laiką nustatyti grafeno sluoksnių skaičių, o Airy pluošto dėka, šie sluoksniai pasižymi geresniu kontrastu dėl fazės jautraus elemento.



1 pav. (a) Fazinė kaukė dvimačiam Airy pluoštui formuoti, (b) Airy pluošto intensyvumo pasiskirstymas XY ašimis ir (c) išilgai pluošto sklidimo kryptimi

Šiame darbe buvo tirta fazinė Airy plokštelė su 8 kvantavimo lygiais ties 0.6 THz dažniu. Ištirtas Airy pluoštas, kuris buvo pritaikytas atliekant bandinio vaizdinimą už kliūtis. Net ir esant THz spinduliuotei neskaidriam barjerui, gautas geros kokybės vaizdas. Taip pat, Airy pluoštas panaudotas mažą sugertį turinčių objektų vaizdinimui. Įvertinus gautų vaizdų kontrastą, nustatytas grafeno sluoksnių skaičius.

Literatūra

1. L. Minkevičius, S. Indrišiūnas, R. Šniaukas, B. Voisat, V. Janonis, V. Tamošiūnas, I. Kašalynas, G. Račiukaitis, G. Valušis, Opt. Lett. **42**, 1875-1878 (2017).
2. D. Jokubauskis, L. Minkevičius, M. Karaliūnas, S. Indrišiūnas, I. Kašalynas, G. Račiukaitis, G. Valušis, Opt. Lett. **43**, 2795-2798 (2018).
3. L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, G. Valušis, Opt. Express **27**, 36358-36367 (2019).
4. G. A. Siviloglou, D. N. Christodoulides, Opt. Lett. **32**, 979- 981 (2007).
5. S. M. Perincheri, A. Shinde, M. V. Matham, Biomed. Opt. Express **7**, 5308-5324 (2016).

THz/sub-THz FREQUENCY RANGE THERMAL METAMATERIAL EMITTERS

Vladislovas Čižas¹, Ignas Grigelionis¹, Kęstutis Ikamas², Vytautas Jakštas³,
Domas Jokubauskis¹, Andrius Bičiūnas¹, Marius Treideris³, Renata Butkutė¹ ir Linas Minkevičius¹

¹ Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius,

² Vilnius University, Institute of Applied Electrodynamics and Elecommunications,
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

³ Center for Physical Sciences and Technology, Department of Physical Technologies,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius,

email: vladislovas.cizas@ftmc.lt

In today's quickly technologically emerging world THz/sub-THz frequency range imaging systems were proved to be useful for huge amount of practical applications (security, pharmacy, etc.). Such quickly expanding application range determines the need for small, powerful, but economically efficient emitters [1, 2]. Currently, the largest amount of scientific studies for THz frequency range wavelength generation are dedicated to quantum cascade lasers (QCL), whose biggest disadvantage is inability to operate within room temperature and complex inner structure. Metamaterials, on the other hand, being relatively new subject, are very promising due to their relative simplicity, possibility to work in a wide range of temperatures and low production price.

In this work experimental and theoretical results of thermal GaAs metamaterial emitters for sub-THz/THz frequency range are presented. Working principles for such devices is based on thermal radiation resonance, which occurs due to the coupling of surface plasmon polaritons, which are simultaneously excited on both conductive layers of the structure [3, 4]. Considering relatively small thermal radiation intensity in sub-THz region, it is very important to make precise structure optimization to achieve emission powers that would be at least theoretically available for practical applications. In this study, optimization was performed using 3D finite-difference time-domain (3D FDTD) method.

Taking into account, GaAs-based semiconductor devices, which are currently being developed in department, thermal emitter was implemented using n-GaAs/GaAs/Au structure instead of typical Au/SiO₂/Au [5]. First experiments were performed using the simplest square metasurface cell geometrical shape. Metasurface layer was prepared using e-beam deposition method and structuring was performed by UV laser lithography, allowing to achieve up to 1 μm

resolution. Geometrical metasurface parameters were adjusted according to the desired frequency.

4 samples, operating in 0,8 THz - 1,4 THz frequency range were prepared. Emission characterisation was performed using Michelson interferometer by heating the samples up to 400°C using specially prepared controlled heater, ensuring good heat transfer and temperature stability. In order to avoid parasitic setup emittance, 4 mm cone aperture was used along with 4 THz high-frequency filter. Signal was registered using Golay detector.

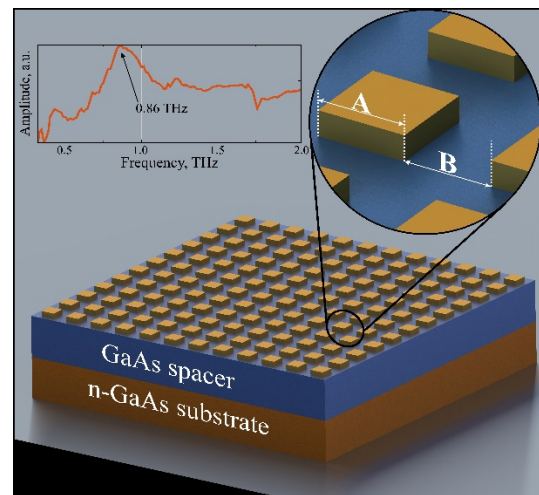


Figure 1. Sketch, displaying the structure and typical emission spectra (inset).

During this work, metasurface emitter for THz/sub-THz frequency range was successfully demonstrated using GaAs platform. Good coincidence between theoretical calculations and experimental results offer thus relatively simple THz/sub-THz emitter with desired resonant frequency.

References:

1. G. Valušis et. al., Sensors, **21**, 4092 (2021).
2. R. Xu and Y. Lin, Nanomaterials, **10**, (2020).
3. M. Tsai et. al., Appl. Phys. Lett. **89**, (2006).
4. C. Chen et. al. Appl. Phys. Lett. **91**, (2007)
5. F. Alves et. al., Optics Express **19**, (2012).

MOLEKULINIŲ PLUOŠTELIŲ EPITAKSIJOS SĄLYGŲ ĮTAKA KVANTINIŲ KASKADINIŲ LAZERIŲ PAVIRŠIAUS KOKYBEI

Karolis Stašys, Jan Devenson, Vytautas Jakštas

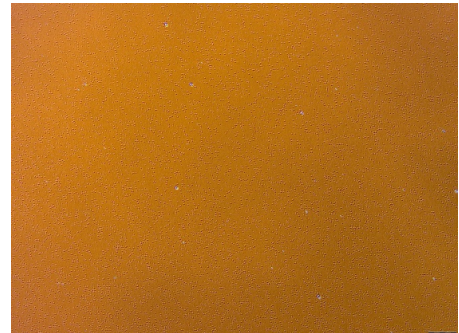
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolis.stasys@ftmc.lt

Kvantiniai kaskadiniai lazeriai (QCL) dabar laikomi standartiniais šviesos šaltiniais daugeliui cheminių jutiklių, dirbančių vidurinėje infraraudonųjų spindulių ruože (Mid-IR) 3-10 μm . Deja, QCL formavimas naudojant molekulinio pluošto epitaksiją (MPE) yra labai sudėtingas, nes net mažiausi augimo sąlygų svyravimai gali stipriai įtakoti kristalinės gardelės kokybę ir lazerio savybes. Dėl labai stiprios arseno desorbcijos greičio temperatūros priklausomybės reikia naudoti didelį arseno viršslėgį vietinio oksido desorbcijos proceso metu. Kita vertus, didelis V grupės elementų viršslėgis gali sukelti antisaitų susidarymą ir padidinti defektų tankį išaugusioje struktūroje.

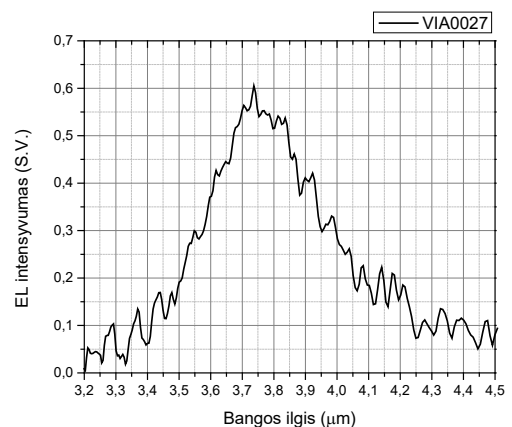
Šiame darbe mes tiriamo, kaip InAs kristalinių padėklų oksido desorbcija ir stipriai Si-legiruoto plakiruojančio sluoksnio augimo sąlygos, taip pat plokštelių temperatūros pasiskirstymas, įtakoja defektų tankį suformuotoje struktūroje. Defektų tankis yra labai svarbus QCL plokštelių kristalų parametras, nes jis tiesiogiai koreliuoja su lazerio našumu. Defektų tankis buvo vertinamas naudojant diferencialinės interferencijos kontrasto mikroskopiją.

Atliekant pirminius QCL struktūrų auginimus, buvo pastebėta, kad InAs medžiagos epitaksija ant dviejų colių kristalinių padėklų, leidžia gauti pakankamai storus sluoksnius su labai mažu ($\sim 200 \text{ cm}^{-2}$) defektu tankiu. Tuo tarpu naudojant 3-jų colių padėklus, situacija yra kitokia - augimo metu padėklų išorinis žiedas turėjo labai daug defektų ($> 8000 \text{ cm}^{-2}$). Manoma, kad ši sritis susidaro dėl plokštelių laikiklio užteršimo. Siekiant išvalyti laikiklius nuo bet kokios taršos, jie buvo nusmėliuoti. Tai pakeitė laikiklių paviršiaus šiurkštumą, kas lėmė padidėjusią šilumos iš efuzijos celių ir padėklo kaitintuvo sugertį. Manome, kad tai sukėlė labai netolygų temperatūros pasiskirstymą. Pirometru išmatuotas padėklo temperatūrinis gradientas (nuo centro link krašto) siekė apie 25 $^{\circ}\text{C}$ skirtumą. Šis temperatūros pokytis paveikė deoksidacijos proceso kokybę, perkaitindamas padėklų periferiją, o augimo metu nebuvo įmanoma kontroliuoti deoksidacijos stebint RHEED rekonstrukcijas, nes šiuo metodu yra stebima tik centrinė padėklo dalis. Tai lėmė netolygią padėklo valymo procedūrą, dėl kurios atsirado didelis defektų tankis su neįprastu pasiskirstymu (1 pav). Didelis temperatūrinis gradientas per padėklą taip

pat turėjo didelį poveikį stipriai siliciu legiruoto plakiruojančio sluoksnio augimui, dėl ko susidarė regionai, kuriuose yra labai didelis defektų tankis. Siekiant sumažinti defektų tankį, augimo sąlygos buvo kruopščiai pakeistos, išlaikant pusiausvyrą tarp arseno viršslėgio ir augimo temperatūros. Tačiau sąrankos pakeitimai buvo nepakankami, norint sumažinti plokštelių temperatūros gradientą. Problemai spręsti, buvo panaudotas tokio pat dydžio silicio padėklas, uždėtas tiesiai ant InAs padėklo, kuris turėtų veikti, kaip šilumos skirstytuvas. Tai turėjo teigiamą įtaką ir leido smarkiai sumažinti InAs pagrindu pagamintų kvantinių kaskadinių lazerinių struktūrų defektų tankį ir leido užauginti elektroluminescuojančias struktūras (2 pav.).



1 pav. QCL kristalo paviršiaus, po nesėkmingo auginimo, Nomarskio vaizdas.



2 pav. QCL kristalo elektroluminescencijos spektras.

Literatūra

- [1] J. Devenson, R. Teissier, O. Cathabard, A. Baranov. InAs-based quantum-cascade lasers. February 2008 Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering 6909:22-DOI: 10.1117/12.767653.

INDIUM CONTENT INFLUENCE ON EMISSION WAVELENGTH IN InGaAs QUANTUM WELLS

Andrea Zelioli, Algirdas Jasinskas, Simona Pūkienė, Lukas Jočionis,
Bronislovas Čechavičius and Renata Butkutė

Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania
andrea.zelioli@ftmc.lt

Several types of lasers, such as, solid-state, semiconductor, gas, excimer, and dye lasers, have been developed. Today lasers are used in many fields, particularly in optical fiber communication, optical digital recording, material processing, biology and medicine, spectroscopy, imaging, entertainment, and many others. Due to exceptional material properties and/or investigation conditions various application require unique set of laser parameters - emission wavelength, its tunability, beam quality, operation temperature, optical output power, as well as convenient method of laser excitation, power consumption, high-speed modulation and device size is very important.

Vertical-external-cavity surface-emitting lasers (VECSEL) also called optically pumped semiconductor lasers (OPSL) or semiconductor disk laser (SDL) belong to relatively new laser family that combines many of the desirable properties. VECSELs were developed to overcome key problems typical to conventional semiconductor lasers. In comparison to both types of electrically pumped Vertical-cavity surface-emitting lasers (VCSELs), which emit circular fundamental transverse mode beam but exhibit low power and edge emitting lasers (Fabry-Perot and DFB) that can reach high output power but an asymmetric beam with strong angular divergence, VECSELs are capable to generate high optical power with circular beam quality.

In this work the behaviour of the emission wavelength was studied in relation to the design parameters of the VECSEL chip. Multiple InGaAs/GaAs quantum wells (MQWs) and AlAs/GaAs Distributed Bragg reflector (DBR) were used for VECSEL architecture. The separate layers and VECSEL structures were grown using solid-source MBE system (Veeco GENxplor R&D) equipped with standard cells for metallic Al, Ga and unique As design source generating pure arsenic dimers flux. The structure was grown on semi-insulating GaAs substrate oriented in (001) crystalline plane. The number of MQWs was set at 12.

Different samples were grown varying the In content in the QW from 14% to 30% and the emission wavelength of these structures was measured using photoluminescence spectroscopy at room temperature. The results

obtained from these measurements are presented in Figure 1 where we can see an increase in wavelength emission with the increase in indium content.

The same characterization was performed on samples grown with different QW's thickness in order to study the effect of thickness on the wavelength emission. The results are shown in Figure 2. Using the knowledge acquired from these measurements the full VECSEL chip was fabricated, aiming at the production of a structure with emission wavelength of 976 nm. The reflectance of DBR was modelled for 25-30 GaAs and AlAs periods to obtain higher than 97% at central DBR wavelength of 976 nm. All grown layers and VECSEL structures were characterized by Atomic Force Microscopy, Reflectance and Photoluminescence measurements.

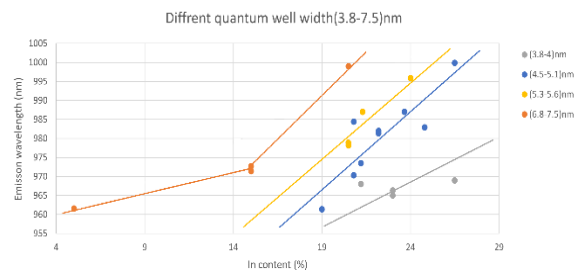


Figure 1. Measured wavelength emission as a function of In content in the quantum wells.

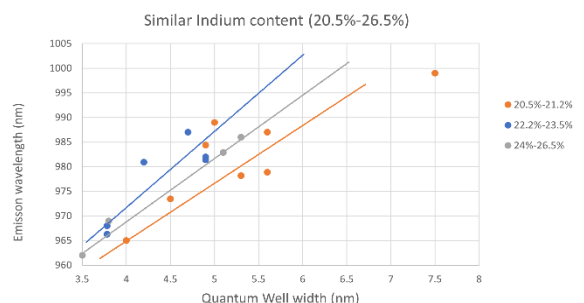


Figure 2. Measured wavelength emission as a function of QW width.

References

1. Guina, M., A. Rantamäki, and Antti Härkönen. "Optically pumped VECSELs: review of technology and progress." *Journal of Physics D: Applied Physics* 50.38 (2017): 383001.
2. Hecht, Je. *The Laser Guidebook: Second Edition*. McGraw-Hill, 1992.
3. Bacher, G., et al. "Influence of barrier height on carrier dynamics in strained In x Ga 1- x As/GaAs quantum wells." *Physical Review B* 43.11 (1991): 9312.

STIPRIOSIOS SĄVEIKOS REŽIMAS HIBRIDINĖSE TAMM'O PLAZMONŲ – PAVIRŠINIŲ PLAZMONŲ POLIARITONŲ MODOSE

Ernesta Bužavaitė-Vertelienė¹, Vilius Vertelis², Zigmas Balevičius¹

¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: ernesta.verteliene@ftmc.lt

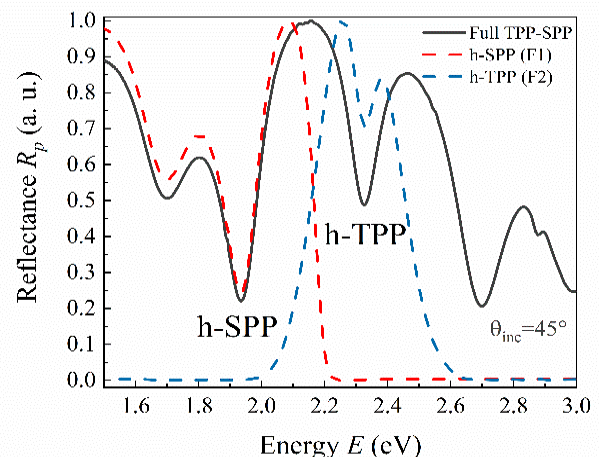
² Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

Per kelerius paskutinius metus pradėta plačiau tyrinėti stipriosios sąveikos efektą tarp hibridinių sistemų, tokių kaip plazmonai ir eksitonai [1]. Tokiose hibridinėse sistemose energijos mainai įvyksta per koherentiškumo laiką, todėl energija keičiamasi be nuostolių. Kuomet plazmonas ir eksitonas yra surištoje būsenoje, energijų lygmenys nuo pradinių jų verčių pakinta ir tokia nauja sistema yra hibridinė.

Stiprioji sąveika gali būti ir hibridinėse plazmoninėse sistemose. Viena tokių sistemų yra hibridiniai Tamm'o plazmonų – paviršinių plazmonų poliaritonai (TPP-SPP) [2]. Tokie hibridiniai TPP-SPP sužadinimai generuojami struktūrose, sudarytose iš 1D fotoninio kristalo (FK) su plonu metalo sluoksniu, pritvirtintose prie prizmės ar gardelės. Abu sužadinimai (TPP ir SPP) yra generuojami skirtingose to paties metalo sandūrose: TPP sužadinimas generuojamas 1D FK/metalo sandūroje, o SPP – metalas/dielektrikas (t. y. supanti aplinka) sandūroje. Tokie sužadinimai, esant pakankamai plonam metalo sluoksnio storiui, pasižymi stūmos požymiu ir tokiu būdu labiau išstumia vienas kitą iš metalo į dielektriką. Dėl labiau į dielektriką išstumto sužadinimo sumažėja energijos nuostoliai, kuriuos plazmoninės modos patiria metalė, o tai pasireiškia plazmoninių rezonansų pločio susiaurėjimu. Toks nuostolių sumažėjimas padidina tokio TPP-SPP sužadinimo jautrumą [3].

Šiame darbe buvo tiriama plazmoninė – fotoninė nanostruktūra, pagaminta iš 1D fotoninio kristalo su plonu (~40 nm) aukso sluoksniu. FK buvo pagamintas iš 6 pakaitomis užaugintų TiO₂ (~60 nm) ir SiO₂ (~110 nm) bisluoksnių. TPP-SPP plazmoninėms bangoms žadinti bei stipriąjai sąveikai hibridinėje TPP-SPP modose tirti buvo naudojamas visiškojo vidaus atspindžio elipsometrijos metodas. Stipriosios sąveikos režimui nustatyti buvo naudojamas paprastas eksperimentinis optinių filtrų metodas. Optiniai filtrai (Schott OG 590 (F1) filtras – TPP komponentei nufiltruoti, Schott VG 14(F2) – SPP komponentei nufiltruoti) buvo įterpiami

tarp šviesos šaltinio ir tiriamojo objekto (prizmė/FK/Au struktūros) ir buvo parinkti taip, kad filtruotų tik vieną hibridinio TPP-SPP sužadinimo komponentę (SPP arba TPP). Šie tyrimai parodė, kad sistemai esant stipriojoje sąveikoje, nufiltruotos hibridinės TPP-SPP modos komponentės (SPP arba TPP) dispersiniai sąryšiai atitinka tokius, kai generuojamos abi TPP-SPP sužadinimo komponentės. Eksperimentinių TPP-SPP kreivių tinkinimo rezultatai parodė, kad didžiausia sąveikos stiprumo vertė yra ties pavienių TPP ir SPP kreivių susikirtimo tašku.



1 pav. Hibridinių TPP-SPP sužadinimų be F1 ir F2 filtrų p-poliarizacijos atspindžio spektro (pilka išstinė linija) palyginimas su F1 ir F2 filtrais matuotais atspindžio spektrais (raudona ir mėlyna kreivės, atitinkamai).

Literatūra

1. M. Pelton, S. D. Storm and H. Leng, *Nanoscale* **11**(31), 14540 (2019).
2. E. Bužavaitė-Vertelienė, V. Vertelis and Z. Balevičius, *Nanophotonics* **10**(5), 1565 (2021).
3. E. Buzavaite-Verteliene, I. Plikusiene, T. Tolenis, A. Valavicius, J. Anulyte, A. Ramanavicius and Z. Balevicius, *Opt. Express* **28**(20), 29033 (2020).

SANJAKO EFEKTU PAGRĮSTAS OPTINIS IZOLIATORIUS

Jaroslav Kodz, Kęstutis Regelskis, Nikolajus Gavrilinas, Julijanas Želudevičius

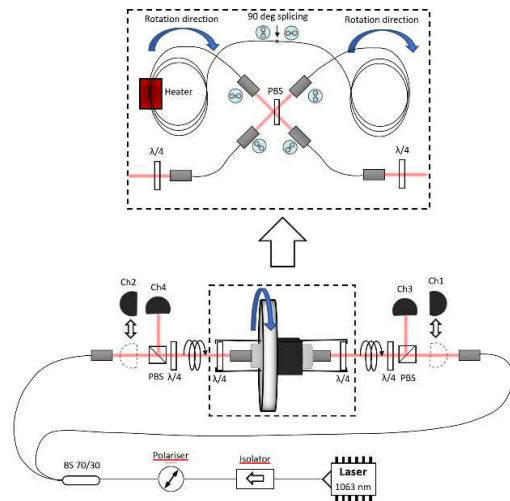
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: j. aroslav.kodz@ftmc.lt

Optiniais izoliatoriais yra vadinami prietaisai (optinės sistemos), kurios praleidžia šviesą tam tikra kryptimi, tačiau blokuoja jos sklaidimą priešinga [1]. Tokie prietaisai yra naudojami pvz. norint apsaugoti lazerius nuo išsklaidytos ir atgal grįžtančios šviesos, kuri gali sutrikdyti jų veiklą arba norint išvengti parazitinių signalų interferencijos optinės komunikacijos tinkluose.

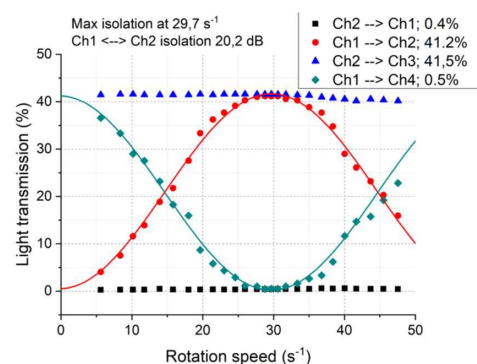
Daugumos praktikoje naudojamų optinių izoliatorių veikimo principas yra pagrįstas Faradėjaus efektu [2], kai pirmyn ir atgal skaidria medžiaga sklindančios šviesos poliarizacijos orientacija keičiama išoriniu magnetiniu lauku. Egzistuoja ir kiti fizikiniai reiškiniai leidžiantys realizuoti neapgrižiamąjį šviesos perdavimą, tokie kaip: Ramano stiprinimas, stimuliuota Brillouino sklaida, parametrinė generacija, dinaminiai procesai (pvz. lūžio rodiklio moduliavimas laike), Fezeau efektas [3]. Šiame darbe, mūsų žiniomis pirmą kartą pasaulyje, pademonstravome naujo tipo optinį izoliatorių, pagrįstą Sanjako efektu.

Šviesos neapgrižiamasis perdavimas gali būti sudarytas pasitelkiant Sanjako efektą, kai į kampiniu greičiu Ω besisukantį žiedinį interferometrą yra įvedamas šviesos pluoštas, kuriame šviesos pluoštas padalinamas į du vienodo intensyvumo šviesos pluoštus, sklindančius priešpriešai. Dėl Sanjako efekto įnešamas fazių poslinkis $\pm\pi/2$ radianų, kurio ženklas priklauso nuo priešpriešai sklindančių šviesos pluoštų sklaidimo krypties atžvilgiu žiedinio interferometro sukimosi krypties. Tarp priešpriešai sklindančių žiediniame interferometre šviesos pluoštų yra įnešamas papildomas fiksuotas fazių poslinkis $\pi/2$ radianų, rezultate gaunant suminį fazės poslinkį π radianų arba 0. Po to, žiediniame interferometre priešpriešai sklindantys šviesos pluoštai interferuodami apsiijungia į vieną pluoštą ir išeina iš besisukančio žiedinio interferometro kitu keliu nei šviesos pluoštas patenka į interferometrą. Skaidulinio optinio izoliatoriaus pagrįsto Sanjako efektu optinė schema yra pavaizduota 1 pav. Tyrimams buvo naudojama koherentinė 1063 nm spinduliuotė (nuolatinės veikos). Skirtingų poliarizacijų pluoštai buvo apjungiami iš išskiriami panaudojant poliarizacinius pluošto daliklius (PBS). Prietaiso pralaidumo abiem kryptimis priklausomybės nuo sukimosi greičio buvo matuojamos tomis pačiomis sąlygomis ir (beveik)

tuo pačiu metu. Pralaidumo kreivės pavaizduotos 2 pav. Didinant disko sukimosi greitį stebime, kad šviesos pralaidumas ir blokavimas viena kryptimi išlieka praktiškai nepakitęs. Tuo tarpu priešinga kryptimi šis santykis kinta, kol galiausiai prie tam tikro greičio pralaidumo ir blokavimo kanalai visiškai susikeičia. Geriausia užregistruota izoliacija siekia 20.2 dB.



1 pav. Skaidulinio optinio izoliatoriaus pagrįsto Sanjako efektu optinė schema.



2 pav. Prietaiso pralaidumo tarp skirtingų kanalų priklausomybė nuo sukimosi greičio.

Literatūra

- [1] D. Jalas, A. Petrov, M. Eich, W. Freude, Sh. Fan, Z. Yu, R. Baets, M. Popović, A. Melloni, J. D. Joannopoulos, M. Vanwolleghem, Ch. R. Doerr, H. Renner, What is - and what is not - an optical isolator, Nature Photon, 7(8): 579-582, July 2013.
- [2] A.K. Zvezdin, V.A. Kotov, Modern Magnetooptics and Magneto-optical Materials, 1 ed.; Taylor & Francis Group: New York, NY, USA, 1997; pp. 1-109.
- [3] Maayani, S., Dahan, R., Kligerman, Y. et al. Flying couplers above spinning resonators generate irreversible refraction. Nature 558, 569-572 (2018).

ŠVIESOLAIDINIS DERINAMO BANGOS ILGIO IMPULSŲ GENERATORIUS PAREMTAS FAZĖS SAVIMODULIACIJA IR PAKAITINIŲ SPEKTRINIŲ FILTRAVIMU

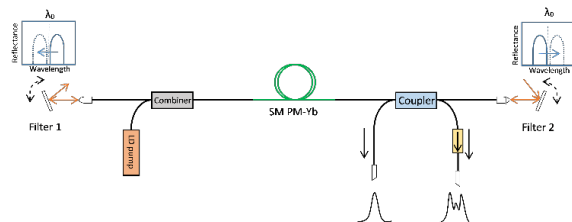
Gustas Liaugminas, Julijanas Želudevičius, Kęstutis Regelskis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: gustas.liaugminas@ftmc.lt

Derinamo bangos ilgio impulsiniai lazeriniai šaltiniai turi pritaikymų tokiose srityse kaip biomedicina [1] ir oro taršos stebėjime [2]. Dauguma įprastų impulsų generavimo metodų remiasi modų sinchronizacija, kuriai įgyvendinti naudojami aktyvūs modulatoriai arba įsisotinantis sugėrikliai (pvz. SESAM), kurie laikui bėgant degraduoja, be to apriboja bangos ilgio ir pasikartojimo dažnio pasirinkimą [3].

Šiame darbe pristatome šviesolaidinę impulsų generavimo sistemą, kurios veikimas paremtas impulso fazine savimoduliacija ir pakaitiniu spektriniu filtravimu. Tokia sistema leidžia sugeneruoti kelių pikosekundžių trukmės impulsus, kurių bangos ilgis gali būti derinamas nuo 1018 nm iki 1044 nm.

Generavimo metodas paremtas tuo, kad trumpo pradinio impulso spektras, sklindant tam tikro ilgio šviesolaidžiu, dėl fazinės savimoduliacijos išplinta. Dalis šio plataus spektro yra išfiltruojama gausiniu filtru ir gražinama atgal į sistemą. Šis impulsas yra vėl stiprinamas, išplečiamas spektre ir filtruojamas kitu filtru, kurio spektrinė padėtis paslinkta pirmojo filtro atžvilgiu. Vykstant tokiai cirkuliacijai generuojama impulsų vorą, kurios pasikartojimo dažnis priklauso nuo šviesolaidžio, kuriuo sklinda impulsas ilgio, o bangos ilgis priklauso nuo filtrų spektrinių padėčių. Tokiai generacijai startuoti reikalingas užkartinis impulsas, tačiau galimas ir savaiminis generatoriaus startavimas, jei filtrų spektrai turi tam tikrą persiklojimą.

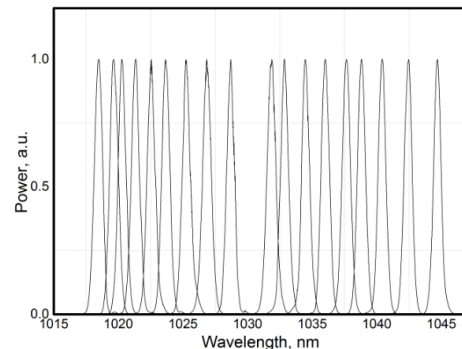


1 pav. Eksperimentinė schema.

Esant nedideliame spektriniame persiklojime sistemoje atsiranda grįžtamasis ryšys, dėl ko pradeda generuotis atsitiktinės galingų impulsų serijos, kurios gali veikti kaip užkartinis impulsas ir startuoti trumpų impulsų seką.

Eksperimentinėje sistemoje stiprintuvą sudarė iterbiu legiruota dvigubo apvalkalo skaidula į kurią per skaidulinį tankintuvą įvedama 976 nm kaupinimo spinduliuotė. Spektriniam filtravimui buvo panaudotos dvi atspindinčios difrakcinės gardelės orientuotos Littrow kampu, spektrinės filtrų padėtys buvo derinamos keičiant difrakcinių gardelių pasukimo kampą. Tarp gardelės ir stiprintuvo buvo įvirintas skaidulinis pluošto daliklis, skirtas sugeneruotų impulsų išvedimui (2 pav).

Perklojant difrakcines gardeles skirtingose iterbio stiprinimo juostos vietose, pavyko gauti savaime startuojančią impulsų seką, kurios pasikartojimo dažnis 14,4 MHz, vidutinė impulsų galia 1 mW, o bangos ilgis derinamas nuo 1018 nm iki 1044 nm (2 pav). Impulso spektro plotis priklauso nuo difrakcinių gardelių rėžių tankio. Mūsų atveju impulso spektro plotis 0,7 nm, tai atitiktų 2 ps trukmės impulsą.



2 pav. Impulsų spektrai perklojant filtrus skirtingose spektrinėse padėtyse.

Literatūra

1. T. Gottschall, T. Meyer, M. Schmitt, J. Popp, J. Limpert, and A. Tünnermann, Four-wave-mixing-based optical parametric oscillator delivering energetic, tunable, chirped femto-second pulses for non-linear biomedical applications. *Opt. Express* **23** (18), 23968–23977 (2015).
2. A. Fried et al. Tunable infrared laser instruments for airborne atmospheric studies, *Appl. Phys. B*, vol. **92**, no. 3, 409–417 (2008).
3. K. Viskontas, K. Regelskis and N. Rusteika, Slow and fast optical degradation of the SESAM for fiber laser mode-locking at 1 μm, *Lithuanian Journal of Physics*, Vol. **54** (3), 127–135 (2014).

SKULPTŪRINIŲ PLONŲ SLUOKSNIŲ PAGRINDU SUFORMUOTI SILICIO OKSIDO VEIDRODŽIAI DIDELĖS GALIOS LAZERIAMS

Lukas Ramalis¹, Ugnė Norkutė¹, Rytis Buzelis¹ ir Tomas Tolenis^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: lukas.ramalis@ftmc.lt

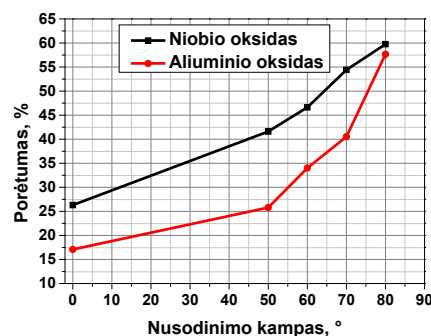
²ELI Beamlines, Čekijos mokslų akademijos fizikos institutas, Za Radnicí 835, Dolní Brežany, Čekija

Šiuolaikiniai modernūs ir inovatyvūs lazeriniai įrenginiai pasižymi didelių galių spinduliuote. Vieni iš pagrindinių komponentų lazerinėje sistemoje yra optiniai elementai padengti plonais sluoksniais, kurie dažniausiai apriboja išeinamos lazerinės spinduliuotės galią dėl sąlyginai mažos indukuotos pažaidos slenksčio vertės. Siekiant padidinti atsparumą lazeriniai spinduliuotei, optiniai elementai yra modifikuojami įvairiais būdais, įskaitant sluoksnių medžiagų inžineriją arba elektrinio laukio pasiskirstymo optimizavimą formuojant daugiasluoksnę struktūrą [1].

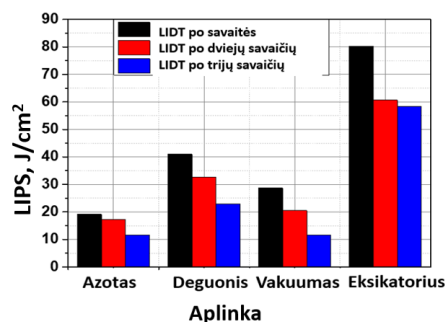
Optiniai dangai sąveikaujant su didelės energijos nanosekundiniais lazeriniais impulsais, medžiagoje susidaro įtempiai dėl terminio plėtimosi, kas gali tapti pažeidimo priežastimi. Taigi šiame darbe yra tiriami porėti nanostruktūrizuoti sluoksniai, kurie pasižymi mažomis vidinių įtempių vertėmis. Kita optinį atsparumą ribojanti priežastis yra pati medžiaga, todėl būtina ištirti plonų sluoksnių optinio atsparumo priklausomybes tiek nuo medžiagų nanostruktūros, tiek nuo draustinės juostos tarpo.

Taikant šiuolaikinę medžiagų inžinerijos technologiją – garinimo kampu metodiką, yra suformuojamos skirtingo porėtumo vienasluoksnės dangos skirtingoms medžiagoms (niobio ir aliuminio oksidai) [2]. Šioms dangoms atlikta struktūrinė ir optinė analizė bei optinio atsparumo matavimai (1 pav.). Taip pat, taikant garinimo kampu technologiją buvo suformuota sudėtingesnė daugiasluoksnė struktūra – veidrodis, naudojant tik silicio oksido medžiagą, kuris pasižymi dideliu atspindžiu (>99%) esant 355 nm bangos ilgiui ir pasižymi dideliu atsparumu nanosekundinio režimo lazerio spinduliuotei (60 J/cm²) (2 pav.).

Iš literatūros yra žinoma, jog porėtos dangos yra linkusios absorbuoti aplinkoje esančias vandens ar kitas kenksmingas daleles, todėl būtina izoluoti tokius elementus nuo aplinkos poveikio. Siekiant išvengti porėtų sluoksnių degradacijos lazerinio atsparumo atžvilgiu, dangos yra patalpinamos į skirtingas aplinkas, norint išsiaiškinti tinkamą būdą porėto elemento stabiliam laikymui.



1 pav. Porėtumo priklausomybė nuo garinimo kampo skirtingoms medžiagoms.



2 pav. Lazerio indukuotos pažaidos slenksčio matavimų rezultatai skirtingose aplinkose.

Ištyrus vienasluoksnę dangą bei silicio oksido veidrodius naudojant garinimo kampu technologiją, matome, kad dangos pasižymi labai geru lazerinės spinduliuotės atsparumu lyginant su standartiniais Brego veidrodžiais. Skirtingų aplinkų tyrimas Po bandinių laikymo skirtingose aplinkose, LIPS matavimai parodė, kad eksikatoriuje laikomos porėtos dangos optinis atsparumas ir spektrinės savybės nekinta. Atlikta struktūrinė ir optinė analizė, kuri lyginama su įprastais dangų nusodinimo metodais.

Tyrimai buvo finansuoti Lietuvos Mokslo Tarybos (LMTLT), projektas UnCoatPower (No S-MIP-20-61).

Literatūra

1. L. Grinevičiūtė, R. Buzelis, L. Mažulė, A. Melninkaitis, S. Kičas, T. Tolenis, Enhancement of high reflectivity mirrors using the combination of standard and sculptured thin films, Optics and laser technology, Elsevier, Vol 129, 2020.
2. Hodgkinson, I. & Wu and Q. H. Serial bideposition of anisotropic thin films with enhanced linear birefringence. Appl. Opt. 38, 3621-3625 1999.

AUKŠTOS SKYRIAMOSIOS GEBOS LAZERINIO METALO NUSODINIMO GALVUTĖ

Romuald Petkevič^{1*}, Giedrius Jočbalis², Ada Steponavičiūtė¹, Karolis Stravinskas¹,
Rimantas Kačianauskas², Sergejus Borodinas², Genrik Mordas¹

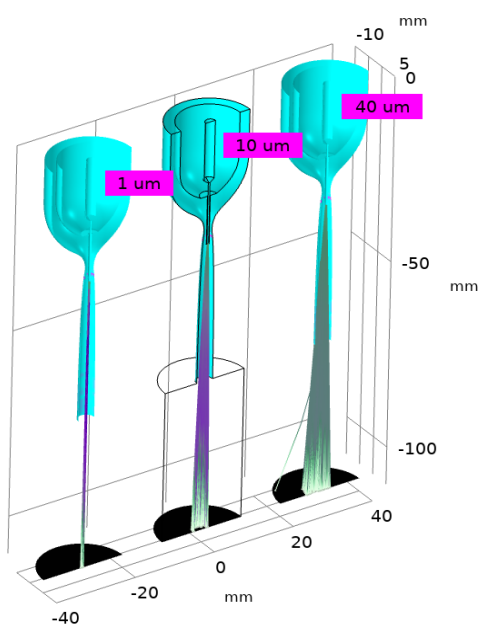
¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: ada.steponaviciute@ftmc.lt, karolis.stravinskas@ftmc.lt,
genrik.mordas@ftmc.lt

² Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Vilnius, el. p.: giedrius.jocbalis@vilniustech.lt,
rimantas.kacianauskas@vilniustech.lt, sergejus.borodinas@vilniustech.lt

Metalo priedų gamybai pastaraisiais dešimtmečiais buvo skyriamas didelis dėmesys, todėl siūlomos įvairios technologijos, skirtos trimačiams objektams gaminti. Viena iš tokių technologijų, leidžiančių gaminti didelio dydžio objektus, yra metalo nusodinimas lazeriu (LMD) [1]. Šios technologijos ribas lemia pozicionavimo sistemos galimybės. Jau esamos LMD galvutės turi palyginti prastą skiriamąją gebą [2,3].

Šio darbo tikslas yra sukurti naują LMD technologijos purkštuką su centruotu dalelių srautu. Sprendžiamos kelios mokslinės užduotys: skysčio dinamikos, dalelių ir substrato kontakto bei termodinaminės būsenos kontakto metu.

Šiame darbe buvo suprojektuoti du purkštukai, pagrįsti de Laval geometrija su Witoszynski ir Bicubic konvergencijos zonos kreivėmis. Suprojektavus purkštukus buvo tiriama dalelių pluošto susidarymas naudojant skaičiavimo daugiafizinę programinę įrangą, pagrįstą baigtinių elementų metodu.



1 pav. Metalų dalelių srauto susidarymas su skirtingais dalelių dydžiais.

Bicubic ir Witoszynski purkštukų geometrijos palyginimas parodė, kad dujų srautas su Bicubic kreivės geometrija pasiekia didesnę maksimalų greitį ties purkštuko išėjimu ir turi mažiau matomų greičio svyravimų nei purkštukas su Witoszynski kreivės geometrija. Be to, Bicubic kreivės purkštukas turi didesnę slėgio kritimą kapiliaro gale. Dėl šių priežasčių purkštukas su Bicubic kreive buvo tinkamiausias tolesniam mūsų tyrimui.

Apskaičiuotas metalo dalelių srauto susidarymas su skirtingais dalelių dydžiais ir gauti rezultatai atskleidė, kad mažos dalelės turi didžiausią greitį ir mažiausią bendrą jėgą ties purkštuko išėjimu. Smulkios dalelės turi trumpesnę atsako laiką, taigi ir mažesnę dispersiją (1 pav.).

Dalelių ir paviršiaus sąlyčio skaičiavimai atlikti taikant Cowper-Symonds modelį. Iš gautų rezultatų akivaizdu, kad maksimalus restitucijos koeficientas (COR) ir minimalus bedimensinis įdubimas pasiekiami, kai dalelių dydis yra 30 μm. Su mažesnėmis dalelėmis COR vertės yra mažesnės dėl santykinai didelio greičio. Didesnėms nei 30 μm dalelėms būdingas mažas greičio pokytis, o didėjant dalelių masei stebimas temperatūros kilimas.

Literatūra :

1. Lei Yan, Yitao Chen, Frank Liou., *Additive manufacturing of functionally graded metallic materials using laser metal deposition* (Additive Manufacturing 31 2020).
2. Zoe Jardon, Patrick Guillaume, Julien Ertveldt, Michael Hinderdael, Galid Arroud, *Offline powder-gas nozzle jet characterization for coaxial laser based Directed Energy Deposition* (Conference on Photonic Technologies [LANE 2020] on September 7-10, 2020).
3. Simone Donadello, Maurizio Motta, Ali Gokhan Demira, Barbara Previtali., *Monitoring of laser metal deposition height by means of coaxial laser triangulation* (Optics and Lasers in Engineering, Volume 112, January 2019, Pages 136-144).

LAZERIU ASISTUOTAS SELEKTYVUS DIELEKTRIKŲ PADENGIMAS METALU

Vitalij Fiodorov¹, Karolis Ratautas¹, Zenius Mockus², Romualdas Trusovas¹, Gediminas Račiukaitis¹

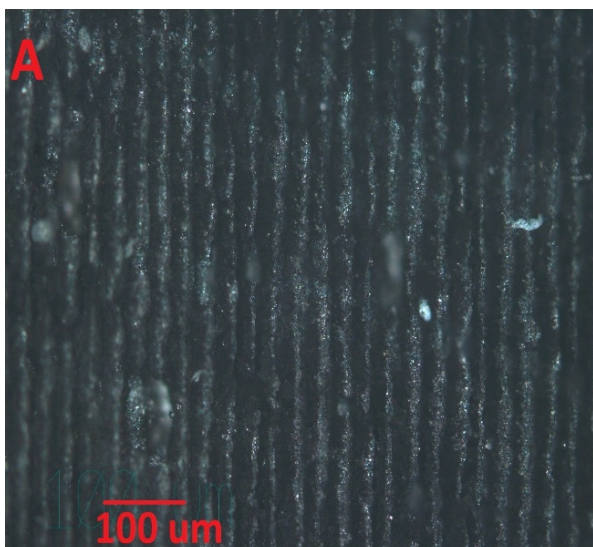
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: vitalij.fiodorov@ftmc.lt

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

Selektyvus metalo nusodinimas ant dielektrinių paviršių yra plačiai naudojamas elektronikos pramonėje elektrai laidžių takelių gamyboje. Mūsų kuriamo metodo pagrindinis privalumas yra galimybė gaminti elektrai laidžius takelius ant trimačių paviršių, kur standartiniai metodai nėra tinkami. Technologija galėtų būti taikoma integruotos į plastiką elektronikos (ang. Moulded interconnect devices (MID)) gamyboje, kur pagrindinė problema yra elektrai laidžių takelių gamyba ant trimačių paviršių. Metodą sudaro du žingsniai: visų pirma, elektrinės grandinės schema ant polimero paviršiaus yra užrašoma lazerio spinduliu. Kai kurių polimerų elektrinis laidumas gali padidėti, paveikus juos lazerine spinduliuote. Tuomet, polimerinė detalė yra panardinama į galvaninį tirpalą, kur lazerio paveiktose paviršiaus vietose, veikiant elektros srovei, nusėda vario takeliai.

Eksperimente buvo naudojama poliimido (PI) Kapton® plėvelė. Bandiniai buvo apdirbti, naudojant nanosekundinių bei pikosekundinių impulsų lazerius, generuojančius 532 nm ir 1064 nm bangos ilgio spinduliuotę. Eksperimentas buvo atliktas, naudojant vidutinės lazerio galios nuo 0.25 W iki 8.5 W,

impulsų pasikartojimo dažnius nuo 100 kHz iki 400 kHz bei eksperimente naudotas spindulio skenavimo greitis buvo 100 mm/s. Po lazerinio apdirbimo, paviršinė varža buvo matuojama keturių zonų metodu. Geriausiu atveju ją pavyko sumažinti iki mažiau nei 10 Ω tinkamai parenkant polimero apšvitos parametrus. Rasti keli spinduliuotės poveikio poliimidui režimai: veikiant bandinio paviršių energijos tankiais nuo 0.1 J/cm² iki 2.6 J/cm², paviršiuje susidaro anglis. Šiame režime paviršinė varža stipriai priklauso nuo spinduliuotės energijos tankio. Paveikiant bandinį energijos tankiais nuo 0.006 J/cm² iki 0.036 J/cm² bandinio paviršiuje susidaro grafitinė struktūra. Pastebėta, jog poliimido paviršiaus struktūros pokyčiams, stiprią įtaką turi apšvitos trukmė bei lazerio impulsų kiekis į ploto vienetą. Lazeriu apdirbtų bandinių paviršių charakterizavimas buvo atliktas, pasitelkiant Ramano spektroskopijos metodą. Galiausiai bandiniai buvo padengti įvairių storių vario sluoksniais galvaniniu būdu, parenkant tirpale tekančios srovės tankį ir dengimo laiką. Ploniausias sluoksnis, kuriuo pavyko tolygiai padengti visą apdirbtą paviršių buvo 5 μ m.



1 pav. Poliimido (PI) Kapton® plėvelė po lazerinio apdirbimo (1 J/cm², 100 kHz, 1064 nm) (A) ir po galvaninio dengimo variu (1 A/dm², 45 min) (B).

LAZERIU ASISTUOTAS PTFE PADENGIMAS METALU KATALITINIŲ BŪDU

Vytautas Vosylius¹, Karolis Ratautas¹, Evaldas Kvietkauskas¹, Aldona Jagminienė²,
Ina Stankevičienė², Eugenijus Norkus², Gediminas Račiukaitis¹

Fizinių ir technologijos mokslų centras, ¹Lazerinių technologijų skyrius, ²Katalizės skyrius.
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: vytautas.vosylius@ftmc.lt

Sparčiai besivystančiai elektronikos pramonei yra poreikis gaminti vis kompaktiškesnius bei funkcionalesnius produktus. Tam ieškoma naujų technologijų, metodų bei medžiagų. SSAIL (*Selective Surface Activation Induced by Laser*) technologija gali būti taikoma elektrai laidžių takelių gamybai [1]. Eksperimente naudojama PTFE medžiaga, šiai technologijai nauja. Todėl eksperimentuota su įvairiais lazerinio mikroapdirbimo bei cheminio proceso parametrais, siekiant pritaikyti technologiją kokybiškų elektrai laidžių takelių gamybai ant teflono.

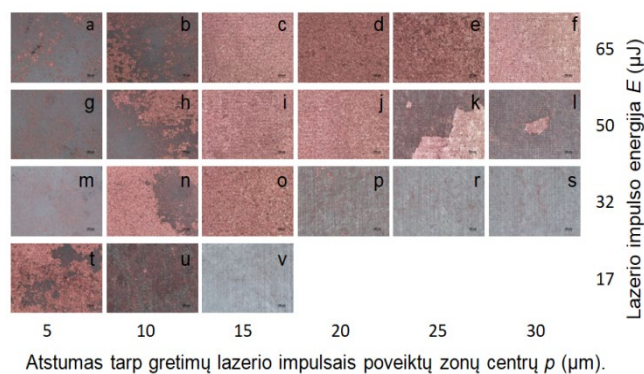
SSAIL procesas vyksta keliais etapais: pirmiausiai medžiagos paviršius modifikuojamas lazeriu; tuomet jis chemiškai aktyvuojamas; po to bandinys nuplaunamas dejonizuotame vandenyje; ir tuomet chemiškai dengiamas metalu. Lazeriu modifikuotos vietos yra labai gerai aktyvuojamos chemiškai, o ant nemodifikuoto paviršiaus po plovimo lieka tik pavieniai aktyvacijos centrai, kurie tolimesnio dengimo metu tarpusavyje nesusijungia. Po kokybiško proceso gaunamas vientisas vario sluoksnis lazeriu modifikuotose zonose, o nemodifikuotose vietose matomos tik užuomazgos.

SSAIL procesas priklauso nuo įvairių lazerinio apdirbimo proceso parametrų: impulsų trukmės, pasikartojimo dažnio, skenavimo greičio, impulsų energijos, pluošto diametro ant paviršiaus, spinduliuotės bangos ilgio, atstumo tarp gretimų poveikio zonų centrų, spinduliuotės dozės, bei vidutinės lazerio galios. Eksperimento supaprastinimui buvo pasirinkta ištirti priklausomybę nuo lazerio impulso energijos E , bei atstumo tarp gretimų poveikio zonų centrų p . Pirminiai eksperimentai parodė, kad galima naudoti didžiausią lazerio pasikartojimo dažnį $f = 400$ kHz, nes nebuvo stebėti neigiami efektai, tokie kaip paviršiaus lydymasis ar degimas ant lazeriu paveiktų zonų kraštų, kurie buvo stebėti apdirbant kitas polimerines medžiagas, tokias kaip PC-ABS [2]. Geriausi rezultatai gaunami po lazerinio proceso bandinius papildomai išdvinant specialiai PTFE

skirtu išdikinčiu. Kiti parametrai po pirminių eksperimentų buvo pasirinkti atitinkamai: lazerio pasikartojimo dažnis $f = 400$ kHz; bangos ilgis $\lambda = 532$ nm; impulso trukmė $\tau = 10$ ps; pluošto diameteras sąsmaukoje $d = 30$ μ m.

Pagaminta parametrų matrica fotografuota optiniu mikroskopu su 5x didinimu (**Paveikslas 1**), rausva spalva yra matomos po SSAIL proceso varu pasidengusios zonos. Pageidaujama vientiso vario sluoksnio danga be trūkių, tokia kaip matoma Paveikslas 1c, d, e, f, i, j, bei o dalyse.

Iš gautos parametrų matricos (**Paveikslas 1**) nuspręsta, kad optimalūs lazerinio proceso parametrai yra: $p = 17,5$ μ m, $E = 57,5$ μ J. Kadangi bandymai atlikti su 400 kHz impulsų pasikartojimo dažniu, skenavimo greitis $v = f \cdot p = 7$ m/s. Šis greitis yra žymiai didesnis nei ant PC-ABS [2].



Paveikslas 1 Vairu dengto PTFE paviršiaus matricos zonos su skirtingais lazerinio proceso parametrais.

Optimalūs parametrai bus naudojami tolimesniuose tyrimuose, tiriant lazerinio apdirbimo kampu į paviršių poveikį SSAIL proceso kokybei, kad būtų galima patikimai taikyti procesą ant 3D paviršių.

Literatūra

1. K. Ratautas, et al, AppliedSurfaceScience, **470**, 405-410, (2019).
2. K. Ratautas, et al, Polymers **12**(10), 2427, (2020).

PILNOJO LAUKO OPTINĖ KOHERENTINĖ TOMOGRAFIJA SU SKAITMENINE ABERACIJOS KOREKCIJA

Karolis Adomavičius, Vytautas Jakštas, Ieva Žičkienė,
Danielis Rutkauskas, Egidijus Auksorius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolis.adomavicius@ftmc.lt

Optinė koherencinė tomografija (OKT) yra interferometrinis vaizdavimo metodas, plačiai naudojamas žmogaus akies tinklainės vaizdinimui *in vivo*, kuris gali atvaizduoti tinklainės audinių giluminius sluoksnius. Dėl šios savybės OKT dažnai naudojama įvairių akies patologijų, tokių kaip glaukoma ar geltonosios dėmės degeneracija, diagnozavimui, tyrimui ir sekimui [1]. Klasikinėse OKT sistemose signalas registruojamas taškiniu detektoriumi, todėl tūrinių (3D) duomenų gavimas yra palyginti lėtas procesas, nes reikia skanuoti galvanometriniais veidrodėliais abiem kryptimis plokštumoje - x ir y . Pilnojo lauko OKT sistemoje skenavimas xy plokštumoje yra pakeičiamas kameros detekcija, nes signalas yra užregistruojamas lygiagrečiai, kur kiekvienas kameros pikselis atlieka taškinio detektoriaus funkciją. Jeigu naudojamas Furje duomenų registravimo metodas, ašinę informaciją galima gauti beveik iš karto, be jokio skenavimo, kas leidžia greičiau gauti visą 3D vaizdą. Tačiau šitoks metodas reikalauja greitos kameros ir greitai derinamo bangos ilgio lazerio. Laikinis duomenų registravimas (angl. time-domain) yra lėtesnis negu Furje metodas, tačiau turi ir savo privalumus – jis leidžia pilnojo lauko OKT sistemoje registruoti vaizdus su geresne rezoliucija. [2]. Laikinė pilnojo lauko OKT taip pat nereikalauja greitos ir brangios kameros ir lazerio. Vienas iš esminių šio metodo trūkumų ir tai kad optinės aberacijos negali būti koreguojamos skaitmeniškai. Toks aberacijų kompensavimo būdas gali praversti kai objektyvas naudojamas vaizdinimui nėra geros kokybės ir dėl to iškraipo vaizdą. Toks atvejis yra akies tinklainės vaizdinime kur objektyvo vaidmenį atlieka pačios akies optika. Taigi, tinklainės vaizdavimo metu viena iš problemų yra akių lęšiuko arba stiklakūnio iškraipymai, kurie sukuria trumparegystę ar toliaregystę. Tokiu atveju šviesa yra fokusuojama prieš ar už tinklainės. Dėl to atliekant OKT gaunami nefokusuoti tinklainės vaizdai. Norint to išvengti būtų reikalingos brangios ir sudėtingos lęšių sistemos fokuso korekcijai. Paveikslėlyje

parodyta pilnojo lauko OKT sistema kurioje registruojami OKT vaizdai gali būti skatmeniškai koreguojami panaikinant optines aberacijas.

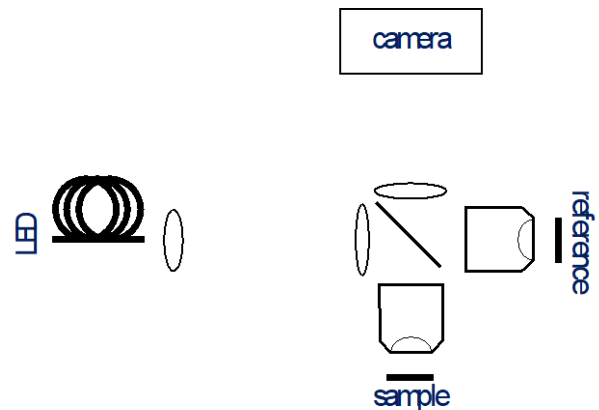


Figure 1. Pilnojo lauko OKT Sistema.

Vaizdo registravimo sistemos esminiai komponentai yra 660 nm LED šaltinis, „Linnik“ interferometras ir CMOS kamera. Fazų poslinkiui sukurti naudojamas piezo elementu stumdomas atraminio veidrodėlio laikiklis, todėl interferenciniai vaizdai, turintys optinio kelio skirtumą, suteikia fazės informaciją, reikalingą OKT vaizdams apskaičiuoti. Po vaizdo registravimo „Zernike“ polinomiali naudojami defokusuotam vaizdai atkurti. Tokia sistema leidžia vaizdams, užregistruotiems ne idealiomis sąlygomis, būti atstatytiems atgal į fokusą.

Literatūra

1. L. M. Sakata, J. DeLeon-Ortega, V. Sakata, and C. A. Girkin, "Optical coherence tomography of the retina and optic nerve—a review," *Clinical & experimental ophthalmology* **37**, 90-99 (2009).
2. E. Auksorius, Y. Bromberg, R. Motiejūnaitė, A. Pieretti, L. Liu, E. Coron, J. Aranda, A. M. Goldstein, B. E. Bouma, and A. Kazlauskas, "Dual-modality fluorescence and full-field optical coherence microscopy for biomedical imaging applications," *Biomed. Opt. Express* **3**, 661-666 (2012).

BEKVAPIO KALMANO FILTRO DIEGIMAS SKIRTO SINCHRONINIAM VARIKLIUI SU NUOLATINIAIS MAGNETAIS GREIČIO VALDYMUI

Justas Dilys

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: justas.dilys@ftmc.lt

Variklio valdymo sistemose, kurioms reikalingas didelis efektyvumas yra būtina informacija apie rotoriaus greitį ir poziciją. Mechaninių pozicijos jutiklių, antai kaip holo jutiklių ar mechaninių jutiklių naudojimas variklių pavarose padidina valdymo sistemos kainą ir sumažina sistemos patikimumą. Todėl variklio valdymas be pozicijos jutiklių būtų praktiška variklio valdymo su mechaniniais jutikliais alternatyva. Populiarus ir plačiai naudojamas be jutiklinis variklio valdymo algoritmas yra išplėstinis Kalmano filtras (angl. *Extended Kalman filter-EKF*). EKF yra optimalus algoritmas, kuris sumažina vidutinę apskaičiuotų dydžių kvadratinę paklaidą. Alternatyvus metodas išplėstiniam Kalmano filtrui (EKF) yra bekvapis Kalmano filtras (angl. *Unsended Kalman filter - UKF*).

Sinchroninio variklio su nuolatiniais magnetais ir sinuso formos magnetinio srauto matematinis modelis yra:

$$\frac{di_{\alpha}}{dt} = -\frac{R_s}{L_s} i_{\alpha} + \frac{\lambda_m}{L_s} \omega_e \sin \theta_e + \frac{v_{\alpha}}{L_s} \quad (1)$$

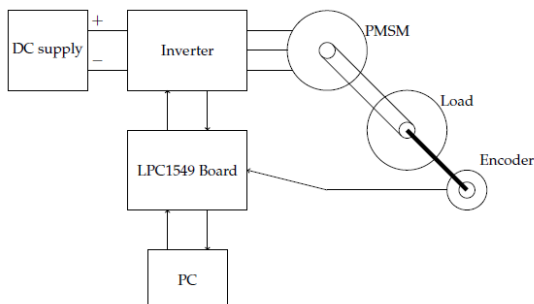
$$\frac{di_{\beta}}{dt} = -\frac{R_s}{L_s} i_{\beta} - \frac{\lambda_m}{L_s} \omega_e \cos \theta_e + \frac{v_{\beta}}{L_s} \quad (2)$$

$$\frac{d\omega_e}{dt} = \frac{3}{2} \frac{\lambda_m}{J} (i_{\beta} \cos \theta_e - i_{\alpha} \sin \theta_e) - \frac{B}{J} \omega_e - \frac{T_L}{J} \quad (3)$$

$$\frac{d\theta_e}{dt} = \omega_e \quad (4)$$

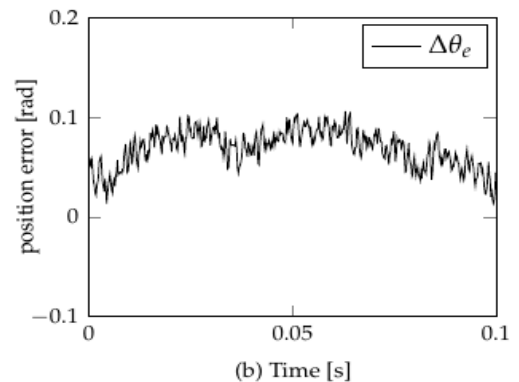
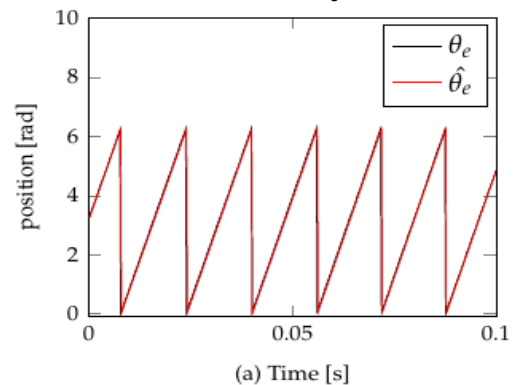
Pagrindinis nežinomas yra θ_e kuris yra estimuojamas UKF filtru.

Eksperimentinė bandymų platforma parodyta 1 pav. Eksperimentinį standą sudaro: 30 W PMSM variklis, kuris yra valdomas NXP keitiklio FRDM-MC-LVPMMS; kitas variklis naudojamas kaip apkrova; „NXP“ plokštė „Xpresso-LPC1549“; Nuolatinės srovės įtampos maitinimo šaltinis 24V; 360P fotoelektrinis rotacinis kodavimo įrenginys; asmeninis kompiuteris (PC).



1 pav. Eksperimentinė stendo schema.

UKF filtro algoritmo tikslumas palygintas su išmatuota rotoriaus kampo pozicija ir yra pateiktas 2 pav. Iš kurio galima daryti išvadą, kad apskaičiuota rotoriaus kampo pozicija yra pakankamai tiksli ir tiriamais metodais puikiai tinka sinchroninio variklio valdymui.



2 pav. Matavimų rezultatai: a) pamatuoto rotoriaus kampo pozicija θ_e ir paskačiuoto kampo pozicija $\hat{\theta}_e$, b) paklaida.

Literatūra

- Chandler, J. *Pmsm Technology in High Performance Variable Speed Applications*; Automation Inc., Ann Arbor, MI, USA, 2008
- Wei, Z.; Tseng, K.J.; Wai, N.; Lim, T.M.; Skyllas-Kazacos, M. Adaptive estimation of state of charge and capacity with online identified battery model for vanadium redox flow battery. *J. Power Sources* **2016**, *332*, 389–398.
- Wei, Z.; Zhao, J.; Ji, D.; Tseng, K.J. A multi-timescale estimator for battery state of charge and capacity dual estimation based on an online identified model. *Appl. Energy* **2017**, *204*, 1264–1274
- Hu, S.; Xu, S.; Wang, D.; Zhang, A. Optimization Algorithm for Kalman Filter Exploiting the Numerical Characteristics of SINS/GPS Integrated Navigation Systems. *Sensors* **2015**

GOLD-COATED BLACK SILICON-BASED SERS-SUBSTRATE AS A ROBUST AND VERSATILE BIO- SENSING PLATFORM

Lena Golubewa, Renata Karpicz

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Molecular Compound Physics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: lena.golubewa@ftmc.lt

Surface enhanced Raman spectroscopy (SERS) is a sensitive analytical technique for trace analyte detection, identification, and characterization. It exhibits strong potential for such fields as environmental monitoring, drug analysis, bio-medical laboratory analysis. The requirements for SERS- substrates for these applications systems include: (i) detection sensitivity and rapidity, (ii) targets separation, classification, and quantification, (iii) concentration of the analytes from the matrix and the assembly structures, (iv) possibility to be installed in the portable instruments and miniaturized devices.

In the present study we perform the production and surface characterization, plasmonic properties simulation by Finite Element Method (FEM), substrate uniformity, stability, rigidity and high potential of reusability of various black silicon-based substrates for SERS as well as demonstrate their application for the detection of the chemotherapeutic drug doxorubicin and its concentration evaluation, graphene quantum dots (GQDs) structure analysis and their modification under the action of various oxidants in biological fluids.

Two types of black silicon (bSi) and bSi with gold thin layer deposited on top was characterized via scanning electron microscopy. Both bSi exhibits sharp cone-like structures of 1.2 μm height. Gold deposition led to the formation of nanosized gold hemispheres. These structures are 'hot spots', the SERS enhancement factor determined with 4-mercaptobenzoic acid (4-MBA) molecule was shown to be approx. 10^8 . Synthesized bSi/Au SERS substrate demonstrated significant potential for detection of low concentrations of anticancer drug Doxorubicin (DOX). In Fig. 1 SERS spectrum of 10 $\mu\text{mol/L}$ of DOX in water solution in comparison with Raman spectrum of DOX powder is presented. bSi/Au sample was tested for GQDs quality control. Investigation of GQD water suspension using bSi/Au substrate made it possible to reveal the presence of additional surfactant used by the supplier to solubilize GQDs. Moreover, application of bSi/Au SERS substrate allowed to identify the presence of C-O-C in-plane groups [1] in GQD structure and to demonstrate the mechanism of GQD structure modification by hypochlorous acid via C-O-C ring opening and C=O formation, leading to great loss of fluorescence properties of investigated GQDs.

BSi/Au substrate is characterized by the high structure reproducibility ($<10\%$ signal variation across the $100\times100\text{ }\mu\text{m}$ area, see Fig. 2 and Fig.2 inset), and performs significant storage stability. Keeping the substrate for 90 days in the air atmosphere leads to a less than 3.0% fluctuations in the intensity of 1588 cm^{-1} band of 4-MBA. Although purification of bSi/Au by oxygen plasma leads to oxidation of the gold layer, the decrease in the EF after 10 re-using cycles does not exceed one order of magnitude.

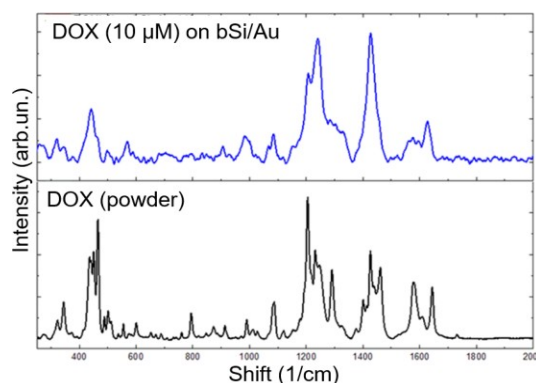


Fig. 1. SERS spectrum of DOX on bSi/Au substrate and Raman spectrum of DOX powder.

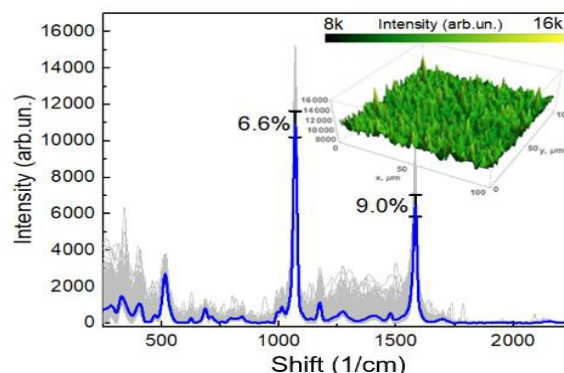


Fig. 2. Averaged Raman spectrum of 4-MBA from $100\times100\text{ }\mu\text{m}$ bSi/Au area.

To sum up, bSi/Au substrates exhibit no SERS-signal fluctuation, are stable, long-stored, and re-usable. Highly uniform 'hot-spots' distribution makes them suitable for quantitative analysis various applications.

Acknowledgements

Authors are thankful for Dr. Ieva Matulaitienė and Aliona Klimovich (Department of Organic Chemistry, Center for Physical Sciences and Technology) for the assistance in Raman spectroscopy measurements.

References

1. R. Das, S. Parveen, A. Bora, P.K. Giri, Carbon. **160**, 273– 286 (2020).

GENERATION OF REACTIVE CHLORINE SPECIES ON HIGHLY POROUS THICK WO₃ PHOTOANODE

Maliha Parvin, Milda Petrulevičienė, Irena Savickaja, Jurga Juodkazytė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: maliha.parvin@ftmc.lt

Photoelectrochemical (PEC) generation of reactive chlorine species (RCS) has been attracting increasing attention recently because it can be coupled with H₂ production in light-assisted splitting of aqueous chloride solutions. Tungsten (VI) oxide has been intensively studied as photoanode material due to its highly tunable composition, chemical stability, relatively narrow band gap of 2.6-2.7 eV, which allows absorbing of ~ 12% of solar light, and good charge carrier transport properties (hole diffusion length is ~150 nm). Photoelectrochemical (PEC) generation of reactive chlorine species (RCS) In this study, porous WO₃ films were formed on fluorine-doped tin oxide (FTO) substrates by low temperature chemical bath deposition (CBD) and tested for PEC chloride oxidation [1-3].

WO₃ photoanode was prepared using facile chemical bath deposition method in HCl acid medium. Cleaned FTO substrates were immersed into the solution and the deposition was allowed to proceed for two hours. The films were annealed at 400 °C. The same procedure was repeated four times to obtain layers with increasing thickness. The coatings were characterized using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM)(Fig.1). Photoelectrochemical behavior was investigated by cyclic voltammetry (CV) (Fig.2), electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and chronoamperometry (CA).

SEM analysis revealed that WO₃ coatings are composed of clusters of randomly oriented nanosheets. With first coating procedure, only about 420nm thickness of WO₃ nanostructured film was obtained (Fig. 1.a). After four chemical bath deposition cycles, several micrometres thick porous WO₃ layers were formed (Fig.1.b-d). Cyclic voltammograms (CV) of different layers of WO₃ photoanodes were measured in 0.5M H₂SO₄ and 0.5 M NaCl under light to evaluate the PEC performance of the film and production of RCS respectively. Photocurrent density of CBD-deposited WO₃ films was found to be increasing with the increasing layer thickness. Speciation of photoelectrochemically formed RCS in the solution was analyzed by iodometric titration. Almost 100% efficiency of PEC formation of RCS has been observed.

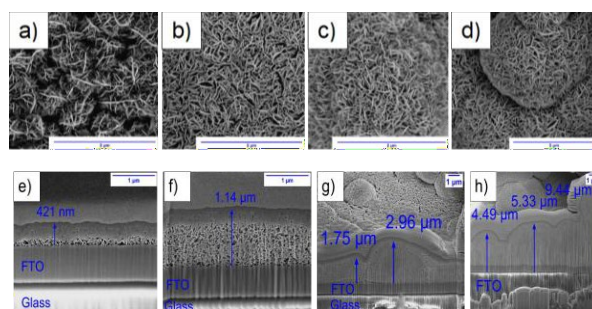


Fig. 1. Top-view (a – d) and crosssectional (e-h) SEM images of a), e) one-layer, b), f) two-layered, c), g) three-layered, d), h) four-layered

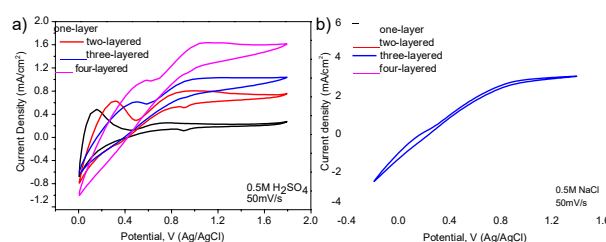


Fig. 2. Cyclic voltammograms of one, two, three and four-layered WO₃ coatings in a) 0.5 M H₂SO₄ and b) 0.5 M NaCl, potential scan rate 50 mV s⁻¹, illumination intensity ~ 100 mW cm⁻².

Acknowledgement:

This research was funded by the M-ERA.NET project “Multiscale computer modelling, synthesis and rational design of photo(electro)catalysts for efficient visible-light-driven seawater splitting” (CatWatSplit), Ref. Number: project8168.

References

1. X. Li, M. Kan, T. Wang, Z. Qin, T. Zhang, X. Qian, and Y. Zhao, Y. Appl. Catal. B Environ. **296** 120387 (2021).
2. A.G. Breuhaus-Alvarez, Q. Cheek, J. Cooper, S. Maldonado, and B.M. Bartlett, Phys. Chem. C. **125** 8543 (2021).
3. S. Iguchi, Y. Miseki and K. Sayama, Sustain. Energy Fuels. **2** 155(2018).

APPLICATION OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYPYRROLE FOR ELECTROCHEMICAL SENSOR DESIGN

Raimonda Boguzaite¹, Vilma Ratautaite^{1,2}, Urte Samukaite-Bubniene^{1,2}, Deivis Plausinaitis², Ernestas Brazys² Arunas Ramanavicius^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Functional Materials and Electronics, Laboratory of Nanotechnology, Sauletekio av. 3, Vilnius LT-10257, Lithuania, raimonda.boguzaite@ftmc.lt

²Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry, Naugarduko str. 24, Vilnius LT 03225, Lithuania

The principal of production of the molecularly imprinted polymers (MIP) is based on the artificial modelling of the specific sites for analyte binding on the MIP. The interest in the development of MIPs has grown during recent years [1].

MIPs are used in analytical systems dedicated for the determination of low and high molecular weight analytes [2, 3]. The main interaction types of monomer with the template molecule can be distinguished as: chelation, electrostatic, hydrophobic interactions, and the formation of hydrogen bonds [4].

Various polymers and polymerization methods are used for the formation of MIPs. Polypyrrole (Ppy) among many other conducting polymers like polyaniline (PANI), polythiophene, poly(ethylenedioxythiophene) (PEDOT), etc., is the most frequently used for the formation of MIP-based sensing structures due to possible electrodeposition from aqueous solutions [4]. The advantage of conducting polymers is that conducted polymers-based layers can be deposited using well controllable various electrochemical deposition methods. However, mostly potential cycling (cyclic voltammetry) or potential pulses [3, 5] are applied.

As an example of the MIP application the development of a uric acid sensor based on the Polypyrrole could be mentioned [6]. Uric acid is a small molecule with a molecular weight of 168 g/mol.

Also, the MIP-based sensor for the determination of SARS-CoV-2-S glycoprotein was designed. Platinum electrode was served as a working electrode for the deposition of Ppy layer imprinted with a protein. For this purpose, the SARS-CoV-2-S glycoprotein and pyrrole were dissolved in phosphate buffered saline (PBS) solution, pH 7.4. The polymeric layers were formed by a

sequence of 20 potential pulses of +950 mV for 1 s, between these pulses 0 V potential for 10 s was applied.

To conclude, the molecular imprinting of the conducting polymers is an attractive method for the development of the electrochemical sensors for the detection of molecules of various sizes.

References

1. A. Kidakova, R. Boroznjak, J. Reut, A. Öpik, M. Saarma, V. Syrisky, Molecularly imprinted polymer-based SAW sensor for label-free detection of cerebral dopamine neurotrophic factor protein, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 308 (2020) 127708.
2. Wang, Y.; Liu, X.; Lu, Z.; Liu, T.; Zhao, L.; Ding, F.; Zou, P.; Wang, X.; Zhao, Q.; Rao, H. Molecularly imprinted polydopamine modified with nickel nanoparticles wrapped with carbon: Fabrication, characterization and electrochemical detection of uric acid. *Microchim. Acta* 2019, 186, 414.
3. Ratautaite, V.; Topkaya, S.N.; Mikoliunaite, L.; Ozsoz, M.; Oztekin, Y.; Ramanaviciene, A.; Ramanavicius, A. Molecularly imprinted polypyrrole for DNA determination. *Electroanalysis* 2013, 25, 1169–1177.
4. Ramanavicius, S.; Ramanavicius, A. Conducting polymers in the design of biosensors and biofuel cells. *Polymers* 2021, 13, 49.
5. Lian, H.; Sun, Z.; Sun, X.; Liu, B. Graphene doped molecularly imprinted electrochemical sensor for uric acid. *Anal. Lett.* 2012, 45, 2717–2727.
6. Ratautaite, V.; Samukaite-Bubniene, U.; Plausinaitis, D.; Boguzaite, R.; Balciunas, D.; Ramanaviciene, A.; Neunert, G.; Ramanavicius, A. Molecular Imprinting Technology for Determination of Uric Acid. *Int. J. Mol. Sci.* 2021, 22, 5032.

LAIDUS VITAMINO B9 POLIMERO TAIKYMAS NUSTATYTI pH

Vytautas Žutautas, Rasa Pauliukaitė

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanoinžinerijos skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, Lietuva, el. p.: vytautas.zutautas@ftmc.lt

Dauguma cheminių procesų, įskaitant ir maisto pramonėje, priklauso nuo pH, todėl jo matavimas yra labai svarbus. Tačiau, sistemose, kur įprastiniai stiklo elektrodai negali būti naudojami pH matavimui, reikalingi kiti sprendimai. Vienas iš patobulinimų vandenilio jonų nustatymui yra elektrodai modifikuoti pH jautriais laidžiais polimerais [1].

Laidūs polimerai priklauso polienų ar poliaromatinių tokių kaip poliacetileno, polianilino, polipirolo, politiofeno klasėms. Kai kurie turi unikalius laidumo mechanizmus ar jais modifikuoti elektrodai yra stabilūs ore [2]. Šie polimerai dažnai naudojami analizinėse sistemose kuriant cheminius jutiklius. Laidaus polimero pagrindu pagaminti jutikliai pranašesni už kitus jutiklius tuo, kad šie polimerai gali sustiprinti atsaką ir dažnai sumažina triukšmo lygį [3]. Anksčiau inertiniai polimerai buvo naudojami tik mechanškai sustiprinti membranas, bet dėl elektrinio laidumo ir krūvio transportavimo savybių, laidūs polimerai papildomai pagerina jutiklių jautrį.

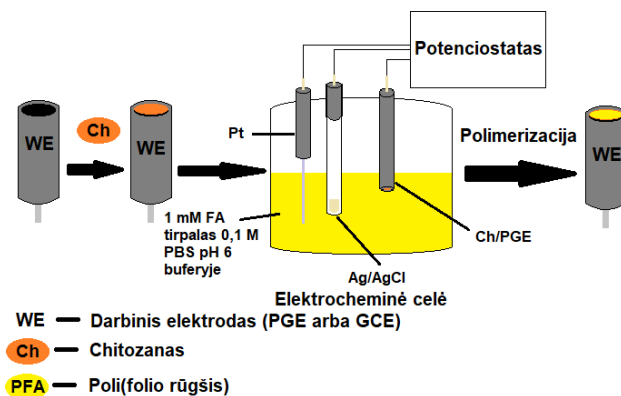
Naudojantis elektrochemine sinteze, laidūs polimerai kaip plėvelė gali būti tiesiogiai nusodinami ant elektrodo paviršiaus po to gali būti imobilizuojamos biomolekulės. Tai leidžia kontroliuoti imobilizuotų biomolekulių erdvinį išsidėstymą, plėvelės storį ir stebėti jų aktyvumą [3]. Laidūs polimerai dažnu atveju pagreitina elektronų pernašą taip pat jų nusodinimo vietas ant elektrodo gali būti kontroliuojamos. Šios unikalios laidžių polimerų savybės panaudojamos biojutiklių kūrimo [3].

Šio darbo tikslas sukurti jutiklį pH stebėjimui, kurį būtų galima naudoti maisto pramonėje plovimų sistemose. Pirmiausiai atlikti tyrimai ant pirolitinio grafito elektrodo (PGE) elektrochemiškai polimerizuojant folio rūgšties (FA), riboflavino (RF), lizino (Lys) ir chitozono (Ch) polimerus bei jų kopolimerus. Gautų jutiklių stabilumas tirtas 7 ir 8 pH buferiniuose tirpaluose, naudojant ciklinę voltamperometriją (CV), chronoamperometriją, potenciometriją.

PGE arba stikliškosios anglies elektrodas (GCE) padengiamas lašinant 1 % chitozono ištirpinto 1 % acto rūgštyje [4] tirpalu ir paliekamas ore

išdžiūti 1 dieną. Paruoštas Ch/PGE arba Ch/GCE panardinamas į 1 mM FA 0,1 M 6 pH PBS tirpalą. Naudojant CV elektropolimerizaciją Ch/PGE arba Ch/GCE padengtas PFA, gautas jutiklis ore džiovinamas 1 dieną [5].

Tokiu būdu PGE buvo padengtas RF, RF/Lys, FA, FA/Lys, FA/Ch polimerais. Iš gautų jutiklių, RF/Lys ir FA/Lys polimerizacijos metu nesudarė pH jautrios plėvelės. RF ir FA polimerais padengtas PGE (PRF/PGE ir PFA/PGE) sudarė pH jautrius sluoksnius, tačiau jie buvo nestabilūs ir jutiklių kūrimui netinkami. Pastebėta, kad padengus PGE Ch, o ant gauto Ch/PGE polimerizuojant FA gautas PFA/Ch/PGE (1 pav.) yra jautrus pH ir išlaiko stabilumą apie 30 dienų. Tolimesni tyrimai atliekami su PFA/Ch/PGE ir PFA/Ch/GCE.



1 pav. PFA/Ch/PGE arba PFA/Ch/GCE paruošimas.

Padėka. Straipsnyje gauti rezultatai vykdant LMT projektą Nr. 01.2.2-LMT-K-718-03-0038.

Literatūra

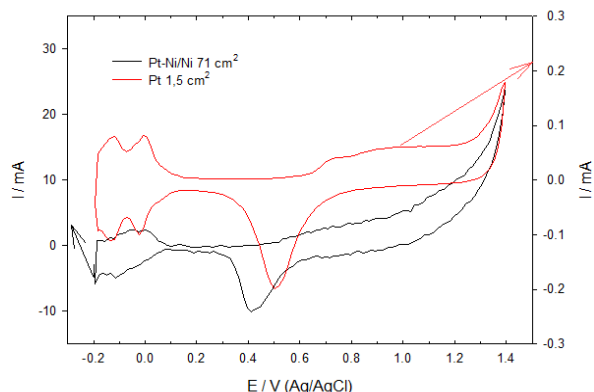
1. S. Zaman, M.H. Asif, A. Zainelabdin, G. Amin, O. Nur, M.J. Willander, J. Electroanal. Chem. **662**, 421 (2011).
2. D. Kumar, R.C. Sharma, Eur. Polym. J. **34**, 1053 (1998).
3. M.A. Rahman, P. Kumar, D.S. Park, Y.B. Shim, Sensors. **8**, 118 (2008).
4. F. Zouaoui, S. Bourouina-Bacha, M. Bourouina, N. Jaffrezic-Renault, N. Zine, A. Errachid, Tr. Anal. Chem. **130**, 115982 (2020).
5. R. Celiešiūtė, T. Venckus, Š. Vaitekonis, R. Pauliukaitė, Electrochimica Acta **138**, 62 (2014).

SKRUZDŽIŲ RŪGŠTIES OKSIDACIJOS TYRIMAS ANT Pt-Ni/Ni KIETŲJŲ PUTŲ KATALIZATORIŲ

Antanas Nacys, D. Šimkūnaitė, D. Upskuvienė, A. Balčiūnaitė, A. Zabelaitė,
V. Jasulaitienė, L. Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė,
E. Norkus

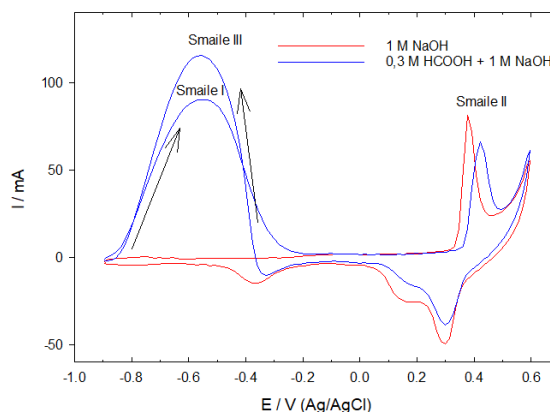
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Katalizės skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: antanas.nacys@ftmc.lt

Klimato kaitos iššūkiai skatina ne tik vėjo, saulės energetikos technologijų tobulinimą, tačiau ir kitų alternatyvių energijos gavimo šaltinių. Kuro elementai yra alternatyvus energijos šaltinis, kuris cheminę energiją verčia į elektros energiją. Kuro elementų veikimas yra grįstas kuro oksidacija ant anodo ir deguonies redukcija ant katodo. Todėl, žinoma, kad yra skiriamas didelis dėmesys vystomų kuro elementų anodo ir katodo medžiagų kūrimui ir tobulinimui. Šios medžiagos turi pasižymėti kataliziniu aktyvumu naudojamo kuro: vandenilio, metanolio, etanolio, hidrazino, natrio borohidrido ir kt. oksidacijos ir deguonies redukcijos reakcijoms. Tik tobulinant ir kuriant naujas medžiagas galima tikėtis proveržio esamų ir naujų kuro elementų našume ir taikyme praktikoje. Šiame tyrime buvo atliekamas Pt-Ni/Ni kietųjų putų katalizatorių formavimas, naudojant cheminį ir elektrocheminį medžiagų nusodinimą ant Ni kietųjų putų pagrindo. Pirmiausia Ni kietosios putos buvo padengiamos papildomu Ni sluoksniu, panaudojant cheminį nikeliavimą, po kurio sekdamo Pt sluoksnio nusodinimas elektrocheminiu būdu. Pt, nusodintos ant Ni/Ni kietųjų putų, elektrochemiškai aktyvus paviršiaus plotas buvo nustatomas iš ciklinių voltampero-gramų, užrašytų 0,5 M H₂SO₄ tirpale (1 pav), pagal vandenilio monosluoksnio adsorbciją ant elektrodo. Vandenilio monosluoksnio susiformavimo (H_{ad}) ant Pt elektrodo krūvis yra 220 $\mu C\ cm^{-2}$ [1]. Nustatyta, kad Pt-Ni/Ni kietųjų putų katalizatorius pasižymi dideliu paviršiaus plotu, kuris siekia 71 cm^2 .



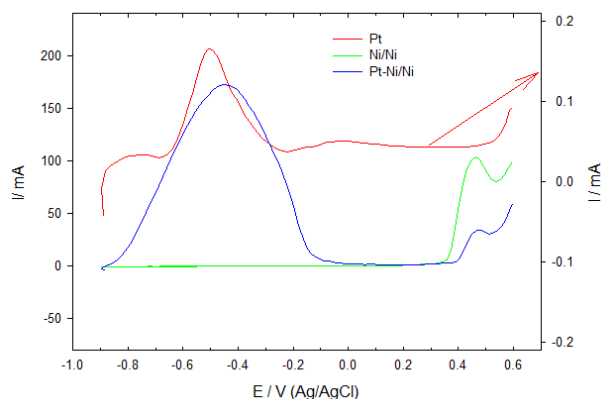
1 pav. Pt (raudona) ir Pt-Ni/Ni (juoda) kietųjų putų CV užrašytos 0,5 M H₂SO₄ tirpale, kai sklaidžiamo elektrodo potencialo greitis 50 mV s⁻¹.

Suformuotų Pt-Ni/Ni kietųjų putų katalizatorių katalizinis aktyvumas buvo tyrinėjamas skruzdžių rūgšties oksidacijai šarminėje terpėje, taikant ciklinę voltamperometriją (2 pav).



2 pav. Pt-Ni/Ni kietųjų putų CV užrašytos 1 M NaOH (raudona) ir 0,3 M HCOOH + 1 M NaOH (mėlyna) tirpaluose, kai sklaidžiamo elektrodo potencialo greitis 50 mV s⁻¹.

Nusodintos Pt ir Ni dalelės ant Ni kietųjų putų pasižymi tarpusavio sinergija ir rodo didelį katalizinį aktyvumą skruzdžių rūgšties oksidacijai, nei grynos platinos ar Ni/Ni kietųjų putų katalizatoriai (3 pav).



3 pav. Pt (raudona), Ni/Ni kietųjų putų (žalia) ir Pt-Ni/Ni kietųjų putų (mėlyna) CV užrašytos 0,5 M HCOOH + 1 M NaOH tirpale, kai sklaidžiamo elektrodo potencialo greitis 50 mV s⁻¹.

Literatūra

1. H. Angerstein-Kozłowska, B. E. Conway, W. B. A. Sharp, *J. Electroanal. Chem.*, **43**, (1973), p. 9 - 36.

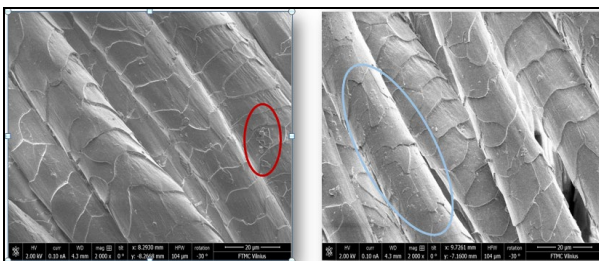
PLAZMINIO MODIFIKAVIMO ĮTAKA VILNĄ DAŽANT PEDOT:PSS POLIMERU

Julija Petkevičiūtė, Audronė Sankauskaitė

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Tekstilės technologijų skyrius
Demokratų g. 56, LT-48485 Kaunas, el. p.: julija.petkeviciute@ftmc.lt

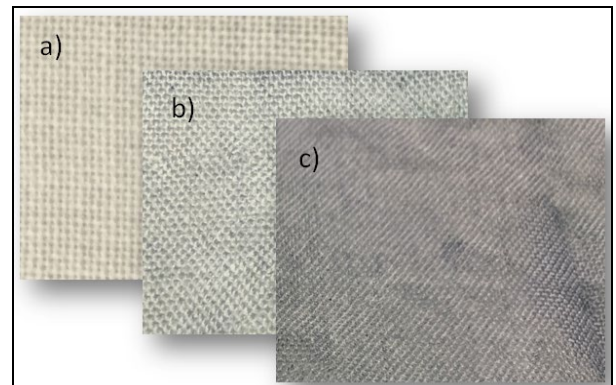
Kuriant elektrai laidžią tekstilę svarbu nepabloginti įprastinių savybių - dėvėjimo komforto, laidumo orui, lankstumo, minkštumo, atsparumo daugkartiniam skalbimui ir mechaniniam poveikiui. Elektrinis laidumas tekstilės medžiagoms gali būti suteikiamas taikant gamtinius ir cheminius pluoštus su įvairios prigimties laidžiais priedais (metalais, anglimi, kt.). Prigimtiniai elektrai laidūs polimerai (*PANI*, *PPy*, *PEDOT:PSS*) naudojami formuojant laidžias dangas ar elektrai laidžius kontūrus, įvedami į tekstilę tradiciniais metodais ir tvirtinami rišikliai ar tiesiogiai reaguoja su pluošto funkcinėmis grupėmis. Suformuota laidžių polimero danga neužtikrina pakankamai tvirto sukibimo tarp tekstilės ir laidaus polimerinio sluoksnio. Dėl prastos adhezijos tarp tekstilės medžiagos ir polimero, danga dėvėjimo metu arba po skalbimo atsiskiria (delaminuojasi). Vienas iš metodų adhezijai pagerinti yra medžiagos paviršiaus valymas nepolimerinių dujų žemo slėgio plazma. Plazminio apdorojimo metu vyksta tekstilės medžiagos paviršiaus funkinių grupių ir struktūros pakeitimas (modifikacija), todėl pagerėja pluošto hidrofilišės savybės bei sukibimas su formuojamos dangos polimeru.

Tyrimams buvo naudotas 100% vilnos audinys, kurio paviršius buvo modifikuotas N_2 dujų žemo slėgio plazmos įrenginyje *Junior Plasma System 004/123*. SEM vaizdų analizė parodė pluošto paviršiuje atsiradusius pasikeitimus - įtrūkimus, griovelius, įdubas (1 pav.).



1 pav. Vilnos pluošto SEM vaizdai: prieš (a) ir po (b) apdorojimo azoto dujų plazma. Didinimas 2000 x.

Galima teigti, kad tai lėmė vilnos pluošto hidrofobinių savybių pasikeitimą į hidrofilišes. Vandenių tirpalų atstūmimo tyrimas taip pat parodė, kad po plazminio apdorojimo medžiagos vilgumas žymiai pagerėjo. Taip pat buvo atlikti plazma modifikuoto vilnos audinio laidumo suteikimo tyrimai, dažant PEDOT:PSS polimero komerciniu produktu Clevios FET (Hereaus) 90° C 30 min. PEDOT:PSS gali būti priskiriamas prie „laidžių rūgštinių dažiklių“ [1]. Vilnos pluošto katijonaktyvios amino (NH_3^+) grupės reaguoja su laidaus PEDOT:PSS polimero PSS^- jonometro anijonaktyviomis sulfo ($-SO_3^-$) grupėmis joniniu ryšiu. PEDOT:PSS dažytas vilnos audinys nusidažė skirtingo intensyvumo mėlyna spalva, kurios pokytis ΔE buvo įvertintas spektrofotometru (pav. 2).



2 pav. Nedažytas (pradinis) (a), nemodifikuotas (b) ir plazma modifikuotas (c) bei Clevios FET dažyti bandiniai.

Taip pat buvo atlikti vilnos dažymo PEDOT:PSS skirtingo pH tirpaluose (pH2, pH3 ir pH4) tyrimai, įvertinti audinio spalvos pasikeitimas ir elektrostatinės savybės.

Literatūra

1. Anja Lund, Natascha M. van der Velden, Nils-Krister Persson, Mahiar M. Hamed, Christian Müller. Electrically conducting fibres for e-textiles: An open playground for conjugated polymers and carbon nanomaterials. *Materials Science & Engineering R* 126 (2018) 1–29.

DEVELOPMENT OF NEW COMPUTATIONAL METHODS TO DETERMINE SUBLIMATION ENTHALPIES USING CRYSTALLOGRAPHIC DATA OF SMALL ORGANIC MOLECULES

Jokūbas Preikša

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Molecular Compound Physics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: jokubas.preiksa@ftmc.lt

Goals:

1. Assemble a database which includes crystallographic structures of organic compounds and corresponding sublimation enthalpies using Crystallography Open Database (COD) and compendium of phase transition measurements of organic compounds [1, 2].
2. Create an algorithm for generating computation-ready crystal structures.
3. Develop and optimize two new computational methods: a) Inhouse atom and atom-pair based empirical method (AAPE). b) Fusion of semi-empirical FMO-DFTB [3] and fragmentation based 2D-QSPR.
4. Check the predictive power of both methods and plan later improvements.

Methods:

For this study a database of 1048 compounds with their crystallographic structures and corresponding enthalpies of sublimation was created. Of which around 700 structures are chemically correct and can be used for development of new computational methods.

AAPE method is from the ground built method in Department of Biothermodynamics and Drug Design. It consists of empirical parameters for atom types, atom-pairs and highly parallelizable computational algorithms designed to predict ligand-receptor interaction energies.

FMO-DFTB+2D-QSPR is inhouse novel computational method which utilizes semi-empirical FMO-DFTB and fragmentation based 2D-QSPR.

Results and conclusions:

To determine theoretical enthalpies of sublimation with AAPE method the total of 1048 structures were analysed. Since this approach is still in its early optimization stages, the correlation with experimental data yielded less than satisfactory coefficient of determination when forcing intercept to zero ($R^2 = 0.83$ (Fig.1, left)). Also, this method is not sensitive to chemical incorrections. Since FMO-DFTB only accepts chemically correct structures the total of 500 crystal structures were analysed. Of which 70% was directed to train 2D-QSPR. After training, the coefficient of determination was achieved $R^2 = 0.99$ for the test set (Fig. 1, right).

Further analysis of crystal structures are still needed in order to collect only chemically correct crystal models.

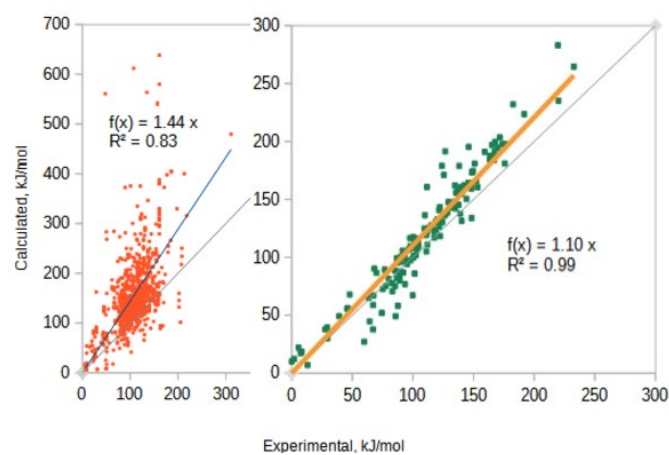


Fig.1. Correlation of experimental sublimation enthalpies and AAPE determined enthalpies (on the left); Correlation of experimental sublimation enthalpies and FMO-DFTB + 2D-QSPR determined enthalpies (on the right).

Optimization procedures is now at the center point of attention to improve AAPE method. FMO-DFTB + 2D-QSPR is performing more than satisfactory. However, some further analysis still can be done to minimize systematic error. Both methods could greatly benefit from additional data of crystallographic pressure. Since only a small part of assembly has it, some additional modeling of crystal pressure determination is being planned.

References

1. Vaitkus, A, (2021). Validation of the Crystallography Open Database using the Crystallographic Information Framework. JAC, 54(2), 661-672. doi: 10.1107/S1600576720016532
2. Acree, WILLIAM E. "Phase Transition Enthalpy Measurements of Organic and Organometallic Compounds and Ionic Liquids. Sublimation, Vaporization, and Fusion Enthalpies from 1880 to 2015. Part 2. C11-C192." JPC; 46 (2017): 013104.
3. Nishimoto Y Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method. JTC. 2014; 10(11):4801-12. doi: 10.1021/ct500489d. Epub 2014 Oct 17. PMID: 26584367.

ADSORBUOTŲ BIOMOLEKULIŲ ELEKTROCHEMINĖJE FAZIŲ RIBOJE CHARAKTERIZAVIMAS SHINERS METODU

Agnė Zdaniauskienė¹, Martynas Talaikis², Tatjana Charkova¹,
Rita Sadzevičienė¹, Linas Labanauskas¹, Gediminas Niaura¹

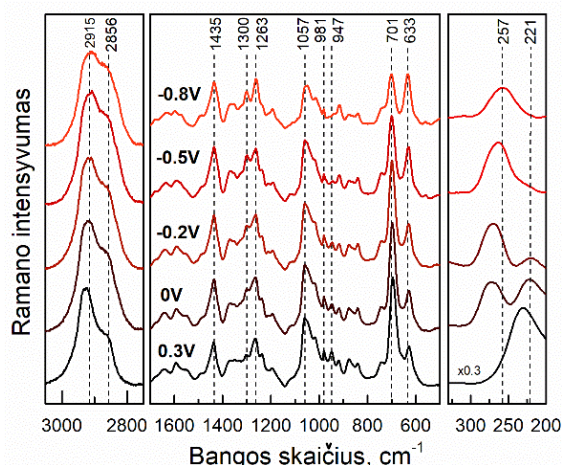
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius,
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: agne.zdaniauskiene@ftmc.lt

²Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas, Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos skyrius,
Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius

Histidinas – viena iš dvidešimties labiausiai paplitusių aminorūgščių, dalyvaujančių daugelyje skirtingų molekulinų sąveikų. Histidino funkcinė grupė – imidazolo žiedas koordinuoja metalų jonus taip formuojant biomolekulių aktyvius centrus. Taip pat imidazolo žiedo pKa yra arti fiziologinio pH, todėl žiedas gali būti protonuotos ar neutralios formos, kas reiškia, kad histidinas yra itin reikšmingas ligandas baltymų ir peptidų struktūroje [1].

Savitvarkiai monosluoksniai (ang. SAM), suformuoti ant metalų paviršių iš tiolių, plačiai naudojami spręsti biokatalizės, biojutiklių vystymo problemas tiriant funkcinių grupių sąveikas su adsorbatais ar elektronų pernašą [2]. Monosluoksniai ant metalų suteikia galimybę kurti stabilias molekulinės sistemas, tinkamas molekulių struktūros pokyčių stebėjimui veikiant išoriniam elektriniam laukui. Vis dėlto, norint suprasti procesus, vykstančius elektrocheminėje fazių riboje molekuliname lygmenyje, reikalingas neardantis, sistemos neperturbuojantis, bet labai jautrus spektroskopinis tyrimo metodas. Vienas tokių metodų – nanodalelių, padengtų apsauginiu sluoksniu, sustiprinta Ramano spektroskopija (ang. SHINERS). Šiuo atveju nanodalelės branduolys iš Au, Ag ar Cu atlieka Ramano spektrų stiprintuvo vaidmenį, o SiO₂ sluoksnis apsaugo nanodaleles nuo tarpusavio sąveikos ir tiesioginės sąveikos su tiriamuoju paviršiumi [3]. Eksperimento metu tirtas naujas SAM, suformuotas iš N-(2-(1H-imidazol-4-yl)ethyl)-6-mercaptohexanamido (IMHA), ant lygaus Au paviršiaus *in-situ* vandeninėje terpėje keičiant elektrodo potencialą SHINERS metodu. IMHA angliavandenilinėje grandinėje yra įterpta amido grupė, kuri žymiai padidina monosluoksnio stabilumą dėl vandenilinių ryšių susidarymo tarp gretimų grandinių [4]. Tyrimui susintetintos sferinės formos, 85±5 nm dydžio sidabro nanodalelės su išoriniu silicio dioksido sluoksniu (~ 3 nm) [5].

Šio darbo metu pirmą kartą užregistruoti IMHA SHINERS spektrai esant skirtingoms elektrodo potencialo vertėms (1 pav.). Remiantis gautais duomenimis nustatyti potencialo sąlygoti konformaciniai IMHA monosluoksnio struktūros pokyčiai.



1 pav. IMHA monosluoksnio, adsorbuoto ant lygaus Au elektrodo SHINERS spektrai, esant skirtingiems elektrodo potencialams. Spektrai registruoti tirpale: 0.01 M fosfatinis buferis (pH 7) + 0.01 M Na₂SO₄.

Pastebėta, kad *trans* konformerą atspindinčios $\nu(\text{C-S})\text{T}$ juostos (697 cm⁻¹, 0 V) integrinis intensyvumas sumažėja 2.3 karto, kai elektrodo potencialas tampa -0.8 V. Priešinga tendencija matoma su $\nu(\text{C-S})\text{G}$ (630 cm⁻¹, 0 V) juosta. Taigi elektrodo potencialui tampant vis labiau neigiamam angliavandenilinės grandinės konformacija iš vyraujančios *trans* pasikeičia į *goš*.

Literatūra

1. S. M. Liao, Q. S. Du, J. Z. Meng, Z. W. Pang, R. B. Huang, Chem. Cent. J. **7**, 1 (2013).
2. J.C. Love, L.A. Estroff, J.K. Kriebel, R.G. Nuzzo, G. M. Whitesides, Chem. Rev. **105**, 4 (2005).
3. J.F. Li, Y.F. Huang, Y. Ding, Z.L. Yang, S.B. Li, X.S. Zhou, F. R. Fan, W. Zhang, Z. Y. Zhou, D. Y. Wu, B. Ren, Z. L. Wang, and Z. Q. Tian, Nature **464**, 7287 (2010).
4. Z. Kuodis, I. Matulaitienė, M. Špandireva, L. Labanauskas, S. Stončius, O. Eicher-Lorka, R. Sadzevičienė and G. Niaura, Molecules **25**, 23 (2020).
5. E. Daublytė, A. Zdaniauskienė, M. Talaikis, A. Drabavičius, T. Charkova, New J. Chem. **45**, 24 (2021).

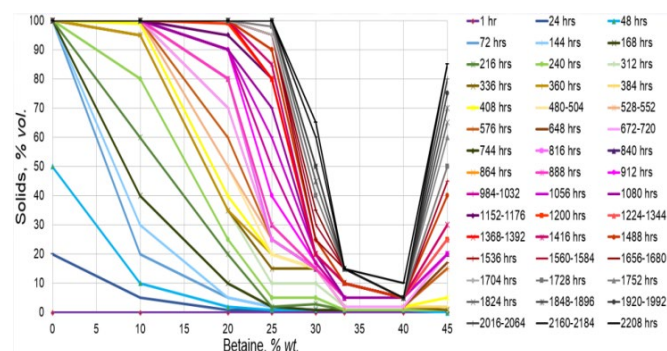
KIETOS FAZĖS FORMAVIMAS BETAINO IR KSILITOLIO NATŪRALIUOSE EUTEKTINIUOSE TIRPIKLIUOSE

Audrė Kalinauskaitė, Dalia Bražinskienė, Svajus Asadauskas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, el. p.: audre.kalinauskaite@ftmc.lt

Eutektiniai tirpikliai (angl. *Deep Eutectic Solvents*) yra organinių junginių mišiniai, kurių lydymosi temperatūra yra žemesnė nei juos sudarančių atskirų komponentų. Išlydžius šie mišiniai išlieka skystos būsenos kambario temperatūroje. Vykstant sąveikai tarp vandenilinio ryšio akceptorius ir donoro keičiasi krūvio vieta molekulėse, o tai lemia žemesnę lydymosi temperatūrą [1]. Natūralieji eutektiniai tirpikliai (angl. *Natural Deep Eutectic Solvents, NADES*) sudaryti iš natūralių cheminių junginių – organinių rūgščių, aminorūgščių, cukrų, polioliolių cukrų ir kt. Šie junginiai kainuoja mažiau nei joninių skysčių (angl. *Ionic liquids*) sudedamosios dalys, yra biologiškai skaidūs ir netoksiški, patvarūs, o jų paruošimo metodai gana paprasti [2]. NADES pasižymi geromis fizinėmis – cheminėmis savybėmis kaip tirpikliai: išlieka skysti žemesnėje nei 0°C temperatūroje, nežymus garavimas, koreguojamas klampumas, platus poliškumo diapazonas bei geras kai kurių cheminių junginių tirpinimas [3, 4]. Dėl šių savybių NADES gali būti taikomi maisto, farmacijos, kosmetikos, agrochemijos pramonėse [3]. Šis darbas nagrinėja ksilitolio ir betaino kiekių santykio mišinyje įtaką kietos fazės susidarymui eutektiniuose tirpikliuose. Ksilitolis kambario temperatūroje yra kietas kristalinis medžiaga, tačiau gali būti kaitinama ir vėliau peršaldoma, kad susidarytų labai klampus skystis, kurį laiką išliekantis skystos būsenos esant ir labai žemai temperatūrai (-20°C ir žemiau). Betainas – ketvirtinio amonio cationas, biologiškai skaidus, netoksiškas ir gali būti išgaunamas iš natūralių šaltinių, pvz. cukrinių runkelių (lot. *Beta vulgaris subsp. Vulgaris*) [5]. Įvairių santykių mišiniai buvo kaitinami iki visiškai išsilydimo arba iki max. 160°C. Tačiau mišiniai, kuriuose betaino buvo 50% arba daugiau, pilnai neišsilydė. Tuo tarpu visiškai išsilydę mėginiai buvo perkelti į kambario temperatūrą 1 val. Kadangi mišinių kristalizavimasis vyko lėtai, pilnai išsilydę ir skaidrūs bandiniai buvo šaldomi šaldiklyje -20°C temperatūroje 4 val. Drumstimosi ar kristalizavimosi per šį laikotarpį nebuvo matyti, todėl galimai įvyko mišinių peršaldymas (angl. *supercooling/undercooling*). Po šaldymo mėginiai buvo perkelti į kamb. temp. ir periodiškai stebimi dėl kietos fazės susidarymo. Po truputį kietos fazės dariniai pradėjo formuotis visų mišinių paviršiuose. Pabrėžtina, jog nebuvo vertinama, kiek drėgno oro galėjo pakliūti į indus su NADES. Apytikslis kietos fazės tūris (pradedant nuo 5% viso mišinio tūrio) buvo nustatomas vizualiai registruojant, per kokią laiką trukmę jis susidarė (1 pav.). Dėl terminės dekompozicijos ir peršaldymo efektų,

lydymosi temperatūra nebuvo matuojama, o buvo koncentruojamasi į kristalizavimosi tendencijas.



1 pav. Betaino kiekio įtaka kietos fazės formavimuisi NADES mišiniuose su aplinkos drėgmės poveikiu.

Skirtingi betaino ir ksilitolio kiekių santykiai NADES darė žymią įtaką lydymosi greičiui kaitinimo metu ir kristalizacijos greičiui po peršaldymo. Kadangi mišiniai su 50% ir daugiau betaino visiškai neišsilydė iki 160°C, šie mišiniai toliau nebuvo stebimi. Dėl peršaldymo efekto, grynas ksilitolis išliko visiškai skystas tik kelias val., po to pradėjo formuotis kietos dalelės mišinyje ir galiausiai visiškai susikristalizavo per 72 valandas. Bandiniai su 10-50% betaino išliko skystos būsenos ilgiau. Pavyzdžiui, esant 40:60 (w/w) betaino ir ksilitolio santykiui, mišinys išliko skystos būsenos žymiai ilgiau nei mišiniai su mažesniu betaino kiekiu. Tačiau po ilgesnio laikotarpio šiame mėginyje taip pat buvo aptikta kietos fazės darinių – apie 5% susidarė per 744 valandas. Nepaisant to, jog žymią įtaką kietos fazės susidarymo tendencijoms galėjo padaryti į mišinių indelius patekusi drėgmė peršaldymo metu, gauti rezultatai rodo, jog būtina atidžiai kontroliuoti abiejų komponentų kiekius ir grynumą, siekiant kuo ilgiau išvengti nuosėdų formavimosi ir nestabilumo. Betaino ir ksilitolio mišiniai yra dažnai naudojami kaip natūralūs eutektiniai tirpikliai, todėl jų stabilumas ir ruošimo metodai gali būti svarbūs daugeliui inovatyvių technologijų.

Literatūra

1. A.P. Abbott, G. Capper, D.L. Davies, H.L. Munro, R.K. Rasheeda, and V. Tambyrajaha, *ChemComm* **19**, 2010-2011 (2001).
2. Y. Dai, R. Verpoorte, Y.H. Choi, *Food Chem.* **159**, 116-121 (2014).
3. Y. Dai, J. van Spronsen, G.-J. Witkamp, R. Verpoorte, Y.H. Choi, *Anal. Chim. Acta* **766**, 61-68 (2013).
4. M. Francisco, A. van den Bruinhorst, M.C. Kroon, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (11), 3074-3085 (2013).
5. M. Duquesne, E. Palomo Del Barrio, A. Godin, *Appl. Sci.* **9** (2), 267 (2019).

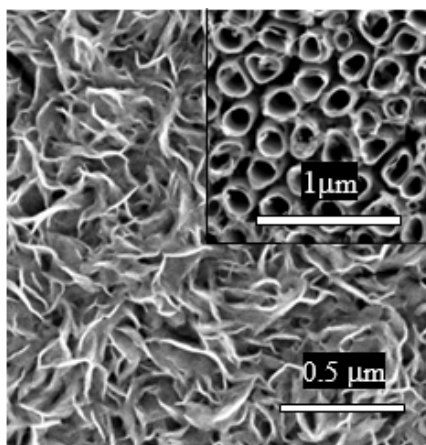
CISTEINU HIBRIDIZUOTŲ MOLIBDENO DISULFIDO DANGŲ SINTEZĖ IR ELEKTROKATALIZINIO AKTYVUMO TYRIMAS

Paulius Gaigalas, Arūnas Jagminas, Vaclovas Klimas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Elektrocheminės medžiagotyros skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: paulius.gaigalas@ftmc.lt

Atsinaujinantys energijos šaltiniai pastaruoju metu yra plačiai nagrinėjama tema mokslo visuomenėje, o vis didėjanti energijos paklausa skatina ieškoti efektyvių būdų energiją išgauti nenaudojant aplinką teršiančio iškastinio kuro. Vandeniio dujos (H_2) yra laikomos vienu ekologiškiausiu energijos šaltiniu, o šias dujas galima gauti panaudojus tauriuosius metalus kaip elektrokatalizatorius vandens skaldymo reakcijoje [1]. Tačiau būtina atrasti elektrokatalizatorius be tauriųjų metalų, kadangi pastarųjų kaina apsunkina vandens skaldymo reakcijos metodą taikyti pramoniniu mastu, o viena iš galimų alternatyvų tauriųjų metalų elektrokatalizatoriams laikomas molibdeno disulfidas [2].

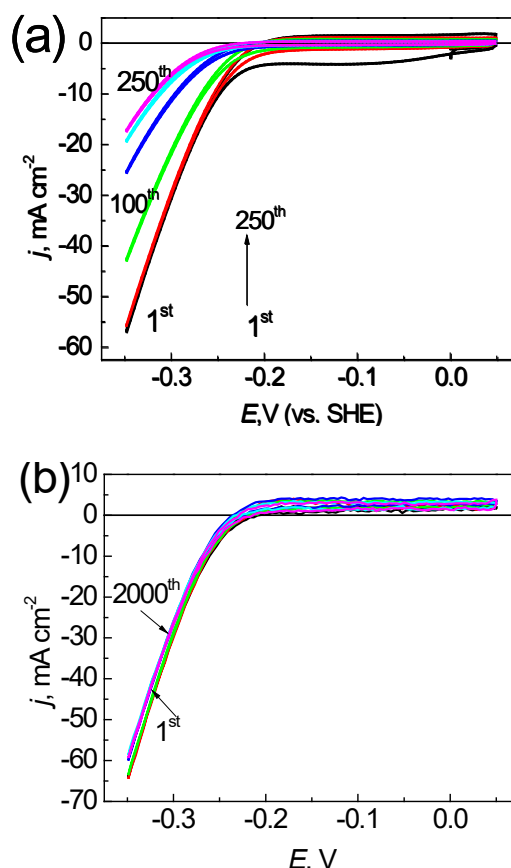
Šiame darbe, nanolapelinės struktūros molibdeno disulfido dangos (1 pav.) buvo susintetintos ant anoduoto titano padėklų hidroterminės sintezės būdu, kuomet sintezės tirpalas (amonio heptamolibdatas, tiourėja ir L-cisteinas) supilamas į tefloninę celę, kuri patalpinama į nerūdijančio plieno autoklavą ir kaitinama nuo 5 iki 10 valandų ties $220\text{ }^{\circ}\text{C}$ temperatūra.



1 pav. Hidroterminės sintezės būdu suformuotos MoS_2 dangos ant anoduoto Ti padėklų (intarpas) SEM nuotrauka.

Suformuotų elektrodų elektrokatalizinės savybės tirinėtos naudojant ciklinės voltamperometrijos metodą. Tyrimai atlikti naudojant trijų elektrodų elektrocheminę celę. Gautos ciklinės voltamperogramos (2 pav.) parodo, jog sintetinant MoS_2 su cisteinu, suformuoti

elektrodai pasižymi geresnėmis elektrokatalizinėmis savybėmis, lyginant su MoS_2 be cisteino. MoS_2 /cisteino elektrodai pasižymi didesniu srovės tankiu ties $-0,35\text{V}$ potencialu bei itin pagerėjusiu stabilumu, kadangi srovės tankio vertės po 2000 ciklų sumažėja tik apie 8%, tuo tarpu elektrodo be cisteino srovės tankis sumažėja apie 70% praskleidus tik 250 ciklų.



2 pav. MoS_2 dangos be cisteino (a) ir su cisteinu (b) ciklinės voltamperogramos.

Literatūra

1. M.G. Walter, E.L. Warren, J.R. McKone, S.W. Boettcher, Q. Mi, E.A. Santori, N.S. Lewis, Solar water splitting cells, *Chem. Rev.* 110, 6446–6473 (2010)
2. W. Sheng *et al.*, Correlating hydrogen oxidation and evolution activity on platinum at different pH with measured hydrogen binding energy, *Nat. Commun.*, 6, 5848 (2015)

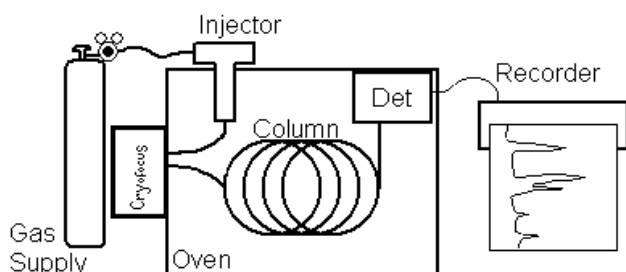
ANALIČIŲ FOKUSAVIMO IR KONCENTRAVIMO ANT DUJŲ CHROMATOGRAFINĖS KOLONĖLĖS GALIMYBIŲ TYRIMAI

Audrius Sadaunykas, Audrius Zolumskis, Evaldas Naujalis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Metrologijos skyrius
Lukiškių g. 9, LT-01108 Vilnius, el. p.: audrius.sadaunykas@ftmc.lt

Darbo tikslas buvo suprojektuoti, sukonstruoti ir išbandyti mėginių fokusavimo ir koncentravimo prietaiso prototipą skirtą dujų chromatografijai (GC). Dujų chromatografija yra vienas populiariausių analizės metodų pasaulyje, plačiai naudojamas įvairių organinių junginių analizei. Daugelis tyrėjų kasdien naudoja GC metodą; tačiau jie susiduria su analičių atskyrimo, sistemos jautrio ar sudėtingo mėginio paruošimo problemomis. Buvo daug bandymų patobulinti GC metodą ir vienas iš jų buvo sukurti skirtingus modulius [1, 2], kurie išspręstų vieną ar kelias iš šių problemų. Mūsų laboratorijos sukonstruotas prietaisas sukurtas remiantis kriofokusavimo principais [3]. Pritaikydami mūsų sukurtą prototipą, siekėme pagerinti GC sistemos jautrį ir skiriamąją gebą.

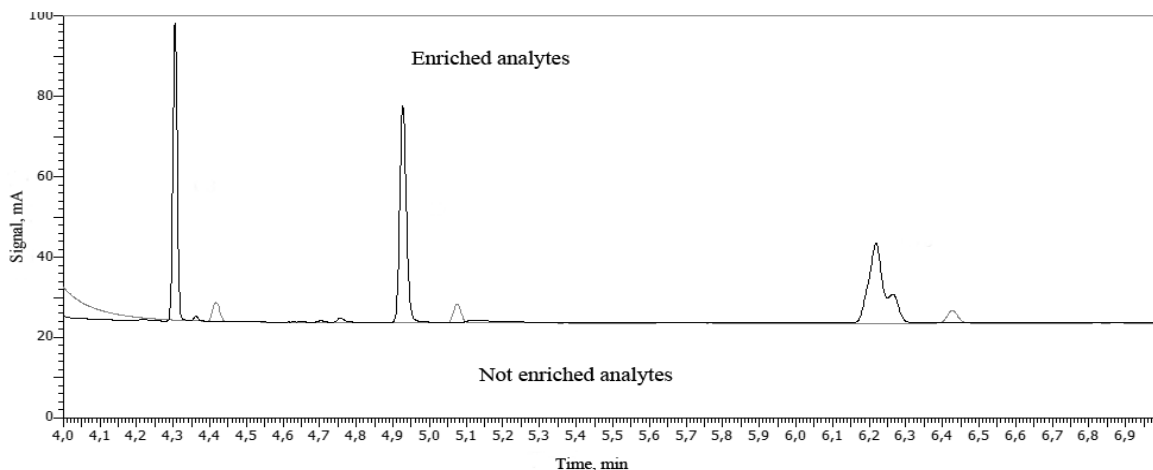
Įprastinėje dujų chromatografijoje analičių mišinys įpurškiamas į dujų chromatografijos sistemą, po to jos atskiriamos GC kolonėlėje ir išmatuojamos naudojant detektorius. Naudojant mūsų prototipą, po injekcijos analitės buvo trumpam sustabdytos naudojant skystą azotą, o staiga pakaitinus toliau keliavo išilgai kolonėlės iki detektoriaus. Šis procesas susiaurino analičių signalus iki 37% ir iki dviejų kartų padidino jų intensyvumą. Taip pat, šis prietaisas buvo išbandytas sukoncentruoti analites ant kolonėlės. Koncentravimas buvo atliekamas vienos injekcijos į chromatografą analites sulaikant kriofokusavimo prototipe ir kartojant injekcijas. Po norimo injekcijų skaičiaus kriofokusavimo prototipas staigiai įkaitinamas ir visos sukaupotos analitės kartu pajuda kolonėle link detektoriaus. Užfiksuotas signalo padidėjimas koreliuoja su injekcijų skaičiumi. Mūsų bandymų metu po 20 injekcijų iš eilės pavyko išgauti iki 20 kartų didesnį signalą.



1 pav. Dujų chromatografinės sistemos su kriofokusavimo modulių schema.

Literatūra

1. R. B. Wilson, et al. Talanta, 97, 9–15,
2. Chin, et al. Analytical Chemistry, 83(17), 6485–6492.
3. Falaki, Foujan. Gas Chromatography- Derivatization, Sample Preparation, Application. IntechOpen, 2019
4. A. Sadaunykas, et al. Chemija 2020, Vol. 31, No. 4, 284–289



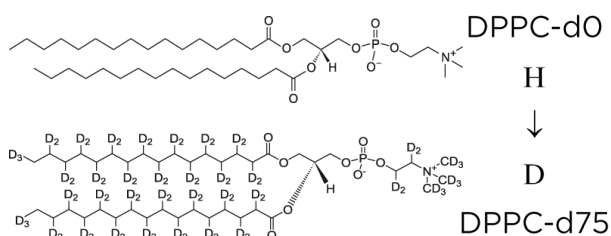
2 pav. Chromatogramos prieš koncentravimą (žemi signalai) ir po 20 injekcijų su koncentravimu (aukšti signalai).

DEUTERINIMO ĮTAKA FOSFOLIPIDINIŲ MONOSLUOKSNIŲ SAVYBĖMS

Edvinas Navakas, Gediminas Niaura, Simona Strazdaite

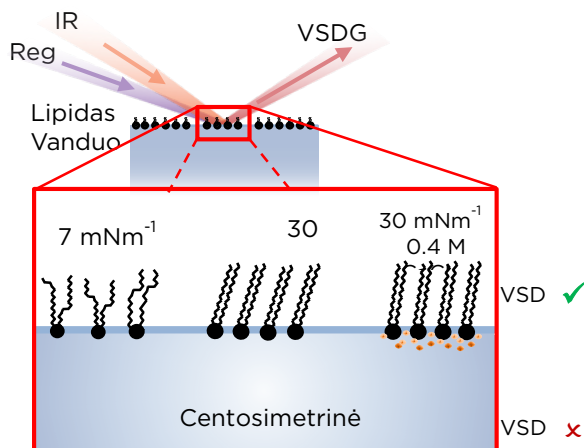
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: Edvinas.Navakas@ftmc.lt

Ląstelių membranos tyrimuose *in situ* spektriniai metodai yra labai retai naudojami dėl gyvų ląstelių trapumo, bei ypatingo šių membranų kompleksškumo. Ši problema sprendžiama naudojant dirbtines membranas sudarytas tik iš kelių elementų, kurių bent vienas, norint išvengti virpesinių juostų persiklojimo, gali būti izotopiškai pažymimas. Praktikoje dažniausiai sutinkamas membranas formuojančių fosfolipidų izotopinis pažymėjimas, kai skirtingos lipido dalys gali būti deuterinamos (1 pav.).



1 pav. 1, 2-Dipalmitoil-3-fosfatidilcholino (DPPC) struktūra, bei izotopinis pažymėjimas pakeičiant vandenilio atomus deuteriais.

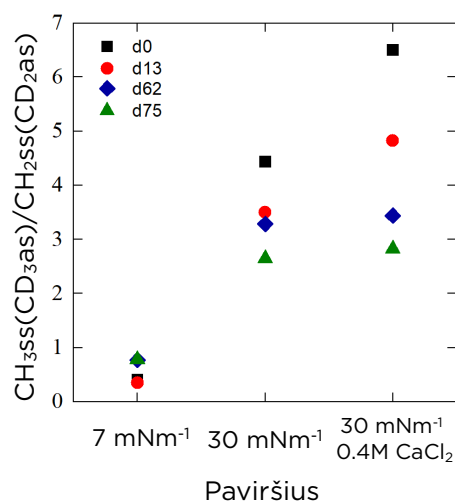
Nors lipidų deuterinimas yra plačiai taikomas spektrometriniuose tyrimuose, iki šiol nėra nustatyta ar tai neturi įtakos formuojamų modelių membranų savybėms. Taigi, siekiami įvertinti skirtingo deuterinimo lipidinių monosluoksnių savybes, mes panaudojome Langmuir-Blodgett sluoksnių formavimo metodiką kartu su virpesine suminio dažnio generacijos (VSDG) spektrometrija, kuri įgalino charakterizuoti monosluoksnių struktūrą molekuliniam lygmenyje (2 pav.).



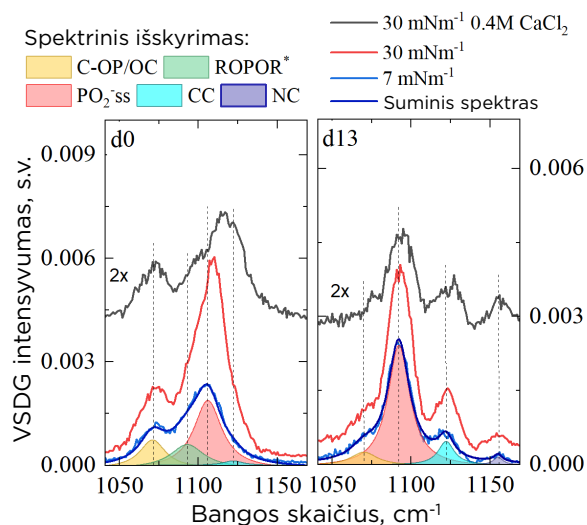
2 pav. Principinė VSDG matavimo ir eksperimento schema.

Atlikus tyrimus mes parodėme, jog tiek alkilinės grandinės, tiek ir cholino grupės deuterinimas

veikia formuojamų monosluoksnių savybes (3 ir 4 pav.). Pastebėjome, kad deuterinimas pakeičia cholino grupės orientaciją, dėl to monosluoksniai sudaryti iš DPPC-d13 ir DPPC-d75 galimai įgauna atviresnę struktūrą, o tai kartu paveikia ir alkilinės grandinės sanglaudą. Ši idėja grindžiama pastebimu hidratacijos įtakos fosfato grupės sumažėjimu. Tuo tarpu alkilinės grandinės deuterinimas pastebimai apsunkina šios grupės persitvarkymą, kai kalcio kationai prisijungia prie lipido.



3 pav. Skirtingos deuterinimo lipidų simetrinių valentinių (ss) rezonansų CH₃ss/CH₂ss ir (CD₃as/CD₂as) santykio stiprio priklausomybė nuo paviršiaus slėgio. Didėsne reikšmė atitinka mažesnį monosluoksnių defektingumą.



4 pav. Cholino grupės deuterinimo įtaka lipido virpesiams.

STUDY OF CESIUM AND COBALT ADSORPTION BY COMPOSITE BASED ON CLAY, GRAPHENE OXIDE AND MAGNETITE/MAGHEMITE

Raman Novikau

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: raman.novikau@ftmc.lt

Galina Lujanienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: galina.lujanienė@ftmc.lt

Vidas Pakštas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterisation of Materials Structure,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: vidas.pakstas@ftmc.lt

Martynas Talaikis

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: martynas.talaikis@ftmc.lt

Audrius Drabavičius

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterisation of Materials Structure,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: audrius.drabavicius@gmail.com

Arnas Naujokaitis

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterisation of Materials Structure,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: arnas.naujokaitis@ftmc.lt

Sergej Šemčuk

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: sergej.semchuk@ftmc.lt

Among the huge variety of methods for removing pollutants, adsorption methods have great potential for application in the field of environmental protection [1, 2]. One of the potential materials as an adsorbent for protecting the environment from radionuclides are clay minerals, which in terms of adsorption efficiency are not inferior to commercial adsorbents, and in some cases are superior to them. Modification and processing of clay minerals can increase their efficiency, in addition, clay minerals can reduce the toxic effect of other components in the composite, for example, graphene oxide [3]. Thus, the use of clay minerals as a composite base makes it possible to obtain highly efficient and biocompatible adsorbents for environmental protection.

The aim of this study was to develop a clay-based composite using graphene oxide (GO) and magnetite-maghemite (MG/MGH) as modifiers, followed by studying the adsorption behaviour of Cs^+ and Co^{2+} on this composite. The first step of the preparation of composites includes the synthesis of all components. The GO was obtained by the Hummers' method, MG/MGH by a co-precipitation reaction of ferrous and ferric ions. The synthesis of the composite included dispersing GO and MG/MGH in an ultrasonic bath for 2 h, followed by the addition of untreated triassic clay (Šaltiškiai in North Lithuania) to the solution, keeping the mixture under constant stirring in a flow of argon for 1.5 hours, at 60 °C. Then this mixture is centrifuged, the resulting composite is taken and dried in a vacuum for 24 hours. These composites

were characterized using X-ray diffraction analysis (XRD), X-ray fluorescence analysis (XRF), scanning electron microscope (SEM), transmission electron microscope (TEM) and fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). To study the adsorption behaviour of Cs^+ and Co^{2+} , various tests were carried out, depending on the concentration of the adsorbent and adsorbate, pH, temperature, contact time, as well as the adsorption of these metals in a binary system. According to the results of the study, we found that the best adsorption of Cs^+ was in acidic and alkaline media, the maximum adsorption of Co^{2+} achieved at pH 5, and at pH > 5, the complexation process prevails. In addition, the adsorption process is endothermic, the adsorption equilibrium is reached within 30 minutes and the adsorption efficiency of Cs^+ decreases under conditions of high Co^{2+} content. Thus, the resulting composite proved to be effective in adsorption of Cs^+ and Co^{2+} , where the maximum adsorption capacity was 2165 mg/g and 627 mg/g.

References

1. B. Mu, A. Wang, Adsorption of dyes onto palygorskite and its composites: a review. *Journal of Environmental Chemical Engineering* **4**, 1274-1294 (2016).
2. H. Han, M. Rafiq et al., A critical review of clay-based composites with enhanced adsorption performance for metal and organic pollutants, *Journal of hazardous materials* **369**, 780-796 (2019).
3. M. Kryuchkova, R. Fakhruллин, Kaolin alleviates graphene oxide toxicity, *Environmental Science & Technology Letters* **5**, 295-300 (2018).

FORMATION OF ALUMINA NANOFIBRES DURING HIGH-FIELD ALUMINUM ANODIZING

Katsiaryna Charniakova¹, Igor Vrublevsky², Arunas Jagminas¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Electrochemical Materials Science
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: katsiaryna.charniakova@ftmc.lt

²Belarussian State University of Informatics and Radioelectronics,
Laboratory of Materials and components of electronics and superconducting equipment
P. Brovki Str. 6, 220013 Minsk, e-mail: vrublevsky@bsuir.edu.by

Alumina nanofibers as high aspect ratio materials are suitable for use as catalyst supports, absorbents and sensor components [1]. Alumina nanofibers can be synthesized by various methods, including hydrothermal synthesis, sol-gel method, chemical etching of porous alumina films, but these processes usually are quite time consuming and the morphology of the final nanofibers sometimes rather difficult to control [2]. In this study we propose to obtain alumina nanofibers in one-stage electrochemical process, namely, during high-field aluminum anodizing in aqueous solutions of oxalic acid.

The samples were prepared on the high-purity aluminum foil (99.99%) of different thickness (25, 60 and 100 μm thick, Alfa Aesar). Alumina nanofibers were formed by double-sided anodizing of aluminum specimens in a 0.3 M aqueous solution of oxalic acid at 15 $^{\circ}\text{C}$ up to the moment when the aluminum was completely oxidized at the constant current mode. Anodizing current density (J_a) was varied in the range of 150–350 mA cm^{-2} with the step of 50 mA cm^{-2} . At the steady state of oxide growth, the anodizing voltage (U_a) was of about 90 V. The process was carried out in two-electrode glass cell, in which a platinum grid was used as counter electrode. Surface morphology of the films was analyzed by scanning electron microscopy (SEM) on a Hitachi S-4800 device. Subsequent statistical analysis of the images was performed by ImageJ software. The Auger electron spectroscopy (AES) measurements were performed to investigate the chemical states of the elements on the surface of oxalic acid alumina films using a Thermo VG Scientific Microlab 350 instrument, equipped with a concentric hemispherical analyzer. Fluorescence spectra were measured with a time-correlated single photon counting spectrometer Edinburgh-F900 (Edinburg instruments).

As we applied double-sided anodizing to control the thickness of final oxide layer the aluminum foil of different thickness was used. It was established that aluminum substrate thickness affected the morphology of the alumina films. According to SEM results (Fig. 1), nanofibers were formed on the surface of the 60 and 100 μm Al foil, but

regardless of the value of J_a they were not synthesized on 25 μm Al foil. It was also shown that alumina nanofibers uniformly covered the entire surface of the films formed only on the Al foil with a thickness of 60 μm . During 100 μm Al foil anodizing, the pores were etched and the nanofibers were partially dissolved.

It can be explained as follows, with increasing Al foil thickness, the anodizing time increases as does the thickness of alumina, which leads to a decrease in thermal conductivity of the samples and also to the local overheating in the barrier layer, therefore, Joule heating dissipates worse. As a result, a local temperature at the bottom of pores increases, electrolyte heats up and the dissolution rate of the oxide layer increases.

According to AES, only samples obtained on 25 μm Al foil contained carbon impurities. Contrary, the surface of the samples formed on 60 and 100 μm Al foil consisted of pure alumina. Additionally, for thicker samples, in Auger spectra both the oxygen lines and the aluminum ones were different from the reference spectrum. Analysis of AES and fluorescence data allowed concluding that the shape of O KLL and Al KLL lines changed due to their fibrous nanostructure.

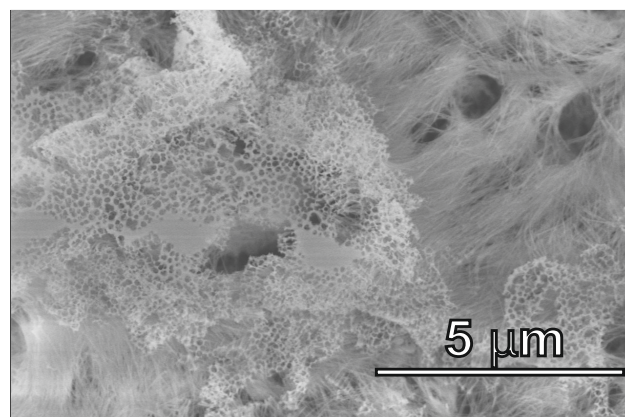


Fig. 1. Alumina nanofibers formed on 60 μm Al foil at 200 mA cm^{-2} .

References

1. T. Kikuchi, K. Kunitomo, H. Ikeda, D. Nakajima, R.O. Suzuki, Sh. Natsui, J. Electroanal. Chem. **846**, 113152 (2019).
2. A. Jagminas, J. Kuzmarskyte, L. Malferrari, M. Cuffiani, Mater. Lett. **61**, 2896 (2007).

ANTI-BACTERIAL PROPERTIES OF THIN FILMS BASED ON GRAPHENE OXIDE-CHITOSAN-COPPER-PLATINUM NANO COMPOSITES

Edith Flora Joel

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: edith.joel@ftmc.lt

Galina Lujanienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: galina.lujaniene@ftmc.lt

Sandra Stanionytė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterisation of Materials
Structure, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: sandra.stanionyte@ftmc.lt

Martynas Skapas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: martynas.skapas@ftmc.lt

Loreta Levinskaitė

Nature Research Centre, Žaliųjų, ežerų, 49, Lt-2021, 2600 Vilnius, email:
loreta.levinskaite@gmail.com

Antimicrobial food packaging has been an important area of research because it can improve food safety and shelf life. This creates a barrier to the growth of pathogens on the surface of food. But recently, the development of biodegradable moisture barrier food packaging has been challenging. Chitosan-graphene oxide matrix polymer nanocomposites themselves are a good carrier of antimicrobial properties that are non-toxic to humans, but toxic to pathogens. But the most common bacteria develop resistance, and this requires progress in the production of thin films. Here we have developed composites based on copper and platinum metals immobilized on a thin monolayer film of graphene oxide and chitosan matrix. This reduction involves the development of thin films with structural modifications of chitosan (Ch) with positively charged metal oxide particles to enhance antibacterial activity. Graphene oxide (GO) is obtained by a modified Hammers method. Copper (Cu) and copper oxides were synthesized in the laboratory by reduction of copper sulfate pentahydrate. Initially, a graphene-chitosan oxide

composite was prepared, and then platinum and copper particles were added to it, similar to other copper oxides. After that, the films were made by the method of gel casting, which was facilitated by the self-healing ability of the chitosan framework. Crystal structures, surface functional groups and morphology were analyzed using X-ray diffraction (XRD), transmission electron microscope (TEM) images, respectively. The characterized thin films are tested against *E. coli* and have a minimum inhibitory concentration (MIC) and a minimum bactericidal concentration. Antibacterial activity was tested against *E. coli*, gram-negative bacteria and a higher zone of inhibition was observed on composites of Ch-GO-Pt-Copper Oxides compared to regular CS-GO-Pt-Cu. The mechanism of cell death suggests a possible mechanism of ion capture due to rupture of the cell wall or ROS-induced production of cell lysis together with platinum. In conclusion, our studies form the basis for the promising use of this nanocomposite as an antibacterial agent for biomedical and food packaging.

CHARACTERIZATION OF MN-BASED CATHODE MATERIALS FOR AQUEOUS NA-ION BATTERIES USING THE ROTATING RING-DISC TECHNIQUE

Davit Tediashvili^{1,2}, Gintarė Plečkaitytė², Jurgis Pilipavičius², Linas Vilčiauskas²

¹Institute of Chemistry, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania.

²Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania.

Email: Davit.Tediashvili@ftmc.lt

Rechargeable lithium-ion batteries with organic electrolytes with high power and energy densities are widely used as commercial energy storage devices, especially for mobile applications. However, for large-scale stationary storage, these properties are of lesser concern, while factors such as price and safety are of paramount significance. For these reasons, cheaper and safer aqueous Na-ion batteries are deemed as a potential alternative. However, the absence of stable, high voltage materials remains a problem.

With a general formula of $\text{Na}_3\text{M}_2(\text{PO}_4)_3$ (M = transition metal), NASICON-structured materials are exceptional due to their fast Na-ion transport. Among available transition metals, Mn is one of the most attractive ones due to its abundance, high potential, and capacity, as multiple redox states are electrochemically accessible. Even though few successful materials have been reported in organic media [1], the co-existence of different Mn states and unfavorable chemistry in water, such as Jahn-teller's distortion and solubility of formed manganese forms, hinders the successful deployment of these materials [2].

Understanding the degradation mechanism is the first step to solving the issue. Conventional techniques, such as AAS, ICP-OES/MS are widely used to characterize the degradation products to gain insight into the process. They offer high precision, however, in-situ methods have the advantage of studying the process directly. In past, some electrophoretic [3] and rotating ring-disc electrode [4] techniques have been successfully employed to study the operation of LiMnO_2 spinel electrode.

RRDE is a very simple but efficient technique that allows simultaneous operation and selective detection of degradation products. Here we used it to characterize three different Mn-based cathodes: $\text{Na}_3\text{MnTi}(\text{PO}_4)_3$ (NMTP), $\text{Na}_4\text{Mn}_3(\text{PO}_4)_2\text{P}_2\text{O}_7$ (NMPP), and $\text{Na}_3\text{MnPO}_4\text{CO}_3$ (NMCP). All of these seem to exhibit a unique degradation mechanism. NMPP and NMCP show rapid degradation as a two-step process at a fully charged state, suggesting instability of de-sodiated states of the structure as well as the

prominence of Jahn-teller distortion for produced Mn^{3+} . For NMTP, the picture is different. Titanium seems to successfully stabilize the de-sodiated structure, so no manganese leaching occurs at this stage, however, as the potential is reversed and soluble Mn^{2+} is produced, we see the dissolution. Overall, results suggest relative stabilizing effects of Ti doping, while anionic substitution was relatively insignificant.

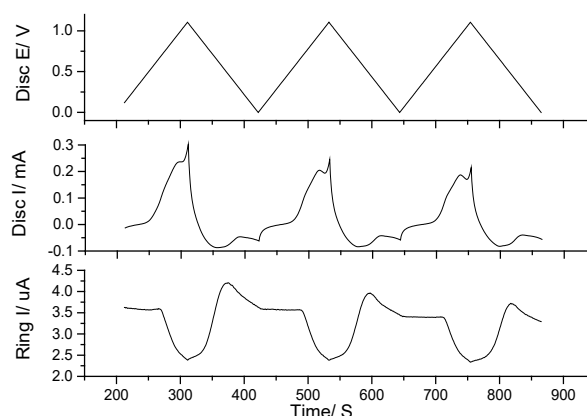


Figure 1. RRDE experiment performed on NMTP. From top to bottom: Applied potential, disc current, and ring response.

Acknowledgments:

This project has received funding from the European Regional Development Fund (Project No. 01.2.2-LMT-K-718-02-0005) under a grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT).

References

1. Gao, H., Li, Y., Park, K. & Goodenough, J. B. Sodium extraction from NASICON-structured $\text{Na}_3\text{MnTi}(\text{PO}_4)_3$ through Mn(III)/Mn(II) and Mn(IV)/Mn(III) redox couples. *Chem. Mater.* **28**, 6553–6559 (2016).
2. Asl, H. Y. & Manthiram, A. Proton-Induced Disproportionation of Jahn – Teller-Active Transition-Metal Ions in Oxides Due to Electronically Driven Lattice Instability. (2020) doi:10.1021/jacs.0c10044.
3. Hanf, L., Henschel, J., Diehl, M., Winter, M. & Nowak, S. Mn^{2+} or Mn^{3+} ? Investigating transition metal dissolution of manganese species in lithium ion battery electrolytes by capillary electrophoresis. *Electrophoresis* **41**, 697–704 (2020).
4. Wang, L.-F., Ou, C.-C., Striebel, K. A. & Chen, J.-S. Study of Mn Dissolution from LiMn_2O_4 Spinel Electrodes Using Rotating Ring-Disk Collection Experiments. *J. Electrochem. Soc.* **150**, A905 (2003).

OPTIMIZATION OF THE CARBON COATING OF ACTIVE MATERIALS FOR AQUEOUS NA-ION BATTERIES

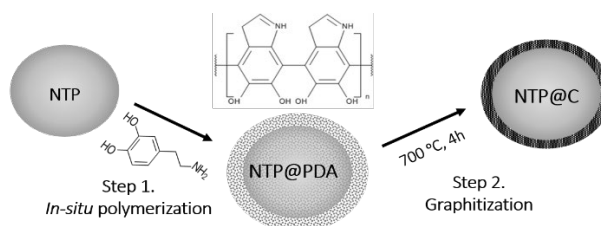
Nadežda Traškina, Jurgis Pilipavičius, Jurga Juodkazytė, Linas Vilčiauskas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: nadezda.traskina@ftmc.lt

In recent years, environmental concerns have shifted the scientific attention towards the development of novel renewable and clean energy storage devices. Sodium ion batteries, especially their aqueous variations, have emerged as an appealing alternative to LIBs owing to sodium's high abundance in nature and elimination of highly toxic and flammable organic electrolytes [1].

The surface coating of electrode active materials has been an indispensable step for preparation of Na-ion aqueous batteries [2]. Carbon coating helps to overcome an inherently low conductivity of NASICON-structured $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ (NTP) as well as to protect the active material from dissolution into aqueous electrolyte, thus ensuring enhanced cycling stability [3]. While carbon coating contributions are well-confirmed, the systematic study of surface layers remains absent [4]. Conventional particle coating by graphitization of glucose or citric acid (CA) does not ensure the homogeneity of conductive layer. Growing a polymer e.g. polydopamine (PDA) shell on the surface of particles through *in-situ* polymerization (Sch. 1) is a reliable method to control the integrity of a conductive layer. Precisely controlled coating enhances both stability and conductivity of active material [5].

The aim of this work was to investigate the effect of *in-situ* polymerization conditions on the NTP electrochemical performance. A polydopamine shell is grown on NTP particles synthesized by a co-precipitation method with varying parameters such as initial pH and monomer concentration. The electrochemical properties of electrodes are investigated by galvanostatic charge/discharge cycling. The results suggest that polydopamine coating results in superior electrode initial capacity and cycling stability compared to conventional routes (Fig. 1).



Scheme 1. Schematic illustration of the synthesis of NTP@C composites.

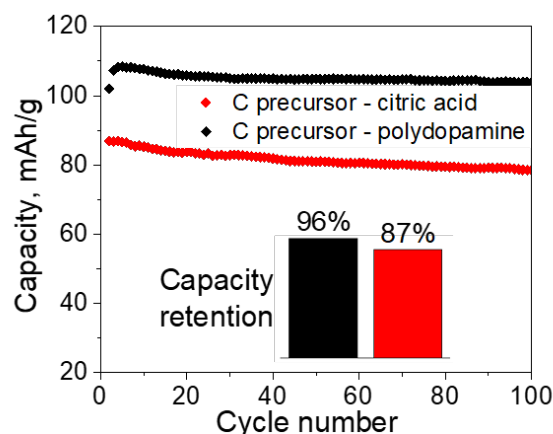


Fig. 1. Comparison of the cyclability between NTP@CA acid and NTP@PDA

References

1. Bin, D., et al., *Progress in Aqueous Rechargeable Sodium-Ion Batteries*. Advanced Energy Materials, 2018. **8**(17): p. 1703008.
2. Xu et al. *Nano energy* **28** p. 224-231 (2016)
3. Plečkaitytė et al. *Journal of Materials Chemistry A* **9** p. 12670-12683 (2021)
4. Liao et al. *Electrochemical and Solid-State Letters* **7** A522 (2004)
5. Chi et al. *RSC Advances* **4** p. 7795-7798 (2014)

HOW TO CONTROL MORPHOLOGY OF $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ NANOPARTICLES?

Gintarė Gečė, Jurgis Pilipavičius, Jurga Juodkazytė, Linas Vilčiauskas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: gintare.pleckaityte@ftmc.lt

Ever-growing energy needs and depleting fossil-fuel resources demand the pursuit of sustainable energy alternatives. Although electricity generated by solar panels, wind turbines or hydropower is clean and safe, but the source is of intermittent nature and requires large-scale storage devices in order to obtain balance. Aqueous Na-ion batteries have received particular attention of researchers as one of the main alternatives for rechargeable sustainable grid-scale stationary energy storage systems because of its price, safety, stability and environmental friendliness [1-3].

Synthesis method of suitable materials can affect the chemical composition, purity, phase structure, morphology and size, all of which influence the electrochemical performance – ion insertion kinetics, charge/discharge capacity, its retention during cycling, Coulombic efficiency etc. Hydro(solvo)thermal synthesis is very attractive alternative method for fabrication of sodium ion battery compounds because of its low temperature, which provides energy savings, high phase purity and crystallinity, high yield, narrow particle size distribution and controllable shape [4]. Tailoring of nanoparticle size and morphology could reduce the ionic and electronic transporting paths and improve the charge transport features of energy storage materials [5].

A whole series of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ nanoparticles were synthesized by a solvothermal method using five different solvents: methanol (MeOH), ethanol (EtOH), 1-propanol (1-PrOH), 2-propanol (2-PrOH) and ethylene glycol (EG) as well as their mixtures with water in different volume ratios (5:0, 4:1, 3:2 and 2:3) in order to investigate the influence of solvent to size and morphology of the particles along with electrochemical performance. The structure and morphology of prepared materials are characterized by X-Ray Diffraction, Scanning Electron Microscopy and Thermogravimetry analysis. It was observed that phase purity, particles shape and size depend strongly on the solvent nature. Additional water in mixture with alcohol not only grows crystals but also affects impurity appearance. The electrochemical properties of prepared $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ based electrodes are investigated by Cyclic voltammetry and Charge/Discharge galvanostatic cycling in the three-electrode bottom mount flat sample beaker cells. Particles with cubic-like morphology, smoother surface and narrower size distribution show better electrochemical performance than other particles of irregular morphology.

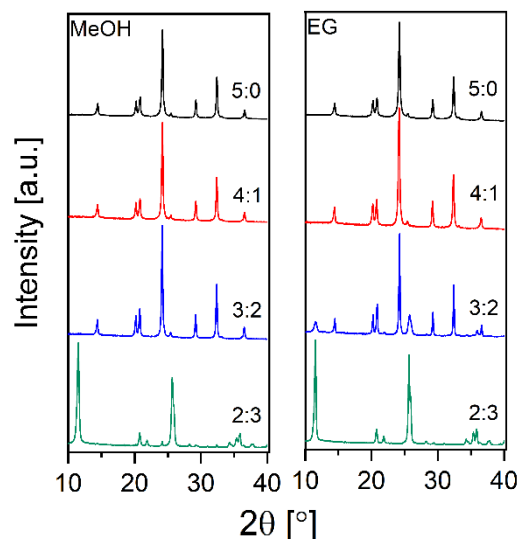


Fig. 1. X-ray diffraction patterns of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ synthesized with methanol and ethylene glycol as solvent.

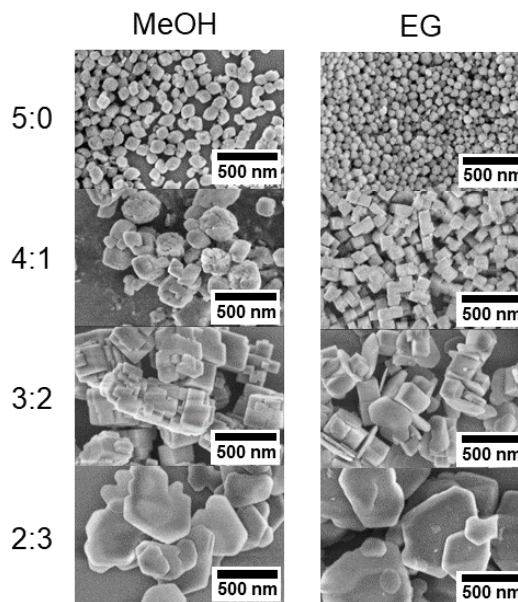


Fig. 2. Scanning electron microscopy images of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ synthesized with methanol and ethylene glycol as solvent

References

1. S.-W. Kim, D.-H. Seo, X. Ma, G. Ceder, K. Kang, *Adv. Energy Mater.*, 2, 710-721 (2012).
2. D. Larcher, J. -M. Tarascon, *Nat. Chem.*, 7, 19-29 (2015).
3. R. Usiskin, Y. Lu, J. Popovic, M. Law, P. Balaya, Y.-S. Hu, J. Maier, *Nat. Rev. Mater.*, (2021).
4. M.K. Devaraju, I. Honma, *Adv. Energy Mater.*, 2, 284-297 (2012).
5. K. Wang, Y. Liu, Z. Ding, Z. Chen, G. Zhu, X. Xu, T. Lu, L. Pan, *Sep. Purif. Technol.*, 278, 119565 (2022).

RAUDONAI FLUORESCUOJANTYS, APLINKAI JAUTRŪS BODIPY FLUOROFORAI

Karolina Maleckaitė¹, Jelena Dodonova², Stepas Toliautas³, Rugilė Žilėnaitė¹, Domantas Narkevičius¹,
Džiugas Jurgutis⁴, Vitalijus Karabanovas^{4,5}, Sigitas Tumkevičius², Aurimas Vyšniauskas¹

¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekuliųjų darinių fizikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolina.maleckaite@ftmc.lt

² Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas,
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

³ Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas,
Saulėtekio al. 9-III, LT-10222, Vilnius

⁴ Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas,
P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius, Lietuva

⁵ Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas,
Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

Mikroklampos, temperatūros ir poliškumo vaizdinimas biosistemose gali suteikti aktualios informacijos apie pokyčius ląstelėse ar net ligų vystymąsi. Vienas paprasčiausių būdų vaizdinti terpės pokyčius yra aplinkos savybėms jautrių fluoroforų panaudojimas[1]. Molekuliųjų rotorų - mikroklampai jautrių fluoroforų - veikimas pagrįstas vidujmolekulinės rotacijos nulemtos fluorescencijos (FL) ir nespindulinės relaksacijos konkurencija. Klampioje terpėje stebima ilgesnė FL gyvavimo trukmė, kurią lemia molekulinės rotacijos pakeista elektroniskai sužadinta būseną ir greitesnė nespindulinė relaksacija[2]. Ypač populiarius boro dipiometenu paremtas mikroklampos jutiklis BODIPY-C₁₀ (Pav. 1) išsiskiria monoeksponentine FL gesimo kinetika, kuri leidžia supaprastinti rezultatų analizę[3]. Tačiau žalia FL yra didžiausias šio fluoroforo trūkumas, nes išsamesniam biosistemų vaizdinimui reikalingi raudonai šviečiantys jutikliai[4].

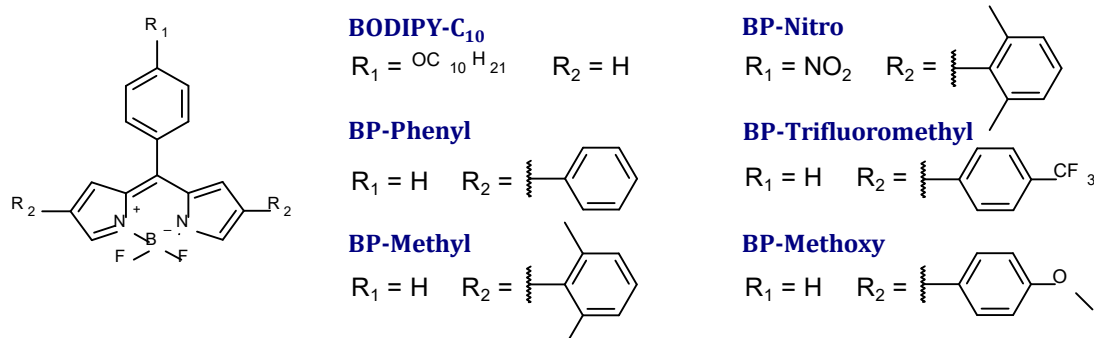
Šiame darbe nagrinėjami BODIPY grupės junginiai su β-fenilpakaitais, kurie leidžia praplėsti molekulinės konjugaciją ir pastumti FL spektrą į ilgųjų bangų pusę. Tyrimas sudarytas iš trijų dalių: pirmoji atskleidžia, kaip tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai (angl. *density functional theory*, DFT) gali padėti nuspėti molekulinės jautrumą klampai prieš sintezę bei pristatomas

naujas, raudonai fluorescuojantis mikroklampos jutiklis BP-Nitro (Pav. 1). Antroje dalyje pristatome, kokią įtaką molekulinės fotofizikinės ir sensorinės savybės turi elektronų akceptorinės arba donorinės grupės prijungimas, taip pat pademonstruojame poliškumui jautrų raudonąjį fluoroforą BP-Methoxy (Pav. 1). Paskutinė tyrimo dalis parodo, kokią įtaką turi aktyvacijos energinis barjeras E_a fluoroforo klampos ir temperatūros jautrumui, bei įvertiname E_a vertes, kurių reikėtų siekti norint sukurti atitinkamus jutiklius.

Darbas sudarytas iš DFT skaičiavimų, sugerties ir FL spektrų, FL gyvavimo trukmių analizės, gyvų ląstelių vaizdinimo metodikos ir teorinių matematinių modeliavimų, kurie leidžia įvertinti FL gyvavimo trukmių, E_a ir jautrumo aplinkos savybėms sąryšius.

Literatūra

1. Y. Fu and N. S. Finney, RSC Adv. **8**, 29051–29061 (2018).
2. M. A. Haidekker and E. A. Theodorakis, Org. Biomol. Chem. **5**, 1669–1678 (2007).
3. J. A. Levitt, P. Chung, M. K. Kuimova, G. Yahiloglu, Y. Wang, J. Qu and K. Suhling, ChemPhysChem **12**, 662–672 (2011).
4. R. Weissleder, Nat Biotechnol. **19**, 316–317 (2001).



1 pav. Tyrime naudojami junginiai. Populiariausias molekulinis rotorius BODIPY-C₁₀ bei nauji junginiai su padidinta konjugacijos sistema: be papildomų pakaitų (BP-Phenyl), su dviem metilgrupėmis ant β-fenilo (BP-Methyl) ir papildomai nitrogrupe ant meso-fenilo (BP-Nitro), su elektronų akceptorine (BP-Trifluoromethyl) ir donorine (BP-Methoxy) grupėmis.

REAL-TIME AND LABEL-FREE EVALUATION OF T7 DNA POLYMERASE IMMOBILIZATION

Julija Dronina^{1,2}, Deivis Plaušinitis², Urte Samukaite Bubniene^{1,2},
Arunas Ramanavicius^{1,2}

¹ Center for Physical Sciences and Technology, Laboratory of Nanotechnology,
Department of Functional Materials and Electronics, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania;
email: julija.dronina@ftmc.lt

² Vilnius University, Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Geoscience,
Naugarduko str. 24, LT-03225 Vilnius, Lithuania

During the COVID-19 pandemic, the development of RNA or DNA-sensors and accurate analytical methods based on DNA-modifying enzymes for nucleic acid detection is especially relevant. Recently, DNA-modifying enzymes have been widely used for the diagnosis of viral or pathogenic disease by “gold” (PCR, qPCR, RT-qPCR) methods. The immobilization of biologically active proteins is the primary key in reusing expensive enzymes for many analytical cycles. However, the immobilization of DNA-modifying enzymes on any surface technique with the ability to detect viral or bacterial nucleic acid is individual for each DNA-modifying enzyme group. Generally, DNA-modifying enzymes facilitate the transformation of DNA-based substrate. These enzymes can accurately recognize, amplify, and/or cleave target and non-target DNA fragments [1]. Therefore, immobilization of the DNA-modifying enzymes is still a complex and challenging task in biotechnology and biosensing.

T7 DNA polymerase is a promising DNA-modifying enzyme that catalyzes DNA replication in vitro. The enzyme has an extraordinarily strong 3'→5' exonuclease (nucleotide cleavage) activity at a single site. However, immobilization of a fully functional T7 DNA polymerase is a challenging task due to the fundamental properties of the enzymes. All enzymes are proteins and are amphiphilic, which causes them to have an affinity with different interfaces and they have multiple strong more than one active centers. Effectively used inherent T7 DNA polymerase properties can be successfully employed for developing DNA-sensors.

This study was successful in investigating the kinetics of immobilization of T7 DNA polymerase with masked active site [2] on different mixed thiol surfaces by QCM method. Study have shown that increasing concentrations of carboxyl groups in the thiol mixture increases the yield (ng) of T7 DNA polymerase immobilization. Commonly, we have demonstrated by this study/research that immobilization is best described according to the first-order kinetic equation. Moreover, our results revealed that immobilized 10 ng of T7 DNA polymerase corresponds to 1.20 Hz frequency change. To evaluate the performance of the engineered T7 DNA polymerase-sensor, we measured the specificity of the immobilized enzyme. In our study, DNA-sensor with immobilized 427.95 ± 0.60 ng of T7 DNA polymerase could accurately cleave 15 ng of double-stranded DNA fragments during overnight incubation at room temperature. In particular, the results explained that immobilized T7 DNA polymerase is entirely functional on all thiol mixture surfaces, and the enzyme's active site was well protected from inactivation. Therefore, the T7 DNA polymerase-sensor can be used more widely in DNA detection research.

References

1. Dronina, J., Bubniene, U. S. & Ramanavicius, A. The application of DNA polymerases and Cas9 as representative of DNA-modifying enzymes group in DNA sensor design (review). *Biosensors and Bioelectronics* 112867 (2020) doi:10.1016/j.bios.2020.112867.
2. Lim, G., Hwang, H. J. & Kim, J. H. Protected immobilization of Taq DNA polymerase by active site masking on self-assembled monolayers of ωfunctionalized thiols. *Analytical Biochemistry* 419, 205–210 (2011).

ADITYVIOS GAMYBOS BŪDU SUFORMUOTO β -TRIKALCIO FOSFATO SAVYBIŲ ANALIZĖ IR PERSPEKTYVOS KAULINIO AUDINIO REGENERACIJOJE

Skirmantas Norkus^{1,3}, Osvaldas Grubys³, Simona Raugalaitė³,
Brigita Abakevičienė², Ramūnas Valiokas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanoinžinerijos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

²Kauno technologijos universitetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368m Kaunas, Lietuva

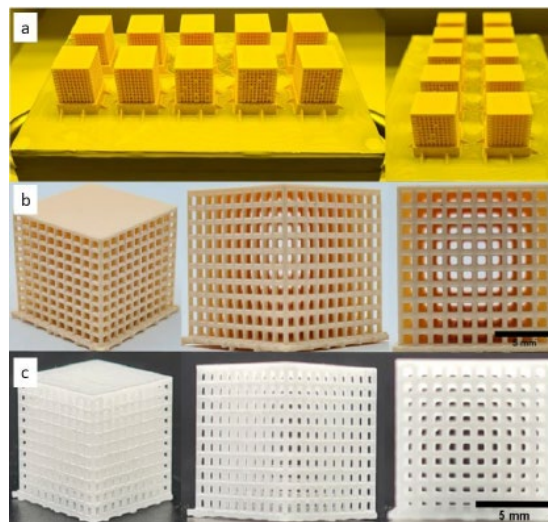
³Ortho Baltic UAB, Taikos pr. 131A, LT-51124, Kaunas, Lietuva
el. p.: skirmantas.norkus@ftmc.lt

Kaulų persodinimo dažnis yra antra pagal dažnumą audinių transplantacija visame pasaulyje, iškart po kraujo perpilimo [1]. Kaulinio audinio defektams gydyti per metus atliekama daugiau nei du milijonai chirurginių operacijų [1-2]. Didesnius kaip 4-6 cm kaulinio audinio defektus reikia gydyti kaulų transplantatais [2]. Kritinio dydžio defektai gali būti įgimti arba susidaryti dėl traumų, navikų, infekcijų ir tokių ligų kaip osteoporozė, nekrozė ar kaulų atrofija [1]. Kaulinio audinio defektams gydyti naudojami keturi pagrindiniai kaulų persodinimo tipai: autologinis, alogeninis, ksenogeninis, aloplastinis. Autologinis kaulas šiuo metu laikomas „auksiniu“ standartu gydant kaulinio audinio defektus [1, 3]. Tačiau vis daugiau dėmesio skiriama aloplastinėms kaulų transplantato medžiagoms, nes jų panaudojimas galėtų supaprastinti operacijas ir padėtų išvengti dažniausiai pasitaikančių komplikacijų [1,3].

Pagrindinis šio tyrimo tikslas buvo įsitikinti, kad LCM (angl. *lithography based ceramic manufacturing*) technologija pagaminti β -trikalčio fosfato (β -TCP) karkasai gali būti naudojami kaip alternatyva kaulų defektams užpildyti. β -TCP karkasų spausdinimui buvo naudojama viena iš naujausių pasaulyje 3D keramikos spausdinimo technologijų LCM. Naudojant šią technologiją, atspausdintų β -TCP karkasų gamybą iš esmės sudaro du pagrindiniai etapai: 3D spausdinimas ir terminis apdorojimas (žr. 1 pav.). β -TCP karkasų poringumas, karkasų porų dydis ir medžiagos tankio fliktuacijos buvo analizuojami naudojant pramoninę kompiuterinę tomografiją (μ CT).

Siekiant išanalizuoti adityvios gamybos būdu pagaminto β -TCP struktūrines savybes, atlikti tyrimai naudojant rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) ir Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopijos (FT-IR) analizes. β -TCP bandinių paviršiaus topografija ir šiurkštumas buvo analizuojami naudojant optinę profilometriją ir skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM). β -TCP karkasų mechaninės savybės įvertintos gniuždymo testu. Taip pat, eksperimentinių bandinių paviršius buvo funkcionalizuojamas ir padengiamas hidrogelinėmis medžiagomis bei atliekamas pirminis charakterizavimas.

Tyrimo metu nustatyta, kad LCM keramikos spausdinimo technologija tinka sudėtingos



1 pav. β -TCP karkasai: a) ant spausdinimo platformos; b) po 3D spausdinimo ir valymo; c) po terminio apdirbimo.

geometrijos karkasų gamybai, kurie pasižymi geometriniu tikslumu ir atsikartojamumu. Atlikus XRD ir FT-IR analizes, nustatyta, kad LCM metodu suformuoti β -TCP karkasai turi analogiškas kristalinės fazės savybes ir cheminius ryšius kaip β -TCP objektai, pagaminti tradiciniais gamybos metodais. Remiantis šių tyrimų rezultatais, galima daryti prielaidą, kad LCM technologija gali būti naudojama, kaip perspektyvus gamybos metodas β -TCP karkasų gamyboje, nes analogiškų savybių β -TCP medicinos prietaisai turi ilgą klinikinę istoriją. Atlikti tyrimai parodė, kad ant adityvios gamybos β -TCP medžiagos galima suformuoti PEG hidrogelines dangas. Remiantis literatūra, toks kompozitas turėtų turėti didelį potencialą kaulinio audinio regeneracijoje.

Literatūra

1. Campana, V., Milano, G., Pagano, E., Barba, M., Cicone, C., Salonna, G., Logroscino, G. (2014). *Bone substitutes in orthopaedic surgery: from basic science to clinical practice*. Journal of Materials Science: Materials in Medicine, 25(10), 2445-2461. doi:10.1007/s10856-014-5240-2.
2. Hixon, K. R., Eberlin, C. T., Kadakia, P. U., McBride-Gagyi, S. H., Jain, E., & Sell, S. A. (2016). *A comparison of cryogel scaffolds to identify an appropriate structure for promoting bone regeneration*. Biomedical Physics & Engineering Express, 2(3), 035014. doi:10.1088/2057-1976/2/3/035014.
3. Henkel, J., Woodruff, M. A., Epari, D. R., Steck, R., Glatt, V., Dickinson, I. C., ... Hutmacher, D. W. (2013). *Bone Regeneration Based on Tissue Engineering Conceptions – A 21st Century Perspective*. Bone Research, 1(3), 216-248. doi:10.4248/br201303002.

PULSED ELECTRIC FIELDS ACTIVATE NF- κ B PATHWAY-CONTROLLED GENE EXPRESSION IN HUMAN CERVIX CARCINOMA CELLS WITHOUT DAMAGE TO MEMBRANE INTEGRITY AND VIABILITY

Justina Kavaliauskaitė^{1,2}, Auksė Kazlauskaitė^{1,2}, Juozas R. Lazutka², Arūnas Stirkė¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Functional Materials and Electronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

²Life Sciences Center, Bioscience Institute, Vilnius University
Saulėtekio av. 7, LT-10222 Vilnius
email: justina.kavaliauskaite@ftmc.lt

Many human disease phenotypes are linked to mutations in over 4500 genes (as per OMIM Gene Map Statistics, 2021). This has created a base for therapeutic strategies that can modify nucleic acids within disease-affected cells, e.g., gene therapy. However, as with any other therapeutic molecule, effects of transgene agents depend on the dosage [1]. Both for laboratory use and for potential therapeutic applications, a regulated gene expression may be a requirement. In this context, pulsed electric field technology could be a candidate for non-invasive, biophysical regulator of gene expression.

The aim of this study was to investigate microsecond pulsed electric fields (μ sPEF) stimulation as a concept for a potential non-ligand physically triggered regulator of gene expression in human cervix carcinoma cell line (Hep-2c). To address this possibility, we employed a plasmid-based heterologous transcription system that consisted of two main elements: (1) nuclear factor κ B (NF- κ B) pathway-controlled synthetic promoter and (2) secreted alkaline phosphatase SEAP reporter gene. Cells were transfected with the reporter plasmid and exposed to different pulsed electric field amplitudes. In addition, we aimed to maintain cells viable and attempted to keep the integrity of cell membrane intact. For this, electrical pulse parameters were selected based on published data [2, 3]. We reported results in relative expression of SEAP protein in the fold comparison to untreated control 24- and 48-hours post-pulsation. During the study, we also assessed cell viability (metabolic activity) 24- and 48-hours post-pulsation and expressed it as a percentage comparison to the untreated control cells. Furthermore, we conducted membrane permeability assay

immediately after μ sPEF treatment using membrane impermeable SYTOX[®]-green nucleic acid stain and presented results as the fold comparison of the fluorescence of the stain after μ sPEF to untreated control.

Human cervix carcinoma cell culture exposure to μ sPEF resulted in significantly higher levels of relative expression of SEAP throughout 0.165 - 0.4 kV/cm 24 hours post-pulsation. Pulsed electric fields amplitude of 0.165 kV/cm caused the highest peak of relative expression of SEAP – approximately 2-fold increase compared with the untreated control (1.95 ± 0.29 , $p < 0.0001$). Interestingly, at the point where highest reporter gene expression levels were achieved, cells remained viable ($103 \% \pm 5 \%$) and no membrane permeabilization was observed whatsoever. The reporter system settled 48 hours post-exposure; no gene activation was detected compared with the untreated control at all amplitudes.

We conclude that microsecond duration pulsed electric fields activate NF- κ B pathway-controlled SEAP gene expression in human cervix carcinoma cells without damage to membrane integrity and viability at 0.165 kV/cm 24 hours post-pulsation. To our knowledge, this is the first experimental study that demonstrates μ sPEF can act as the inducer of target promoter.

References

1. E. Pedone, L. Postiglione, F. Aulicino, D.L. Rocca, S. Montes-Olivas, M. Khazim, D. di Bernardo, M. Pia Cosma, and L. Marucci, *Nat. Commun.* **10**, 4481 (2019).
2. C. Li, C. Yao, C. Sun, F. Guo, W. Zhou, and Z. Xiong, *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **18**, 2083–2088 (2011).
3. M. Kandušer, M. Šentjarc, and D. Miklavčič, *Eur. Biophys. J.* **35**, 196–204 (2006).

METALINIŲ PAVIRŠIŲ BIOSUDERINAMUMAS OPTOPORACIJOS TYRIMAMS

Neringa Bakutė, Tadas Matijošius, Auksė Kazlauskaitė, Virginija Siaurusevičiūtė,
Justina Kavaliauskaitė, Arūnas Stirkė

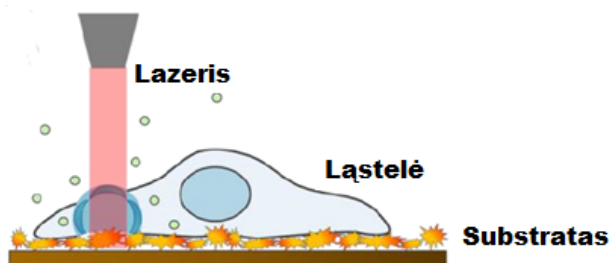
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: neringa.bakute@ftmc.lt

Vienas iš lazerio spinduliuotės poveikių ląstelei yra lazerio sukelta membranos permeabilizacija, kuomet per laikinai atsiveriančias poras membranoje į ląstelės vidų ar iš ląstelės į išorę gali patekti įvairios medžiagos.

Optoporacija – tai tikslinis egzogeninių medžiagų, pavyzdžiui, nukleorūgščių ar baltymų, įvedimas į ląstelę lazerio pagalba. Vienas anksčiausiai pradėtų naudoti būdų optoporacijai – lazerio spinduliuotė tiesiogiai nukreipta į ląstelę. Šiuo atveju reikalingas labai tikslus lazerio pluošto dėmės bei ląstelės suvedimas, net mikrometrų paklaida gali drastiškai sumažinti transfekcijos efektyvumą [1].

Norint pagerinti optoporacijos procesą, pradėtos naudoti plazmoninių savybių turinčios nanodalelės, dažniausiai aukso nanodalelės [2]. Nanodalelės konvertuoja lazerio spinduliuotę į karštį, indukuojantį mikroburbulų susidarymą šalia ląstelių bei staigų mikroburbulų suirimą, ko pasekoje per ląstelės membranoje atsiveriančias poras gali įvykti ir tikslinė medžiagų transfekcija. Deja naudojant šį metodą stebimas citotoksiškumas dėl nanodalelių patekimo į ląstelių vidų [3].

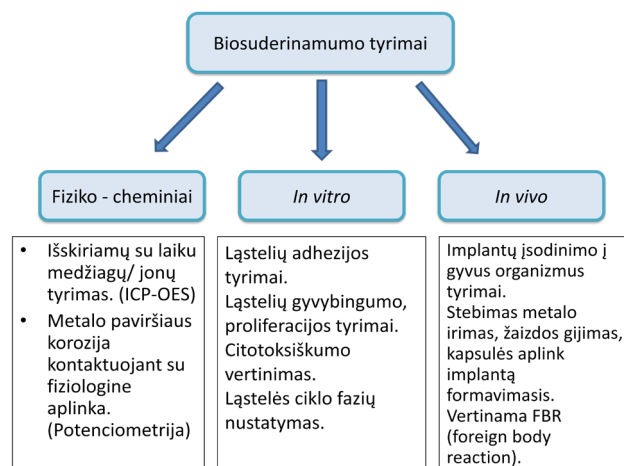
Nuo 2015 metų optoporacijai pradėtos naudoti struktūruoti plazmoniniai substratai [4], sukeliantys tokį patį efektą ląstelių membranos permeabilizacijai kaip ir nanodalelės.



1 pav. Optoporacija: lazeris+ląstelė+aukso substratas.

Tačiau nors substratai ir nepatenka į ląstelės vidų kaip nanodalelės, visgi jie gali įtakoti ląstelės gyvybinius parametrus. Todėl optoporacijoje naudojamas substratas privalo būti

biosuderinamas, t.y., jei šį substratą eksponuotume su kūno skysčiais bei audiniais, substratas neturi sukelti citotoksiškumo bei organizmo imuninio atsako. 2 paveiksle nurodyti pagrindiniai biosuderinamumo tyrimo metodai. Mūsų tyrimo metu planuojama ištirti substratų koroziją, įvykusią inkubuojant substratą SBF (simulated body fluid) tirpale, taip pat atlikti ląstelių *in vitro* tyrimus stebint ląstelių adheziją ant tiriamo substrato, gyvybingumą bei citotoksiškumą.



2 pav. Biosuderinamumo tyrimo metodai.

Literatūra

- He, H., Kong, S.K., Lee, R.K.Y., Suen, Y.K. and Chan, K.T., Opt. Lett. 33 (2008). Targeted photoporation and transfection in human HepG2 cells by a fiber femtosecond laser at 1554 nm.
- Pitsillides, C.M., Joe, E.K., Wei, X.B., Anderson, R.R. and Lin, C.P., Biophys. J. (2003). Selective cell targeting with light-absorbing micro-particles and nanoparticles.
- Li, J. J., Hartono, D., Ong, C. N., Bay, B. H., Yung, L. Y. L. Biomaterials (2010). Autophagy and oxidative stress associated with gold nanoparticles.
- Courvoisier, S., Saklayen, N., Huber, M., Chen, J., Diebold, E.D., Bonacina, L., Wolf, J-P., and Mazur E. NanoLett. (2015). Plasmonic Tipless Pyramid Arrays for Cell Poration.

PLAZMOS POVEIKIO TAIKYMAS VERTINGŲ JUNGINIŲ EKSTRAKCIJAI IŠ MIKRODUMBLIŲ, NAUDOTŲ NUOTEKŲ BIOREMEDIACIJOJE

Kamilė Jonynaitė¹, Arūnas Stirkė¹, Liutauras Marcinauskas^{2,3}, Mindaugas Aikas²,
Andrius Tamošiūnas², AiringasŠuopys², Rolandas Uscila²

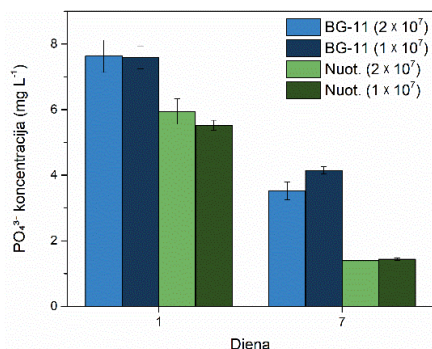
¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius,
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: kamile.jonynaitė@ftmc.lt

² Lietuvos energetikos institutas, Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas

³ Kauno technologijos universitetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

Mikrodumbliai – dideliu produktyvumu ir sintetinamų junginių gausa pasižymintys mikroorganizmai, kurių pritaikomumo vis dažniau ieškoma biotechnologijų, farmacijos ir energetikos pramonės sektoriuose. Didžioji dalis vertingų cheminių junginių yra kaupiami dumblio ląstelės viduje, kurią nuo aplinkos saugo itin stipri, tvirta sienelė. Taikant įprastus ląstelių dezintegracijos metodus (pvz., aukšto slėgio homogenizacija) iškyla iššūkių susijusių tiek su ekstrakcijos efektyvumu tiek su proceso industrializavimu. Vienas iš naujai taikomų sprendimo būdų – dumblių apdorojimas plazmos apšvita [1,2]. Taigi, šio darbo tikslas yra įvertinti plazmos apšvitos parametrų įtaką mikrodumblių *Chlorella vulgaris* gyvybingumui. Tuo pačiu įvertinti dumblių vykdomos nuotekų bioremediacijos efektyvumą.

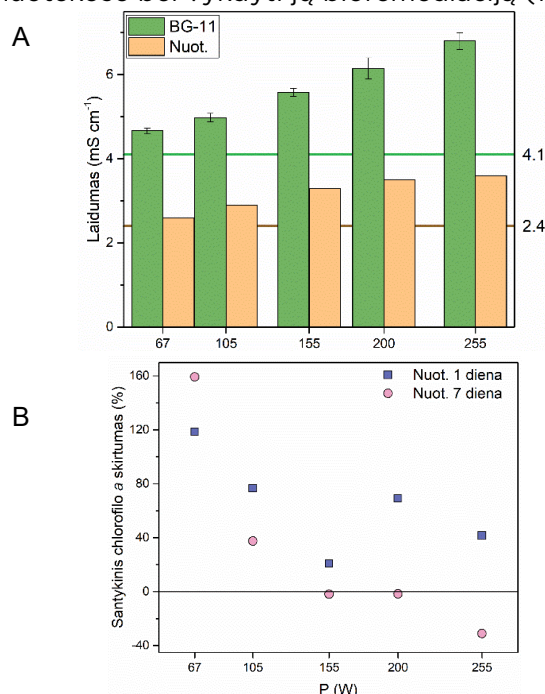
Tyrimo metu, *C. vulgaris* mikrodumbliai buvo kultivuojami BG-11 mitybinėje terpėje bei akvakultūros nuotekose. Kultivavimo metu buvo fiksuojami terpės elektrinio laidumo, pH, optinio tankio, išskirto chlorofilo a ir cheminių elementų (PO_4 , SO_2) koncentracijų kitimai.



1 pav. PO_4^{3-} kitimas terpėje, vykdant dumblių kultivavimą.

Vėliau, užauginta ir sukoncentruota dumblių biomasė (10 mg/ml) buvo veikiamą slystančio lanko išlydžio plazmą. Plazmai formuoti buvo naudoti šie parametrai: suslėgto oro srautas ~ 22.8 l/min, atstumas tarp elektrodų ir veikiamos dumblių suspensijos 20-30 mm, poveikio trukmė 5-10 min, maitinimo šaltinio galia 35-265 W ir dažnis 270 kHz. Iš karto po apšvitos plazma ir praėjus 7 dienoms, po pakartotinio kultivavimo,

išskirta chlorofilo a koncentracija buvo naudojama kaip mikrodumblių gyvybingumo indikatorius. Gauti rezultatai parodė, jog *C. vulgaris* gali sėkmingai būti kultivuojamas akvakultūros nuotekose bei vykdyti jų bioremediaciją (1 pav.).



2 pav. Mėginio elektrinio laidumo (A) ir išskirto chlorofilo a konc. (B) pokytis po plazmos apšvitos.

Tuo tarpu plazma paveiktų dumblių gyvybingumas kinta priklausomai nuo naudojamos išlydžio galios (2 pav.). Vertinant tyrimų rezultatus, nustatyta jog esant ~255 W galiai, plazma paveiktų dumblių gyvybingumas sumažėjo. Apie plazmos sukeltus dumblių ląstelių pažeidimus, indukuoja ir ryškus laidumo padidėjimas, galimai nulemtas viduląstelių junginių ištekėjimo į terpę. Tačiau, esant išlydžio galiai iki 200 W, apšvita plazma ne tik kad neturi neigiamo poveikio, bet ir gali skatinti dumblių augimą.

Literatūra:

- [1] H.-J. Kim, et al, "Cold Plasma Treatment for Efficient Control over Algal Bloom Products in Surface Water," *Water*, vol. 11, no. 7, Art. no. 7, Jul. 2019.
- [2] C. Eing, et al, "Pulsed Electric Field Treatment of Micro-algae—Benefits for Microalgae Biomass Processing," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 41, no. 10, pp. 2901-2907, Oct. 2013.

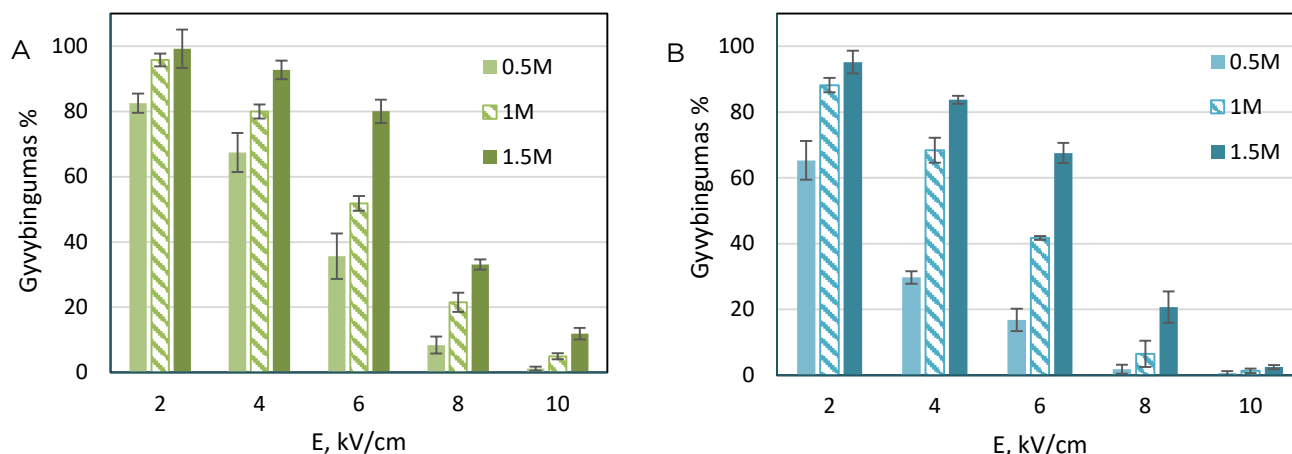
OSMOSINIO ŠOKO POVEIKIO *Saccharomyces cerevisiae* LĄSTELIŲ ATSAKUI Į ELEKTRINIO LAUKO IMPULSĄ TYRIMAS

Greta Gančytė, Povilas Šimonis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: greta.gancyte@ftmc.lt

Mielės *Saccharomyces cerevisiae* yra vienaląsčiai eukariotiniai mikroorganizmai, priklausantys grybų karalystei [1]. Natūralioje mielių ląstelių aplinkoje osmosinis slėgis nebūna pastovus. Tūriui ir formai po osmosinio streso grąžinti mielės yra prisitaikiusios naudoti HOG (*angl.* high osmolarity glycerol) signalinį kelią [2]. Vienas iš abiotinių poveikių, susijusių su viduląstelių junginių praradimu ar užląstelių medžiagų patekimu į ląstelę yra impulsinis elektrinis laukas (IEL). Jis apibūdinamas kaip fizikinis metodas, kurio metu ląstelės yra veikiamos trumpais įvairaus stiprio elektrinio lauko impulsais siekiant suformuoti poras ir padidinti membranų pralaidumą. Šis reiškinys vadinamas elektroporacija [3]. Šiame darbe buvo tiriama osmosinio slėgio pokyčio po IEL poveikio įtaka mielių ląstelių gyvybingumui ir pralaidumui. Darbas buvo atliktas su Y00000 (WT) ir Y02724 (Δhog) kamienais. Buvo parodyta, kad ląstelių gyvybingumas

priklauso nuo IEL poveikio ir mažėja stiprėjant elektriniam laukui. Pralaidumas po 2-10 kV/cm IEL poveikio atitinkamai padidėjo. Mielių inkubacija hiperosmosinėse sąlygose (1,5 M sorbitolio tirpale) po 2-10 kV/cm elektrinio lauko impulso poveikio padidina WT mielių gyvybingumą vidutiniškai 20,4 %, o Δhog ląstelių gyvybingumą vidutiniškai 33,2 %. Hiperosmosinis šokas po IEL poveikio sumažina WT mielių ląstelių pralaidumą vidutiniškai 25 %, o Δhog ląstelių pralaidumą vidutiniškai 29,5 %; priešingą poveikį turėjo inkubacija hipoosmosinėse (0,5 M sorbitolio tirpale) sąlygose: po 2-10 kV/cm elektrinio lauko impulso poveikio sumažina WT ląstelių gyvybingumą vidutiniškai 21,8% ir Δhog ląstelių gyvybingumą vidutiniškai 34,7%, o taip pat padidino WT mielių ląstelių pralaidumą vidutiniškai 26,1 %, o Δhog ląstelių pralaidumą vidutiniškai 39,9 %. Gyvybingumo tyrimo rezultatai pateikti 1 pav.



1 pav. **A** Laukinio tipo (WT) ir **B** Δhog mielių ląstelių gyvybingumo priklausomybė nuo osmosinio šoko po skirtingo stiprio elektrinio lauko poveikio. Spalvos gradientas nurodo sorbitolio koncentraciją osmosinį šoką sukeliančiame tirpale: šviesesnė spalva 0,5 M, brūkšnine linija 1 M (be osmosinio šoko), tamsesnė 1,5 M.

Apibendrinus tyrimo rezultatus galima daryti išvadą, kad keičiant osmosinį slėgį po IEL poveikio mielių ląstelių gyvybingumas ir pralaidumas gali būti reguliuojamas (padidinamas arba sumažinamas). HOG biocheminis kelias yra dalyvauja mielių ląstelių atsistatymo po IEL poveikio procese, nes ląstelės turinčios išveiklintą HOG geną yra jautresnės osmosinio slėgio pokyčiams.

Literatūra:

- [1] M. Parapouli, A. Vasileiadis, A.-S. Afendra, and E. Hatziloukas, "Saccharomyces cerevisiae and its industrial applications", AIMS Microbiol. 6(1): 1-31 (2020).
- [2] S. Hohmann, "Control of high osmolarity signalling in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*", FEBS Lett. 17;583(24):4025-9, (2009).
- [3] A. Stirke, R. Celiesiute-Germaniene, A. Zimkus, N. Zurauskiene, P. Simonis, A. Dervinis, A. Ramanavicius, and S. Balevicius, "The link between yeast cell wall porosity and plasma membrane permeability after PEF treatment." Scientific reports vol. 9,114731, (2019).

APPLICATIONS OF GREEN TECHNOLOGIES IN FOOD PROCESSING

Ahmed Taha*, Federico Casanova**, Arūnas Stirė*

*Center for Physical Sciences and Technology, Department of Functional Materials and Electronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: ahmed.taha@ftmc.lt

** Food Production Engineering, National Food Institute, Technical University of Denmark
2800 Kgs. Lyngby, Denmark

Recently, green technologies have attracted much attention due to their positive impact on the environment. Ultrasound (US) and pulsed electric field (PEF) are considered as eco-friendly and energy-efficient techniques. US as a green technology has been utilized in several food applications such as phytochemicals extraction, drying, processing of fruits, juices, and dairy products, freezing, crystallization processes, improving the functional properties of food proteins, microbial inactivation, encapsulation, and emulsification. US is defined as acoustic waves at frequencies higher than 20 kHz. Acoustic cavitation (the formation and the collapse of air bubbles in the system) is the main phenomenon induced by US. The collapse of air bubbles can induce chemical reactions and generate several physical effects such as high-speed liquid jet, high temperature, pressures, shock waves, turbulence, and extreme physical shearing in the medium¹. In recent studies, we used US to improve the functional properties (emulsifying and gelling properties) of plant proteins. Results showed that US did not alter the primary structure but made minor changes to the secondary structure of soy proteins. US partially unfolded the tertiary structure of soy protein, exposing the sulfhydryl group and hydrophobic groups to the surface of protein molecules. Moreover, US reduced the particle size and facilitated the formation of soluble protein aggregates, thus improving protein solubility. These US-induced changes improved the emulsifying and gelling properties of plant proteins^{1,2}. Also, US was used as an emulsification technique to prepare protein-based emulsions and gel-like emulsions (Fig. 1). US improved the gel strength, water holding capacity, and storage stability of β -carotene bulk emulsion gels³. In another study, US improved the crystal strength and physical properties of different nut oils-based oleogels. US decreased the degradation of β -carotene and reduced the release of β -carotene in intestinal digestion⁴.

PEF has been used as a non-thermal process to destroy microorganisms while retaining the nutritional quality and food flavor. During PEF

treatment, food materials pass between two electrodes, and pulses of high voltage electric field ($1\text{--}100\text{ kV/cm}^{-1}$) were applied for milliseconds to nanoseconds. Currently, we are studying the influence of PEF (electric field strengths from $3.2\text{--}7.5\text{ kV/cm}^{-1}$) on bovine serum albumin (BSA)/starch interactions and the emulsifying properties of BSA/starch conjugates. The preliminary results showed that PEF treatment at $3.2\text{--}4.2\text{ kV/cm}^{-1}$ increased the protein solubility of BSA/starch conjugates, while the solubility decreased after PEF treatment at electric field strengths higher than 4.2 kV/cm^{-1} (Fig. 2). Similarly, PEF treatment of BSA/starch conjugates at $3.2\text{--}4.2\text{ kV/cm}^{-1}$ resulted in lower protein droplet sizes than the conjugates treated at higher electric field strengths.

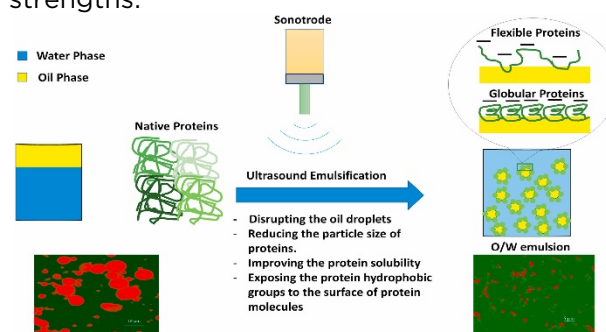


Fig. 1. Schematic diagram of possible mechanism of ultrasound emulsification of protein-stabilized emulsions.

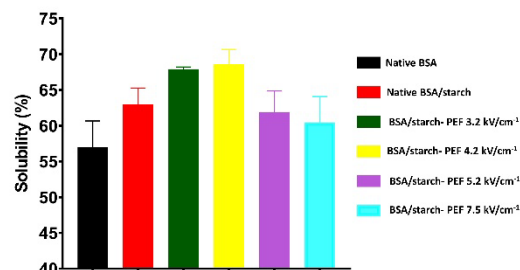


Fig. 2. Effects of PEF on the protein solubility of BSA and BSA/starch conjugates.

References

1. Taha, A. et al. *Trends Food Sci. Technol.* **105**, 363–377 (2020).
2. Taha, A. et al. *Ultrason. Sonochem.* **49**, 283–293 (2018).
3. Geng, M. et al. *Food Hydrocoll.* **123**, 107146 (2022).
4. Li, L. et al. *Ultrason. Sonochem.* **79**, 105762 (2021).

SOURCE APPORTIONMENT OF BLACK CARBON AEROSOL AND ITS DEPOSITION ON TREE FOLIAGE

Daria Pashneva¹, Ieva Uogintė¹, Julija Pauraitė¹, Agnė Minderytė¹, Kristina Plauškaitė¹, Valda Araminienė², Eugenija Farida Dzenajavičienė³, Pierre Sicard⁴, Valda Gudynaitė-Franckevičienė², Iveta Varnagirytė-Kabašinskienė², Nerijus Pedišius³, Egidijus Lemanas³, Tomas Vonžodas³, Steigvilė Byčenkienė¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research

Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: daria.pashneva@ftmc.lt

² Lithuanian Research Centre for Agriculture and Forestry,

Instituto av. 1, Akademija, Kėdainiai distr., Lithuania;

³Lithuanian Energy Institute, Breslaujos str. 3, Kaunas, Lithuania;

⁴ARGANS, 260 route du Pin Montard, Biot, France

Black carbon (BC) has received special attention around the world, for its impact on regional and global climate change and on air quality and public health [1]. Thus, reducing BC emissions could provide climatic and human health benefits in the coming decades. The main sources of BC in urban areas are traffic, residential combustion and industry [2]. In recent years trend may lead to a redistribution of BC sources, as the contribution of BC from residential combustion would increase compared to regulated source sectors such as engine and industrial emissions [3]. Urban trees can offer great potential to remove PM and other air pollutants, especially nearby sources, by absorbing gaseous air pollutants through their stomata and trapping PM on the leaf surface [4].

The purpose of the study is to consider the potential impact of urban trees on the removal of BC by common spruce and birch, as well as on the formation of BC, mass concentration and distribution of sources. The aethalometer (A Magee Scientific Company Aethalometer model AE31) provided continuous real-time measurements of BC mass concentration. Transmission electron microscopy (Tecnai G2 F20 X-TWIN, resolution 0.25-0.102 nm) in combination with energy scattering X-ray spectroscopy (EDX) was used to characterize and obtain detailed information on the morphology, size, and elemental composition of individual aerosol particles deposited on leaf and needle.

This study showed a significant contribution of transport (54%) and combustion of firewood and agrobiomass to BC emissions during the warm season in the urban background zone from June to October 2020 (Fig. 1). Analysis of modern and old heating systems has shown that BC emissions are significantly higher in older systems. The highest emissions per kg of fuel burned were caused by birch fuelwood (about 5.00 mg/kg fuel), and the lowest were from mixed wood pellets (average 0.94 mg/kg fuel). Particles of BC aerosol as a result of the condensation mechanism during combustion were found in all samples of

leaves (drooping birch) and needles (common spruce). The largest agglomerate of the detected BC particles had a length of 288.5 nm and a width of 220.4 nm. Larger agglomerates were found on the needles of conifers than on deciduous trees, as they form a thicker epicuticular waxy layer and accumulate BC more efficiently. This work was carried out in the framework of the project "Investigation of aerosol black carbon emissions from biomass incineration units and deposition on tree foliage" (RTO Lithuania).

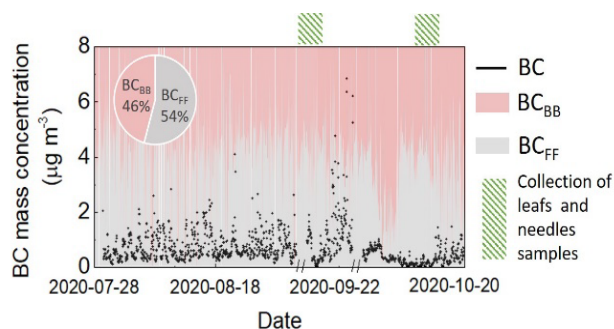


Fig. 1. BC mass concentration and contribution (%) of BC emitted by biomass burning, BCBB, and traffic BCFF during the periods of leaf and needle sampling. Average contribution of BCBB and BCFF during the non-heating season (Circular diagram).

References

- [1] S. K. Pani, S. H. Wang, N. H. Lin, S. Chantara, C. Te Lee, and D. Thepnuan, "Black carbon over an urban atmosphere in northern peninsular Southeast Asia: Characteristics, source apportionment, and associated health risks," *Environ. Pollut.*, vol. 259, Apr. 2020, doi: 10.1016/j.envpol.2019.113871.
- [2] A. Helin *et al.*, "Characteristics and source apportionment of black carbon in the Helsinki metropolitan area, Finland," *Atmos. Environ.*, vol. 190, no. January, pp. 87–98, 2018, doi: 10.1016/j.atmosenv.2018.07.022.
- [3] S. Saarikoski, J. V. Niemi, M. Aurela, L. Pirjola, and A. Kousa, "Sources of black carbon at residential and traffic environments," no. April, pp. 1–27, 2021.
- [4] J. Muvuna *et al.*, "Information Integration in a Smart City System – A Case Study on Air Pollution Removal by Green Infrastructure through a Vehicle Smart Routing System."

INVESTIGATION OF 5-YEARS SUBMICRON ORGANIC AEROSOL COMPOSITION IN RŪGŠTELIŠKIS (LITHUANIA) RURAL ENVIRONMENT

Touqeer Gill¹, Julija Pauraitė¹, Steigvilė Byčenkienė¹ and Kristina Plauškaitė¹

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: touqeer.gill@ftmc.lt

Aerosols play an important role in the atmosphere, therefore, due to their relevant impact on human health and climate change an intensive research on their chemical composition is underway in recent decades. Accordingly, it is crucial to improve our understanding of aerosol chemical composition and formation mechanisms [1].

The Aerosol Chemical Speciation Monitor (ACSM) was used to examine the aerosols main chemical components in the rural environment of Rūgštelis (Lithuania). This study was conducted at the Aukštaitija integrated complex monitoring station throughout a five-year period (2013, 2014, 2016, 2018 and 2019) in three seasons (Spring, Summer, and Autumn). The time series and diurnal trends of organic and inorganic aerosols (OA and IA, respectively) were analyzed. Organic aerosols (OA) had a higher contribution (60 - 80%) to total submicron (diameter less than 1 μm) particulate matter (PM₁) than that of IA (20 - 40%) during all investigated seasons. In comparison to the spring and fall seasons, OA had a higher contribution in the summers of 2013, 2016, and 2019. However, between the years 2014 and 2018, the highest contribution of OA was found during the spring season. When time series were always conducted to the total loading, the mass concentration of OA was shown as dominating (71.91 %) during all 5 years (Fig 1).

The diurnal patterns of OA and IA were used to define possible day and night aerosol chemistry and sources (Fig 2). In spring (except 2016) OA exhibited higher mass concentration during the morning hours (5-7 h) and lower mass concentration during the afternoon (13-19 h). OA exhibited higher mass concentration during the morning hours (5-7 h) and lower mass concentration throughout the afternoon (13-19 h) in the summers of 2013, 2018 and 2019. In autumn 2018, OA showed higher mass concentration during the night hours (2-7 h) and lower mass concentration during the daytime (12-19 h), but there was no clear diurnal trend in 2013, 2014, and 2016. Diurnal patterns of organic nitrates $\text{NO}_3(\text{Org})$ and inorganic nitrates $\text{NO}_3(\text{Inorg})$ were examined separately. $\text{NO}_3(\text{Org})$ (spring, summer, and autumn). $\text{NO}_3(\text{Inorg})$ in spring presented the same diurnal trends as organic aerosols by varying between the (2-7 h) maximum and (12-19 h) minimum concentrations. Whereas $\text{NO}_3(\text{Inorg})$ during the summer and autumn was not presenting the clear diurnal trend. In the years 2013, 2016, 2018, and 2019, NH_4 did not showed a clear diurnal trend in any of the three seasons. Except in spring 2014, when $\text{NO}_3(\text{Inorg})$ daytime (10-15 h) mass concentrations were higher than nighttime (1-10 h) concentrations.

Ammonium-derived aerosol particles can be produced in the form of NH_4NO_3 and $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, which are produced when HNO_3 and H_2SO_4 are neutralized with NH_3 [2]. In 2018, higher SO_4 mass concentrations were observed during the daytime (12-19 h) compared to the night time (1-6 h). The formation of SO_4 derived aerosol was likely occurring by the oxidation of gaseous precursor SO_2 , followed by the formation of particles by the condensation. The diurnal trend of biomass burning (BB), transportation (TR), and other man-made (MM) emitted organic aerosols were investigated which was not showing clear diurnal pattern. In addition, the acidity (H^+_{Aer}) and stoichiometric neutralization ratio of submicron aerosol particles were calculated and analyzed. This research might lead to a better understanding of atmospheric chemistry on a local and global scale.

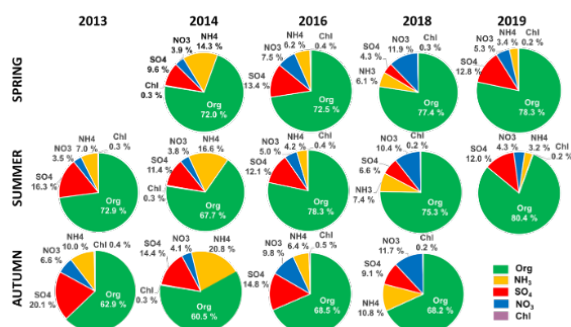


Fig. 1. Main aerosol chemical composition of three seasons (spring, summer and autumn) in the year 2013, 2014, 2016, 2018 and 2019.

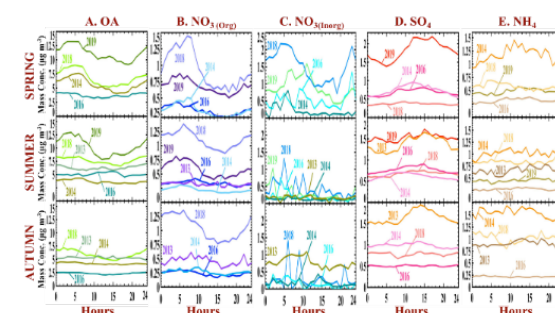


Fig. 2. Five years diurnal trend of (A) OA, (B) $\text{NO}_3(\text{Org})$, (C) $\text{NO}_3(\text{Inorg})$, (D) SO_4 and (E) NH_4 for three seasons (spring, summer and autumn).

References

1. J. Vasilescu, J. Slowik, A. S. H. Prévôt, A. Dandoci, and S. Szidat, "Online Chemical Characterization and Source Identification of Summer and Winter Aerosols in M²," 2020.
2. S. A. Allen, A. Godson, S. M. Ayodeji, S. E. Deborah, and M. Ejike, "Secondary inorganic aerosols : impacts on the global climate system and human health," vol. 3, no. 6, pp. 249-259, 2019.

THE ESTIMATION OF ANTHROPOGENIC RADIONUCLIDES LEVELS IN THE CURONIAN LAGOON DUE TO THE INCREASING ENVIRONMENTAL RISK

Vitaliy Romanenko, Galina Lujaniene, Sergej Šemčuk, Jonas Mažeika

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: vitaliy.romanenko@ftmc.lt

The Curonian Lagoon is a reservoir for the accumulation of water and sediments of the Neman River. This is a semi-closed system, very sensitive to anthropogenic impact and reflecting the radiological state of the entire catchment area of the feeding rivers [1]. In the case of a radioecological emergency at the Belarusian Nuclear Power Plant, the Curonian Lagoon will become the first major barrier for the spreading radionuclides with the waters of the Neris River to the Baltic Sea (Fig 1).

In this work, we tried to characterize the current radioecological state of the Curonian Lagoon due to the increasing environmental risk. In the area of the Curonian Lagoon, the activity of such anthropogenic radionuclides as ^3H , $^{239,240}\text{Pu}$, ^{241}Am , ^{137}Cs was measured in environmental samples. The obtained values

will help in the future to assess the radiological impact of the NPP on the environment of the Curonian Lagoon.

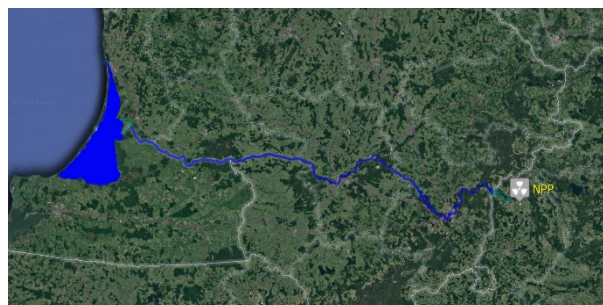


Fig 1. Water connection of the Curonian lagoon with the NPP area

References

1. G.Lujaniene et al., (*J. Environ. Radioact.*, vol. 127, pp. 40-49, 2014).

EVALUATION OF NOVEL CORONAVIRUS SARS-COV-2 NUCLEOCAPSID PROTEIN INTERACTION WITH SPECIFIC ANTIBODIES BY TOTAL INTERNAL REFLECTION ELLIPSOMETRY

Vincentas M. Mačiulis, Ieva Plikusienė, Silvija Juciutė, Almira Ramanavičienė, Arūnas Ramanavičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: vincentas.maciulis@ftmc.lt

Vilniaus Universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

SARS-CoV-2 outbreak started at the end of 2019 and is still a major global public health concern. With 219 million cases and 4.5 million deaths (as of October, 2021) various methods of quick analyses are needed, for either antibody or antigen detection, especially in populations where herd immunity is not yet achieved. SARS-CoV-2 is a virus consisting of 4 structural proteins: envelope, membrane, spike and nucleocapsid. This work focuses on the nucleocapsid protein and its' interaction with specific antibodies [1].

During the infection process the nucleocapsid protein enters the host cell with viral RNA to begin virus particle replication. Nucleocapsid protein is highly immunogenic and can be detected in high concentration during an infection with SARS-CoV-2. Thus, while infected the host produces high amount of specific antibodies targeting spike and nucleocapsid proteins to combat the infection [2].

For the development of SARS-CoV-2 tests for either nucleocapsid antigen or antibody detection, information based on antigen/antibody binding kinetics is needed. To obtain such results various methods are utilised, however, non-destructive, label-free tools are of great importance [3]. Thus, recent attention is directed on the application of optical methods. One of such methods is spectroscopic ellipsometry, in total internal reflection mode (TIRE). Using TIRE, spectroscopic ellipsometry is combined with surface plasmon resonance effect to achieve high sensitivity. Due to, spectroscopic ellipsometry registering two parameters Ψ (light intensity amplitude) and Δ (light phase shift after reflection) simultaneously it is reported to be more accurate in detecting mass changes in the solid/liquid interface than commercial SPR, where only light intensity is registered. Thus, TIRE can be successfully applied for antigen/antibody affinity interaction evaluation [4].

In the presented work, we have evaluated the SARS-CoV-2 nucleocapsid protein interaction with specific antibodies isolated from immunized mice using TIRE method. Calculations of steric factor concluded that the complex formation requires strict orientation parameters. A mathematical model was applied to calculate rate of association, dissociation and affinity constants. Additionally, thermodynamic parameters of antigen/antibody complex formation were evaluated.

References

- [1] R. Lu *et al.*, "Genomic characterisation and epidemiology of 2019 novel coronavirus: implications for virus origins and receptor binding," *Lancet*, vol. 395, no. 10224, pp. 565–574, Feb. 2020, doi: 10.1016/S0140-6736(20)30251-8.
- [2] Y. Cong *et al.*, "Nucleocapsid Protein Recruitment to Replication-Transcription Complexes Plays a Crucial Role in Coronaviral Life Cycle," *J. Virol.*, vol. 94, no. 4, pp. 1–21, 2019, doi: 10.1128/jvi.01925-19.
- [3] I. Plikusienė *et al.*, "Total internal reflection ellipsometry for kinetics-based assessment of bovine serum albumin immobilization on ZnO nanowires," *J. Mater. Chem. C*, vol. 9, no. 4, pp. 1345–1352, 2021, doi: 10.1039/d0tc05193d.
- [4] I. Plikusienė *et al.*, "Evaluation of kinetics and thermodynamics of interaction between immobilized SARS-CoV-2 nucleoprotein and specific antibodies by total internal reflection ellipsometry," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 594, pp. 195–203, 2021, doi: 10.1016/j.jcis.2021.02.100.

MEDŽIAGINIŲ KAUKIŲ FILTRAVIMO EFEKTYVUMO NUSTATYMAS

Kamilė Kandrotaitė^{1,2}, Vadimas Dudoitis², Ieva Uogintė², Kristina Plauškaitė-Šukienė²,
Francis Pope³, Peter Strizak⁴, Steigvilė Byčenkienė²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, el. p.: kamile.kandrotaitė@ff.stud.vu.lt

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

³The University of Birmingham, UK 4L.V. Pisarzhevskii Institute of physical chemistry of NAS of Ukraine, Ukraine

Spartus sunkaus ūminio kvėpavimo takų sindromo koronaviruso (angl. SARS-CoV-2) plitimas - iššūkis visuomenės sveikatai. Staigiai išaugęs medicininių kaukių ir veido respiratorių, filtruojančių aerozolio daleles, poreikis sukėlė jų trūkumą tiekimui, todėl buvo rekomenduojama juos naudoti tik sveikatos priežiūros įstaigose. Dėl šios priežasties WHO (angl. World Health Organization,) pasiūlė visuomeninėse vietose naudoti nemedicines veido kaukes pagamintas iš įvairaus audinio, siekiant sumažinti SARS-CoV-2 perdavimą oro lašeline būdu. Nors gaminių, naudojamų kvėpavimo takų apsaugai, saugumas kiekviename kokybės standarte nagrinėjamas ir reglamentuojamas skirtingai, tačiau visuomeninių kaukių kokybė gali būti užtikrinta įvertinus dvi pagrindines tekstilės medžiagos savybes: filtravimo efektyvumą (FE) ir slėgio kritimą (ΔP) visame medžiagos plote.

Šiame tyrime buvo remtasi CWA 17553:2020 standartu (angl. CEN workshop agreement), kuris nustato minimalius reikalavimus medžiaginėms kaukėms. Tyrime naudojami tekstilės audiniai buvo klasifikuojami pagal gaminių būdą: austi arba megzti [1]. Daugiasluoksniai ir mišrūs audiniai, arba nežinomos struktūros medžiagos, buvo klasifikuojami kaip kompozitinė medžiaga.

Tyrimui naudotas aerodinaminis aerozolio spektrometras (APS). Aerozolio dalelės buvo generuojamos naudojant NaCl 2% tirpalą. Slėgio kritimas (ΔP) buvo matuojamas metodu, aprašytu 14683:2019+AC standarte. FE buvo vertinamas taikant aerodinaminio skersmens D_{50} ekvivalentą, kuris nusako, kad 50% tiriamo dydžio dalelių yra nufiltruojama. Mažesnės D_{50} vertės atitinka aukštesnį filtravimo efektyvumą ir atvirkščiai. Iš FE eksperimentų su medicininėmis veido kaukėmis apskaičiuota, kad dviejų tipų kaukių (kaip nurodyta 14683: 2019+AC standarte) ekvivalentinės D_{50} vertės yra $D_{50} < 1,6 \mu\text{m}$ I tipo ir $D_{50} < 1,3 \mu\text{m}$ II tipo kaukėms.

Sujungus ΔP ir FE duomenis, galima įvertinti skirtingų tekstilės gaminių našumą. Audinių tyrimo rezultatai parodė dvi ekstremalias situacijas: (a) mažas slėgio kritimas ir prastas filtravimas; (b) geras filtravimas ir didelis slėgio kritimas. Austų audinių pavyzdžių, kurie galėtų atspindėti šių dviejų kraštutinių tarpinę būseną

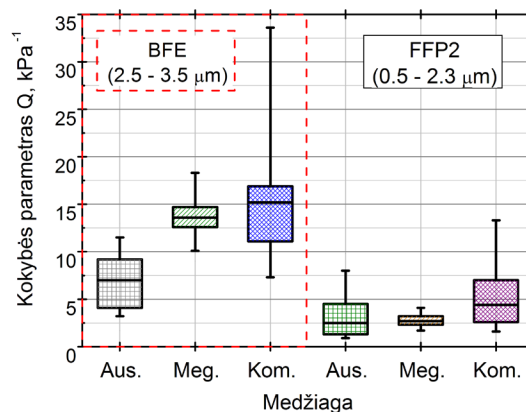
nenustatyta. Koreliacijos tarp medžiagos paviršiaus tankio ir jos ΔP arba FE verčių nenustatyta. Tai rodo, kad austos medžiagos efektyvumą nulemia pynimo modelis ir tankis.

Megztų tekstilės gaminių D_{50} kito nuo 1,7 iki 3,2 μm . Geresnės filtravimo savybės buvo susijusios su didesnėmis ΔP reikšmėmis, t.y. megztos tekstilės D_{50} vertės siekė $1,75 \pm 0,05 \mu\text{m}$. Kompozicinės medžiagos atveju nebuvo nustatytas modelis, kuris galėtų susieti didesnę medžiagos ΔP su geresniu FE.

Tyrimo metu įvertintas kokybės parametras (Q) [2]:

$$Q = \frac{\ln(1 - \frac{FE}{100})}{\Delta P}, \quad (1)$$

kur ΔP išreiškiamas kPa. FE vertės buvo paimitos iš vyraujančio dalelių dydžio diapazono, BFE (2,5–3,5 μm) ir FFP2 (0,5–2,3 μm).



1 pav. Ištirtų bandinių, sugrupavimas pagal medžiagos tipą, ir jų kokybės parametro (Q) įvertinimas dalelių dydžių intervaluose BFE ir FFP2.

Padėka: Lietuvos, Jungtinės Karalystės (JK) ir Ukrainos jungtinės mokslinės veiklos projektas (angl., *Joint United Kingdom, Lithuania and Ukraine project - evaluation of nanoparticles from Coronavirus safety perspective.*) buvo remiamas Jungtinės Karalystės ambasados Lietuvoje.

Literatūra

- [1] H. Gong, and B. Ozgen, *Engineering of High-Performance Textiles, The Textile Institute Book Series*, 107-131 (2018).
- [2] A. Podgórski, A. Bałazy, and L. Gradoń, *Chem. Eng. Sci.* **61**, 6804-6815 (2006).

MICROPLASTIC PARTICLES AT DIFFERENT STAGES OF WASTEWATER TREATMENT PLANT: CHARACTERIZATION AND REMOVAL

Sonata Pleskytė^{1,2}, Ieva Uogintė²

¹Department of Analytical and Environmental Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University
Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius, el. p.: sonata.pleskyte@chgf.stud.vu.lt

²Department of Environmental Research, Center for Physical Sciences and Technology
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: ieva.uoginte@ftmc.lt

In recent years, plastic has become one of the most widely used materials. In 2018 global plastic production reached 359 million tons, in 2019 - 368 million tons [1]. In 2020, the amount of plastic waste significantly increased due to COVID-19 pandemic (approximately 3.4 billion single-use facemasks or face shields are discarded every day) [2]. Plastic pollution is described as one of the most pressing environmental issues.

Plastics can be described as a synthetic or semi-synthetic high molecular weight polymers that are typically obtained by polymerization of monomers. Microplastics (MPs) are particles with a size less than 5 mm and are divided into two main types according to their origin. Primary microplastics are small particles produced for commercial use. Mostly they are found in household products such as: cosmetics, personal care products, cleaners, detergents. Due to chemical, biological and mechanic processes, the larger plastic breaks down into small fragments. This type of microplastic particles is identified as secondary [3].

Research on microplastic effects to human health and aquatic ecosystem are still limited and not fully investigated. However, the newest research represents the negative impact of microplastic particles on the marine and freshwater ecosystem. The extremely small size of MPs allows it to be swallowed by aquatic organisms. In this way, the microplastic can enter the food chain and accumulate in higher-level organisms [4]. In addition, plastic contains wide range of additives (stabilizers, antistatic agents, flame retardants, biocides). When the additives are not chemically bonded to the polymer molecules, they can be easily released from the plastics and cause toxic, carcinogenic or endocrine disrupting properties. Furthermore, microplastics serve as carriers of toxic chemicals, such as heavy metals, and microbial pathogens in the environment [5].

There are many pathways by which microplastic particles from our daily life can be released into the environment. Although wastewater treatment plants (WWTP) demonstrate a high efficiency in removing various sizes organic and

inorganic materials, microplastic particles are so tiny (0,02 -0,5 mm in size) that there is a big challenge to remove them. As a result, part of the microplastics is transferred from wastewater to the marine and ocean circulation system.

This work presents the determination and characterization of microplastics in WWTP. Results review the abundance of microplastic particles in size range from 10 µm to 1000 µm, they characteristics as well as removal efficiency at different stages of wastewater treatment plant. Research on microplastic properties in wastewater treatment plant could be the first step in improving our environment and finding new innovative methods.

Acknowledgement: This research is funded by the European Social Fund under the No 09.3.3-LMT-K-712 "Development of Competences of Scientists, other Researchers and Students through Practical Research Activities" measure. (Grant No. 09.3.3-LMT-K-712-19-0112).



References

1. Plastics Europe - Association of Plastic Manufacturers (Organization) 2020. Plastics – the Facts 2020, *PlasticEurope*:16. Online source: <https://www.plasticseurope.org/en/resources/mark-et-data>.
2. Benson N.U., Bassey D.E., Palanisami T. 2021. COVID pollution: impact of COVID-19 pandemic on global plastic waste footprint, *Heliyon* 7(2): e06343. DOI: 10.1016/j.heliyon.2021.e06343.
3. Ivleva N.P., Wiesheu A.C., Niessner R. 2017. Microplastic in Aquatic Ecosystems, *Angewandte Chemie - International Edition* 56(7): 1720-1739. DOI: 10.1002/anie.201606957.
4. Cole M., Lindeque P., Fileman E., Halsband C., Goodhead R., Moger J., Galloway T.S. 2013. Microplastic ingestion by zooplankton, *Environmental Science and Technology* 47(12): 6646-6655. DOI: 10.1021/es400663f.
5. Hahladakis J.N., Velis C.A., Weber R., Iacovidou E., Purnell P. 2018. An overview of chemical additives present in plastics: Migration, release, fate and environmental impact during their use, disposal and recycling, *Journal of Hazardous Materials* 344: 179-199. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2017.10.014.

TARŠOS AEROZOLIO JUODAJO ANGLIMI LYGIO NUSTATYMAS PĖSTIESIEMS IR DVIRATININKAMS SKIRTOSE VIETOSE VILNIAUS MIESTE

Agnė Minderytė, Steigvilė Byčenkienė

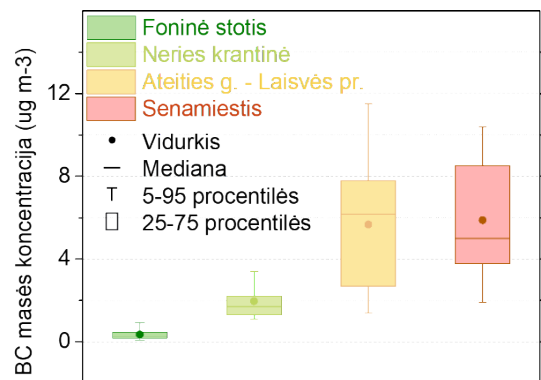
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Aplinkotyros skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: agne.minderyte@ftmc.lt

Oro kokybės užtikrinimas ir klimato kaita yra du aktualiausi XXI amžiaus aplinkosaugos iššūkiai. Šiuo metu 2% sausumos ploto užimantys pasaulio miestai sudaro 70% visų šiltnamio efektą sukeliančių dujų ir kitų teršalų išmetimų į aplinkos orą. Šalių vietos ir nacionalinės valdžios institucijos įgyvendina politiką ir strategijas siekdamos sumažinti antropogeninius išmetimus į aplinkos orą ir pagerinti oro kokybę.

Juodoji anglis (angl. Black Carbon (BC)) yra aerozolio dalelių komponentė, pasižyminti stipriausia šviesos sugertimi, susidaranti degant iškastiniam kurui ir kietajam biokurui nepilno degimo sąlygomis ir galinti atmosferoje išlikti iki dviejų savaičių [1]. Vienas pagrindinių taršos šaltinių yra automobilių keliama tarša, kuri daugiausiai koncentruojasi miestuose ir yra pagrindinė aplinkos oro kokybės problema juose [2]. Lietuvos oro kokybės stebėjimo stotys matuoja pagrindinių teršalų vertes, kuriems galioja aplinkos oro užterštumo normos, nustatytos žmonių sveikatos, ekosistemų ir augmenijos apsaugai. Stočių informacija reprezentuoja bendrus lygius, vyraujančius pasirinktoje vietovėje, tačiau negali atspindėti lygių sinchronizuotų su žmogaus judumo maršrutu mieste. Šio tyrimo metu nagrinėti miesto oro kokybės pokyčiai, t.y. juodosios anglies masės koncentracijos svyravimai, patiriami keliaujant pėsčiomis ir dviračiu Vilniaus mieste bei taršos šaltinių indėlių.

Šiame tyrime naudotas modernus mikro-Aetalometras, skirtas matuoti BC ekvivalentinės masės koncentraciją ir nustatyti taršos lygį mobiliame režime keliaujant pėsčiomis skirtingose miesto aplinkose. Stacionarus juodosios anglies sudėtyje turinčių aerozolio dalelių tyrimai buvo atlikti naudojant 7 bangos

ilgių Aetalometru (Magee Scientific, EA31), Vilniuje, miesto taršos foninį lygį atspindinčioje vietovėje, 2021 m. liepos mėn. Siekiant nustatyti taršos erdvinį pasiskirstymą, buvo nustatyta, kad keliaujant dviračių ir pėsčiųjų takais patiriamas taršos poveikis yra iki 16,6 kartų didesnis nei foninėje miesto aplinkoje. Tai svarbi informacija rengiant darnaus miesto planavimą.



1 pav. Juodosios anglies ekvivalentinės masės koncentracijos pasiskirstymo stačiakampė diagrama skirtingose aplinkose.

Literatūra

1. B. Fu et al., Nat. Clim. Chang., 10 851–855 (2020).
2. P. Thi, M. Tran, J. R. Ngoh, and R. Balasubramanian, Aer. And Air Qua. Res. 20, 341–3570 (2020).

JUODŲJŲ SKYLIŲ AKRECIJOS IR GRĮŽTAMOJO RYŠIO SKAITMENINIO MODELIAVIMO TOBULINIMAS

Matas Tartėnas, Kastytis Zubovas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: matas.tartenas@ftmc.lt

Galaktikų centruose egzistuojančių supermasyvių juodųjų skylių (SMBH) įtaka stebima įvairiuose masteliuose. Praeityje vykusios maitinimosi ir aktyvumo tarpsnių pasekmės stebimos ir po 100 tūkst. ar 1 mln. m. - mūsų Galaktikoje tai ~100 pc rentgeno burbulai ir ~10 kpc Fermi burbulai. Šis ryšys tarp SMBH maitinimo/aktyvumo ir poveikio tarpžvaigždinei terpei (ISM) reiškia, kad svarbu teisingai atsižvelgti į grįžtamojo ryšio laiko skalę, tačiau itin dideli erdviųjų mastelių skirtumai daro tiesioginį šių procesų modeliavimą labai sudėtingu.

Šiame darbe pristatomas subraiškis akrecijos ir jos kuriamo grįžtamojo ryšio aprašymas. Kartu su SMBH sekamas standartinis plonas akrecinis diskas. Toks akrecinio disko modelis leidžia atsikratyti laisvai parenkamo klampos laiko skalės parametro, naudojamo dirbtinai lėtinant akrecijos spartą ir leidžia detaliau sekti akrecinio disko parametrų kitimą laike ir kartu - jo kuriamą grįžtamąjį ryšį.

Pagrindinė α -disko paviršinio tankio evoliucijos lygtis [1]:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = \frac{3}{R_i} \frac{\partial}{\partial R} \left\{ \frac{(R_i - R_g)^2}{\sqrt{R_i} (R_i - 3R_g)} \cdot \frac{\partial}{\partial R} \left(\nu \Sigma R_i^{3/2} \frac{R_i - \frac{1}{3} R_g}{(R_i - R_g)^2} \right) \right\} \quad (1)$$

Gaunama pritaikius potencialą [2]:

$$\phi = \frac{-GM_{BH}}{R_i - R_g} \quad (2)$$

Čia R_i , tai atstumas i-tojo žiedo iki sistemos centro, R_g - Švarcšildo spindulys, o M_{BH} yra SMBH masė. Klampa aprašoma kaip, $\nu = \alpha c_s H$, kur c_s yra garso greitis, H yra disko aukštis, o $\alpha = 0.1$ [3]. Disko evoliucijai taikomas atskiras adaptyvus laiko žingsnių parinkimo kriterijus, sinchronizuojamas su pagrindiniu modeliu ties SMBH laiko žingsniais.

Akrecinio disko šviesis L gaunamas apskaičiavus ir susumavus kiekvieno iš diską sudarančių žiedų šviesį:

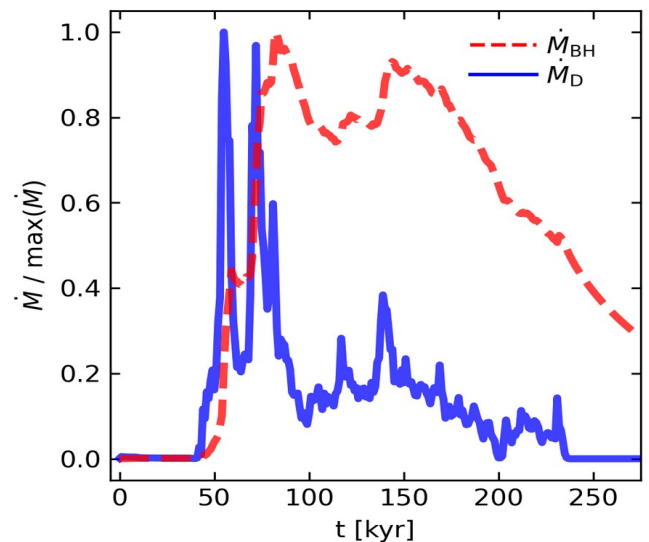
$$L(R_i) = 2 \int_{R_{out}}^{R_{in}} D(R_i) 2\pi R_i dR, \quad (3)$$

kur $D(R_i)$, tai klampioji disipacija paviršiaus vienetui apskaičiuojama pagal:

$$D(R_i) = \frac{3}{8} \frac{GM_{BH} \dot{M}}{\pi R_i^{5/2}} \frac{R_i - R_g}{(R_i - \frac{1}{3} R_g)^2} \cdot \left[\frac{R_i^{3/2}}{R_i - R_g} - \frac{3^{3/2} \sqrt{R_g}}{2} \right] \quad (4)$$

Čia $\dot{M}$, tai juodosios skylės akrecijos sparta. Akrecinis diskas išspinduliuoja apie 6.25% SMBH prisijungtos medžiagos ramybės masės energijos.

Metodą testavome modeliuodami susidūrimą tarp dujų žiedo ir įkrentančio dujų debesies į Paukščių Tako centrą panašioje aplinkoje pasitelkę Gadget-3 [4] hidrodinaminį kodą. Po susidūrimo pradinis toro formos žiedas išardomas; per ~200 tūkst. m. ~30% pradinės dujų masės prijungiama prie akrecinio disko. Akrecinis diskas maitinamas netolygiai, tačiau SMBH pasiekia daug tolygesnis dujų srautas, todėl maitinimas vyksta ilgesnį laiką. Per aktyvumo epizodą į aplinkinę ISM paskleidžiama ~ 10^{56} erg energijos - tai lemia karštų burbulų iškilimą statmenai naujai susiformavusio disko/žiedo plokštumai.



1 pav. Normuotų SMBH (raudona) ir akrecinio disko (mėlyna) maitinimo spartų kitimas laike

Literatūra

1. J. E. Pringle, ARA&A, **19**:137-162, (1981).
2. B. Paczynsky and P. J. Wiita, A&A, **500**, 203-211, (1980).
3. N. I. Shakura and R. A. Sunyaev, A&A, **24**, 337-355, (1973).
4. V. Springel, MNRAS, **364**, 1105-1134, (2005).

INFLUENCE OF PARABOLIC AlGaAs BARRIER ON THE PHOTOLUMINECENCE OF GaAsBi QUANTUM WELLS

Monika Jokubauskaitė, Evelina Dudutienė, Simona Pūkienė, Bronislovas Čechavičius,
Mindaugas Karaliūnas, Renata Butkutė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: monika.jokubauskaite@ftmc.lt

Large bowing and lower temperature dependence of GaAsBi band gap make it suitable for a variety of potential longer wavelength optoelectronic applications, such as infrared light-emitting diodes [1], photodetectors [2], solar cells [3], etc. However, the challenge to grow larger Bi content containing GaAsBi quantum wells (QWs) with the efficient photoluminescence (PL) intensity remains and the optimization of the GaAsBi QWs design is essential.

This work presents a temperature- and excitation- dependent PL study of different GaAsBi/AlGaAs single quantum wells with parabolic barriers (PQW) grown by molecular beam epitaxy technique (see Fig. 1).

It was demonstrated that PL intensity of GaAsBi QWs with rectangular barriers is quite weak at room temperature. Moreover, the emission intensity from QWs grown under similar conditions can vary by several times. Nevertheless, the PL spectra of GaAsBi QWs with parabolic barriers demonstrate up to 50 times higher PL intensity and the enhancement of PL is reproducible within the range of growth parameters. The observed increase in PL intensity for GaAsBi PQW can be explained by more efficient photoexcited carriers trapping within QW. The Gobel *et al.* [4] revealed that trapping efficiency is ~15% higher for QW with parabolic barriers than for the same QW without graded confinement. Furthermore, the temperature-dependent PL study showed the carrier localization within GaAsBi PQW caused by nonhomogeneous Bi distribution and width of QW variation. The localized carriers have lower probability to be captured by the non-radiative recombination centres, that leads to enhanced radiative recombination. Moreover, the carrier localization self-organised nature explains the stability of optical properties over the growth conditions [5].

The comparison of all the investigated GaAsBi SQW with parabolic AlGaAs barriers showed that one of the investigated GaAsBi PQW differ from the others. Sample VGA0145 had the highest PL intensity and behaved differently when the photoexcitation intensity was

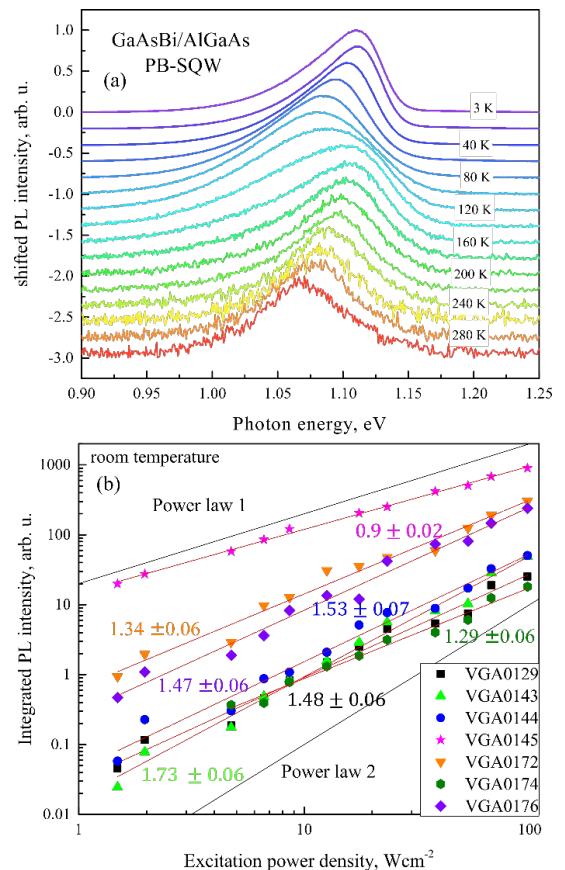


Fig. 1. (a) Temperature-dependent PL spectra of GaAsBi QW with parabolic AlGaAs barriers (sample VGA0144). (b) Excitation-dependent PL spectra of all investigated GaAsBi QW with parabolic AlGaAs barriers at room temperature.

increased. Therefore, sample VGA0145 are studied in detail and the latest findings will be presented in the presentation.

References

1. R. Butkutė, A. Geižutis, V. Pačebutas, B. Čechavičius, V. Bukauskas, R. Kundrotas, P. Ludewig, K. Volz, A. Krotkus, *Electron. Lett.* **50**, 1155-1157 (2014).
2. C.J. Hunter, F. Bastiman, A.R. Richards, J.S. Ng, S.J. Sweeney, J.P.R. David, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **24**, 2191-2194 (2012).
3. R.N. Kini, L. Bhusal, A.J. Ptak, R. Freance, A. Mascarenhas, *J. Appl. Phys.* **106**, 043705 (2009).
4. E.O. Gobel, J. Feldman, G. Peter, *J. Mod. Opt.* **35**, 1965-1977 (1988).
5. S. Pūkienė, M. Karaliūnas, A. Jasinskas, E. Dudutienė, B. Čechavičius, J. Devenson, R. Butkutė, A. Udal, G. Valušis, *Nanotechnology* **30**, 455001 (2019).

GaAsBi KVANTINIŲ DUOBIŲ ATKAITINIMAS MBE REAKTORIUJE

Arnas Pukinskas^{1,2}, Silvija Keraitytė^{1,2}, Nerijus Jurkūnas^{1,3}, Algirdas Jasinskas¹, Simona Pūkienė¹,
Andrius Bičiūnas¹, Bronislovas Čechavičius¹, Virginijus Bukauskas¹, Arnas Naujokaitis¹,
Martynas Skapas¹ ir Renata Butkutė^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius,
el. p.: arnas.pukinskas@ftmc.lt

²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos Fakultetas, Vilniaus universitetas,
Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

³Optonas Ltd, Savanorių pr. 235, 02300 Vilnius, Lietuva

Naujų medžiagų paieška, funkcionuojančių NIR srityje kambario temperatūroje, yra labai aktuali kuriant naujus prietaisus ir manipuliuojant jų parametrais. Mokslininkai fokusuojasi į aktyviosios terpės matmenų mažinimą, pereidami prie kvantinių reiškinių, kuriuos sukuria kvantiniai dariniai, tokie kaip: kvantinės duobės, kvantiniai taškai, kvantinės vielutės ir t.t. Kvantiniai dariniai leidžia labiau keisti charakteringas savybes pritaikant įvairius technologinius protokolus, pavyzdžiui, keičiant kvantinių duobių geometriją, įterpiant pauzes atomų difuzijai, atliekant kaitinimo procesus skirtus išlyginti sluoksnių sandūros ribas. Be naujų medžiagų paieškos mokslininkai daug fokusuojasi ir į epitaksijos metodikų modifikavimus, kurie leistų lanksčiai kurti funkcines medžiagas ir vykdyti įvairius nanodarinių formavimo efektus.

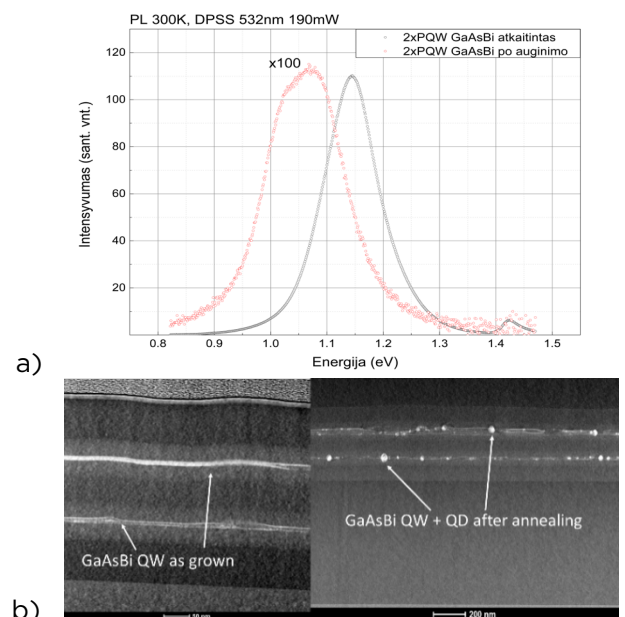
Sprendžiant šias problemas prieš porą dešimtmečių buvo atrasta nauja A3-B5-Bi šeimos junginių grupė pavadinta bismidais. Bismidai yra vieni iš perspektyviausių junginių infraraudonųjų bangų srityje dėl savo unikalios savybės – draustinių energijų tarpo valdymo As pakeičiant Bi. Vos 1% Bi sumažina draustinės energijos juostos plotį net iki 88 meV [1]. Teoriškai pademonstruota, kad pasitelkiant GaAs platformą trinarių GaAsBi junginių draustinių energijų tarpą galima keisti nuo 1,42 eV iki 0,75 eV [2], kas atitinka spektrinę sritį nuo 875 nm iki 1500 nm. Be to šie junginiai pasižymi žymiai silpnesne nei kiti tradiciniai optoelektronikos puslaidininkiai draustinės energijos juostos priklausomybe nuo temperatūros [3]. Taigi, tikėtina, kad jų pagrindu pagaminti lazeriai puikiai veiktų kambario temperatūroje be papildomo aušinimo.

Šio darbo pagrindiniai tikslai yra ištirti atkaitinimo įtaką Bi kvantinių taškų susidarymui bismiduose ir atskleisti susidarymo mechanizmus. Technologinė studija leis ištirti galimybę A3-B5-Bi kvantinius darinius pritaikyti lazerinių diodų ir šviestukų aktyviojoje terpėje.

Kvantinių darinių technologinių sąlygų optimizavimas darbe yra atliekamas naudojant molekulinį pluoštelį epitaksiją (MBE) ir pasitelkiant trinaris bismidinius junginius GaAsBi bei in-situ atkaitinimą kvantinių taškų

formavimui. MBE optimizavimo procese pagrindinis dėmesys yra skiriamas kvantinių barjerų ir duobių sudėties ir geometrijos (duobės ir barjero pločiui, formai) paieškai, įvertinamas kvantinių duobių skaičiaus poveikis optiniams parametrams. Bandiniai charakterizuojami atliekant liuminescencijos (PL) matavimus, paviršiaus morfologinius tyrimus, struktūrinę kokybę vertinama skenuojančiuoju elektronų ir peršviečiamųjų elektronų mikroskopais.

PL rezultatai parodė, kad bandinių emisijų smailės svyruoja 1,035 – 1,18 eV intervale, atkaitinus bandinius, jų intensyvumas išauga 100 kartų. Peršviečiamųjų elektronų mikroskopija įrodė, jog auginant susidaro kvantinės duobės, o po atkaitinimo susiformuoja kvantiniai taškai. Optimalios GaAsBi kvantinių duobių su kvantiniais taškais auginimo sąlygos: padėklo temperatūra 380-430°C, atkaitinimo temperatūra 700-750°C, As/Ga srautų santykis artimas 1.



1 pav. GaAsBi (a) PL spektrai (b) STEM nuotraukos be ir su in-situ atkaitinimu.

Literatūra

1. Francoeur, S. et al., : Appl. Phys. Lett. 82, 3874 (2003).
2. P. Ludewig et al., Applied Physics Letters 102(24), 242115 (2013).
3. J. Liu et al., AIP Advances 7, 115006 (2017).

KVANTINIŲ DUOBIŲ INFRARAUDONOSIOS SRITIES FOTODETEKTORIUS, VEIKIANTIS KAMBARIO TEMPERATŪROJE

Karolis Redeckas, Ignas Grigelionis, Vladas Čižas, Vytautas Jakštas,
Renata Butkutė, Andrius Bičiūnas Linas Minkevičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolis.redeckas@ftmc.lt

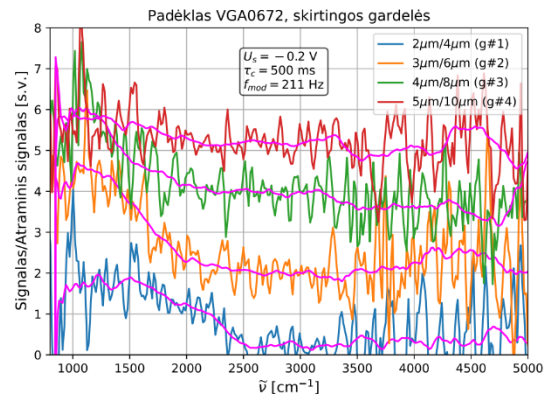
Puslaidininkinių dvimačių struktūrų fizika ir technologija leido sukurti tokius optoelektronikos prietaisus kaip kvantinių duobių infraraudonosios spinduliuotės fotodetektoriai (QWIP) [1]. Puslaidininkinių GaAs/AlGaAs technologija QWIP gamybai yra gerai išnagrinėta sritis, leidžianti sukurti mažesnių kaštų reikalaujančią alternatyvą HgCdTe infraraudonosios spinduliuotės detektoriams [2]. Neretai siekiant pagerinti QWIPs detektorių jautrumą ir reakcijos laiką, jie šaldomi skystu azotu [3]. Tačiau dėl paprastumo ir galimo pritaikymo plačiam naudojimui (gamybinių procesų kontrolė, dujų detekcija), infraraudonosios spinduliuotės detekcija kambario temperatūroje yra pagrindinis tyrimų objektas.

Šiame darbe buvo nagrinėjama FTMC sukurtų skirtingų QWIPs detektorių darbo taško įtaka atsako signalui bei dažninės charakteristikos kambario temperatūroje. Detektoriaus registruotas spektras turėjo atvaizduoti bangų ilgių sritį, kuriose pasireiškia didžiausias jautrumas. Tirtieji detektoriai buvo pagaminti taip, kad jų rezonansinis atsakas būtų 7-10 μm bangos ilgių diapazone (atmosferos langas), leidžianti pritaikyti QWIP detektorių dujų detekcijai [4].

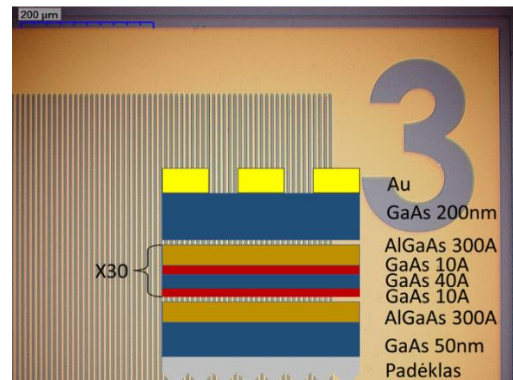
Matavimams buvo naudojamas „Nicolet 8700“ spektrometras, naudojantis absoliučiai juodo kūno spinduliavimą ir Maikelsono interferometrą. Iš spektrometro išeinanti kolimuota spinduliuotė paraboliniu veidrodžiu (f=5 cm) buvo fokusuojama ant QWIP, kuris yra indžiu prijungtas prie metalinio laikiklio geram šilumos nuvedimui. Prieš pasiekiant detektorių spinduliuotė yra mechanškai moduluojama naudojant malūnėlį (sukimosi dažnis 200 Hz). Tokia optinio signalo moduliacija ir įtampas daliklis, sudarytas iš reguliuojamo rezistoriaus ir QWIPs detektoriaus, leido „lock-in“ stiprintuvu išmatuoti sugeneruotą fotosrovę.

Matuotų QWIPs detektorių pagrindinis tarpusavio skirtumas yra viršutinė gardelė-kontaktas. Skirtingi gardelių periodai ir užpilda lemia kitokius difrakcijos kampus infraraudonajai spinduliuotei.

Iš išmatuotų rezultatų (1 pav.) matome, kad 1200 cm⁻¹ dažnio aplinkoje geriausią jautrumą rodo G#3 detektorius, kurį dengia difrakcinė gardelė su 8 μm periodu. Vis dėl to, QWIPs'ų jautrumo smailės 1200cm⁻¹ aplinkoje yra tik nežymiai aukštesnė, nei aplinkinių dažnių.



1 pav. Skirtingų gardelės periodų QWIP detektorių atsakas atitinkamų spinduliuotės dažnių diapazone.



2 pav. QWIP detektoriaus gardelė ir schematiškas jo skersinis pjūvis.

Literatūra

1. Hui Chun Liu, Richard Dudek, Aidong Shen, Emmanuel Dupont, Chunying Song, Zbigniew R. Wasilewski, and Margaret Buchanan "QWIPs beyond FPAs: high-speed room-temperature detectors", Proc. SPIE 4369, Infrared Technology and Applications XXVII, (10 October 2001)
2. H. C. Liu, in Intersubband Transition in Quantum Wells: Physics and Device Applications I, Academic Press, San Diego, Semiconductors and semimetals Vol 62, 2000, ch 3, pp 129-196, edit by H. C. Liu and F. Capasso.
3. G.P. Wang, J.H. Cai , N. Li , W. Jing , L.W. Yang , J.T. Liang, Cryocoolers 14, 2007, edited by S.D. Miller and R.G. Ross, Jr.
4. Z. Han, P. Lin, V. Singh, L. Kimerling, J. Hu, K. Richardson, A. Agarwal, and D. T. H. Tan Appl. Phys. Lett. **108**, 141106 (2016)

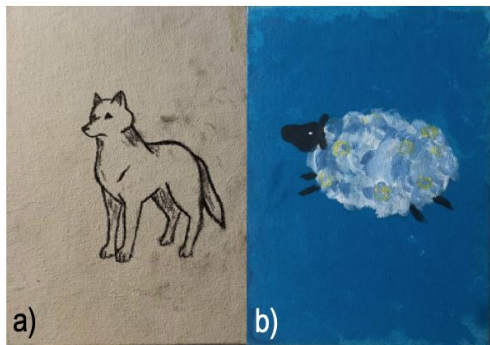
TERAHERCINIO VAIZDINIMO TAIKYMAS MENE IR PRAMONĖJE

Benas Bužinskas, Rusnė Ivaškevičiūtė, Domas Jokubauskis, Linas Minkevičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: benas.buzinskas@ftmc.lt

Šių dienų technologijų vystymasis vyksta eksponentiškai greitai. Kasdien stebint naujausias technologijas, galime atkreipti dėmesį ir į bandymus vis plačiau panaudoti terahercinių (THz) dažnių ruožą (0,1 THz – 10 THz). Pirmieji terahercinės spektroskopijos vaizdinimai buvo atlikti T.S Hartwick [1] ir jo kolegų dar 1976 m. naudojant molekulinį THz lazerį. Nors THz bangos spektre išskirtos tik daug vėliau nei kitos elektromagnetinės bangos, tačiau šios spinduliuotės taikymas yra labai platus. THz bangos gali būti naudojamos apsaugos sistemoms pagerinti, medicinoje nustatyti odos ligoms, prietaisams aptinkantiems maisto defektus ir net mene [2]. Šių bangų savybės gali puikiai pasitarnauti ieškant senų paveikslų autorių arba norint aptikti kitus piešinius, esančius po viršutiniu dažų sluoksniu (senovėje drobės buvo labai brangios ir manoma, kad tapytojai vieną drobę panaudodavo daugiau nei vienam piešiniui.).

Panašus bandymas buvo atliktas ir ankščiau, jį atlikusi C.L.Koch-Dandolo su kolega P.U.Jepsen, spektroskopinį vaizdinimą atliko atspindyje bei panaudojo terahercinę laiko skryso spektroskopiją. Šis metodas yra neinvazinis, galintis iš esmės gauti 3-D duomenis [2].



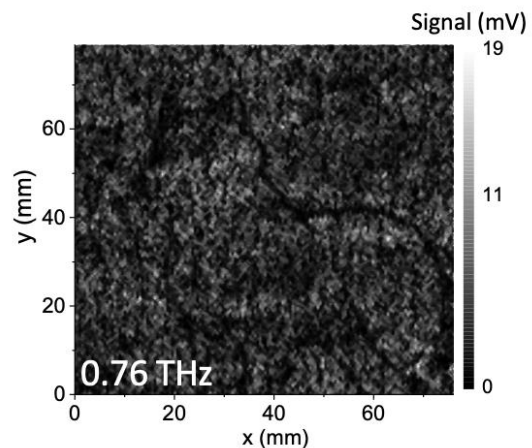
1 pav. Eksperimento metu naudotas bandinys.
a) Pirmo sluoksnio, grafito pieštuku pieštas, vilko atvaizdas. b) Antro sluoksnio, akrilinais dažais pieštas, avies atvaizdas.

THz vaizdinimo tyrimams, pirmiausia ant kartono lapo (storis 3,31 mm) grafito pieštuku buvo nupieštas vilkas (1 pav. a)), ant jo viršaus akrilinais dažais buvo nutapyta avelė. Išorinis piešinys buvo nutapytas taip, kad akimis būtų neįmanoma įžvelgti pieštuku piešto vilko (1 pav. b)). Pirmieji pralaidumo eksperimentai buvo atlikti su 100 GHz šaltiniu ir microbolometrinio [3] detektoriumi taikant signalo registravimą sinchroninės detekcijos metodu (moduliacija 1053 Hz), vaizdinamo taško dydis siekė dydis $0,5 \times 0,5 \text{ mm}^2$, skanavimo greitis

50 mm/s, parabolinių veidrodžių pagalba terahercų spinduliuotę buvo fokusuojama į kiekvieną bandinio tašką atliekant taškinį skanavimą.

Tolimesni eksperimentai buvo atlikti ties FIRL100 lazeriu, kurio spinduliuojamas THz dažnis buvo 0,76 THz. Vieno vaizdo užrašymo trukmė priklauso nuo skanavimo greičio, kurį galime keisti, tačiau kuo mažesnis skanavimo greitis tuo matavimai yra tikslesni, tad vienas skanavimas gali užtrukti iki 5 min, kai bandinio dydis 18 cm x 13 cm.

Dėl grafito ir metalų savybės atspindėti THz elektromagnetines bangas, iš gautų rezultatų, galime puikiai matyti pirminį piešinį (2 pav.). Grafitas, sugeria THz. Pirminis piešinys buvo išryškintas taikant skaitmeninį duomenų apdorojimą. THz vaizdinimo metodai yra tinkami nedestrukcinio metodu identifikuoti skirtingus paveikslų sluoksnius.



2 pav. Paveikslo pirminio sluoksnio vaizdas ties 0,76 THz. Pikselio dydis $0,5 \times 0,2 \text{ mm}^2$, vaizdą sudaro 60040 pikselių.

Literatūra

1. T.S. Hartwich, D.T. Hodges, D.H. Barker, F.B. Foote, Appl. Opt. **15**, 1919-1922, (1976).
2. C.L. Koch Dandolo, P.U. Jepsen, J. Infrared Milim. Terahertz Waves **37**, 198-208 (2016).
3. L. Minkevičius, L. Qi, A. Siemion, D. Jokubauskis, A. Sešek, A. Švigel, J. Tronteli, D. Seliuta, I. Kašalynas, G. Valušis, Appl. Sci. **10**, 3400, (2020).

INVESTIGATION OF 3D NiMo COATINGS DECORATED WITH Au PARTICLES FOR BOROHYDRIDE OXIDATION

Sukomol Barua, A. Balčiūnaitė, F. Višnevskaja, J. Vaičiūnienė,
L. Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, E. Norkus

Department of Catalysis, Center for Physical Sciences and Technology,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania, email: sukomol.barua@ftmc.lt

This work describes a simple proposition for preparing low Au(NiMo)/Ti-based catalysts via chemical and electrochemical methods. At the beginning, NiMo foams were electroplated on the Ti (1x1cm) surface from a bath containing 0.01 M Na₂MoO₄, and 0.01, 0.1, and 0.5 M NiSO₄ in an acidic condition. The electrochemical deposition process was brought off at the current of 0.1 mA and 1 mA for 3 min. The gold crystallites were deposited on the previously prepared NiMo/Ti electrodes by their immersion into an acidic Au-containing solution (pH=1.8) for 10 s. The morphology and composition of the newly prepared catalysts have been investigated via SEM, XRD, EDS, and ICP-OES. The electrocatalytic properties of the prepared

Au(NiMo)/Ti catalysts for sodium borohydride oxidation were investigated by recording cyclic voltammograms in an alkaline medium of 0.05 M NaBH₄ at a different potential scan rate at a temperature of 25 °C. Chronoamperometric measurements of the prepared Au(NiMo)/Ti catalysts were carried out at -0.1 V vs. SCE for 30 min in 0.05 M NaBH₄ at 25 °C.

This proven higher catalytic activity of the prepared Au(NiMo)/Ti catalysts can be examined under some conditions, e.g., pH, temperature, and loadings of Au nanoparticles maintaining their fine and uniform dispersion, which may lead to a promising anodic material for DBFCs.

COMPARISON OF *IN-SITU* AND *EX-SITU* INVESTIGATIONS OF ULTRATHIN SPUTTERED SILVER FILM GROWTH

Alexandr Belosludtsev¹, Anna Sytchkova², Naglis Kyžas¹, Ignas Bitinaitis¹,
Rimantas Simniškis¹, Ramutis Drazdys¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technologies
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: ignas.bitinaitis@ftmc.lt

²Optical Coatings Group, ENEA Casaccia, via Anguillarese 301, Rome 00123, Italy,
email: Anna.Sytchkova@enea.it

In recent study [1], we compare *in-situ* transmittance and plasma emission spectra with *ex-situ* resistance and ellipsometric measurements performed on ultrathin silver films with thicknesses varying from 3 nm through 40 nm and on relatively thick layers up to 100 nm. We show that the transmittance broadband monitoring (BBM) of the growing silver layer allows for *in-situ* reliable estimation of the minimum thickness when the film becomes continuous. Moreover, a proper selection of the monitoring wavelength(s) renders the coalescence and percolation stages of the film growth clearly distinguishable. For our films deposited by magnetron sputtering on fused silica substrates, the minimum thickness when a film becomes continuous was found to be approximately 12 nm. The percolation threshold was determined as approximately 6 nm. The method of selective-wavelength transmittance BBM is practical, intuitive and

hence may represent a useful tool enabling high-precision growth of ultrathin silver layers. Furthermore, we show here for the first time that ellipsometry is sensitive to the metal coalescence development. In particular, the ellipsometric analysis suggests that the percolation of silver sputtered films begins at the top of the growing layer and hence propagates towards the film bottom.

Acknowledgement

This work was supported by the European Social Fund (project No 09.3.3.-LMT-K-712-21-0102) under a grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT).

References

1. A. Belosludtsev, A. Sytchkova, N. Kyžas, I. Bitinaitis, R. Simniškis, R. Drazdys, Vacuum 110669 (2021).
doi.org/10.1016/j.vacuum.2021.110669

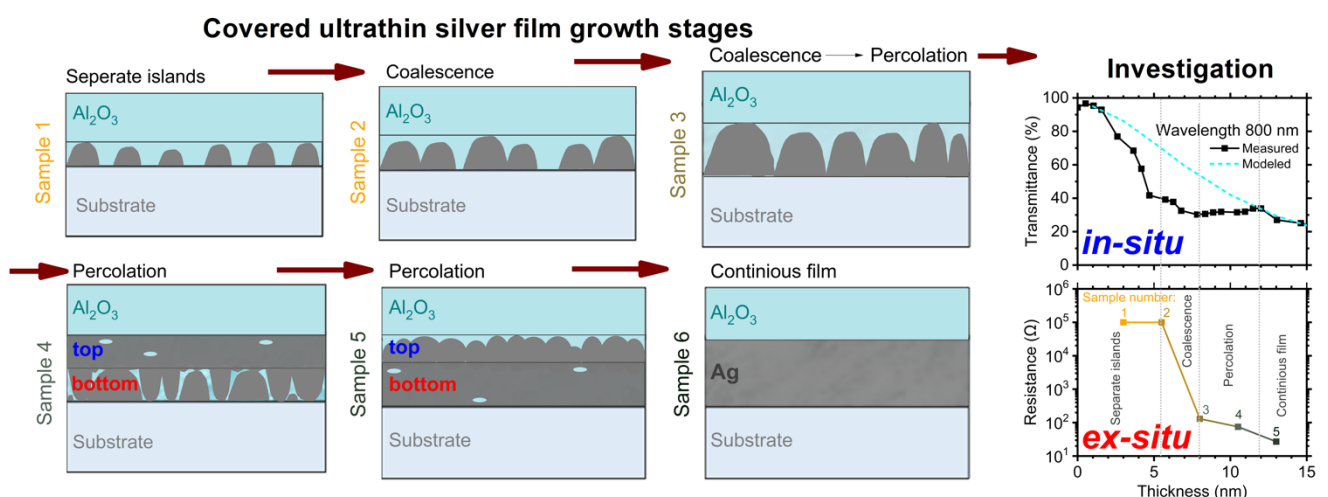


Fig. 1. Schematic of the coating model. Sample 1 – initial seeds; Samples 2 and 3 merging of seeds into bigger particles. Sample 4 – initial percolation as formation of a denser top sub-layer; Sample 5 – percolation proceeds as densification of the bottom sub-layer. The bilayer describing silver film in samples 4 and 5 consists of two effective media. Sample 6 – formation of a continuous silver film, the coating may be considered as a bilayer of flat dense silver and alumina.

SiO₂ PLONŲ SLUOKSNIŲ SINTEZĖ ATOMINIO STORIO NUSODINIMO METODU NAUDOJANT SKIRTINGUS PIRMTAKUS IR OKSIDATORIUS

Mantas Drazdys¹, Darija Astrauskytė¹, Rytis Buzelis¹, Tomas Murauskas², Ramutis Drazdys¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el.p.: mantas.drazdys@ftmc.lt

²Vilniaus universitetas, chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas,
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

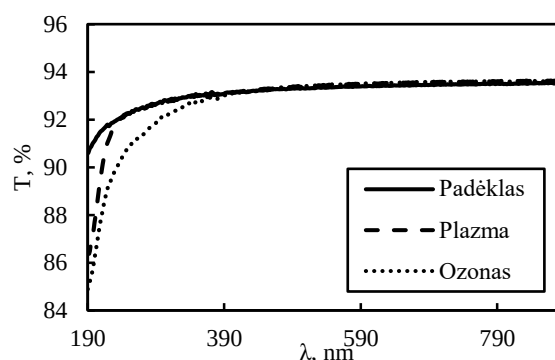
Optinių komponentų, optinių dangų, naudojamų lazeriuose ir lazerinėse sistemose, gamybai iki šiol plačiausiai naudojamos fizinio garų nusodinimo (PVD – angl. k. *physical vapor deposition*) technologijos. Tačiau tobulėjant lazerinėms technologijoms atsiranda poreikis tokių komponentų, kurių gamyba naudojant PVD technologijas neužtikrina reikalaujamų optinių dangų charakteristikų dengiant sudėtingos formos optinius elementus, tokius kaip fotoniniai kristalai, lęšiai, mikrooptiniai komponentai ir kt.

Viena iš alternatyvių technologijų yra atominio storio nusodinimo (ALD – angl. k. *atomic layer deposition*) technologija. ALD yra cheminio garų nusodinimo (CVD – angl. k. *chemical vapor deposition*) technologijos atšaka. Nusodinant plonus sluoksnius ALD metodu, padėklai cikliškai paveikiami dujiniais pirmtakais. Toks cikliškas procesas užtikrina pirmtakų reakcijas tik ant dengiamų paviršių ir leidžia kontroliuoti nusodinamos plėvelės storį angstromo tikslumu [1].

Dielektrinės optinės dangos yra daugiasluoksnės tikslaus storio plonų sluoksnių struktūros, kuriose naudojamos aukšto ir žemo lūžio rodiklių medžiagų kombinacijos. Naudojant ALD metodą nesudėtingų optinių dangų formavimui, naudojamas aliuminio oksidas kaip žemo lūžio rodiklio medžiaga. Terminis aliuminio oksido ALD procesas yra gerai ištirtas ir nereikalauja sudėtingo reaktoriaus dizaino [2]. Tačiau sudėtingesnių optinių dangų formavimui reikalingos medžiagos, pasižyminčios didesniu lūžio rodiklių kontrastu. Dėl žemo lūžio rodiklio ir plačios draustinės juostos silicio (IV) oksidas (SiO₂) yra viena plačiausiai optinių dangų formavimui naudojamų medžiagų.

Šiuo metu SiO₂ nusodinimui ALD metodu plačiausiai naudojami pirmtakai yra aminosilanai o galimi oksidatoriai yra vanduo, ozonas arba deguonies plazma. Tačiau terminis SiO₂ nusodinimo procesas naudojant aminosilanus ir vandenį, pasižymi prasta išeiga ir labai mažu sluoksnio augimo greičiu [3]. Dėl šios priežasties SiO₂ nusodinimui dažniausiai naudojami deguonies plazma arba ozonas [4].

Šiame darbe buvo tiriami ALD metodu nusodinti SiO₂ sluoksniai naudojant du pirmtakus – tris(dimetilamino)-silanas (TDMAS) ir bis(diethylamino)silanas (BDEAS). Oksidavimui buvo naudojami ozonas arba deguonies plazma. Buvo analizuojami SiO₂ plonų sluoksnių, suformuotų naudojant skirtingus nusodinimo technologinius parametrus, optinio pralaidumo spektrai (1 pav.)



1 pav. SiO₂ plonų sluoksnių, nusodintų naudojant skirtingus oksidatorius, pralaidumo spektrai.

Optiniai nuostoliai UV spektriniame diapazone yra geras indikatorius plonų sluoksnių kokybei įvertinti. Siekiant išsiaiškinti galimas optinių nuostolių priežastis, buvo atlikta plonų sluoksnių cheminės sudėties ir stochiometrijos analizė naudojant rentgeno spindulių fotoelektronų spektroskopiją (XPS – angl. k. *X-ray photoelectron spectroscopy*), paviršiaus šiurkštumo ir morfologijos analizė naudojant atominių jėgų mikroskopiją (AFM – angl. k. *atomic force microscopy*) ir skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM – angl. k. *scanning electron microscopy*), atlikti pažaidos lazerio spinduliuote slenksčio (LIDT – angl. k. *laser induced damage threshold*) matavimai.

Literatūra

1. S. M. George, Chem. Rev. **110**, 111-131 (2010).
2. D. Riihelä, M. Ritala, R. Matero, M. Leskelä, Thin Solid Films **289**, 250-255 (1996).
3. B. B. Burton, S. W. Kang, S. W. Rhee, S. M. George, J. Phys. Chem. **113**, 8249-8257 (2009).
4. K. Pfeiffer, S. Shestaeva, A. Bingel, P. Munzert, L. Ghazaryan, C. van Helvoirt, W. M. M. Kessels, U. T. Sanli, C. Grevent, G. Schütz, M. Putkonen, I. Buchanan, L. Jensen, D. Ristau, A. Tünnermann, A. Szeghalmi, Opt. Mater. Express **6**, 660-670 (2016).

IMPACT OF CESIUM CONCENTRATION ON TRIPLE CATION METAL HALIDE PEROVSKITE PROPERTIES

Kazimieras Petrauskas, Steponas Ašmontas, Aurimas Čerškus, Jonas Gradauskas, Asta Grigučevičienė, Remigijus Juškėnas, Konstantinas Leinartas, Andžej Lučun, Oleksandr Masalskyi, Algirdas Selskis, Algirdas Sužiedėlis, Edmundas Širmulis

Center for Physical Sciences and Technology, Laboratory of Electronic Processes
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: :: kazimieras.petrauskas@ftmc.lt

Metal halide perovskites and their potential for new generation of solar cells, photodetectors and LEDs attract considerable attention in the field of optoelectronics and has been a topic of active research for over a decade. Their excellent band gap tunability, complimented by high absorption in the visible wavelength range combined with great carrier mobility and long diffusion lengths, makes them a great candidate to be used as photoactive layer in both monolithic and tandem solar cells. In this study triple cation perovskite layers of the general form of $\text{Cs}_x(\text{MA}_{0.17}\text{FA}_{0.83})(100-x)\text{Pb}(\text{IO}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$ are analysed, as addition of cesium makes the triple cation perovskite compositions more stable due to lesser amount of phase impurities and decreased processing sensitivity [1].

Influence of cesium concentration on optical transmittance of the layers was investigated in the wavelength range of 300 – 1100 nm. It was found, that changing cesium concentration within the triple cation perovskite layers does not have a noticeable effect for the IR transmittance corresponding to band energy of silicon. However, the beginning of the transmittance slope gets blue-shifted as the amount of Cs increases. Such tendency is also observed in photoluminescence spectra, with peaks shifting from 770 nm down to 750 nm respectively. [2]

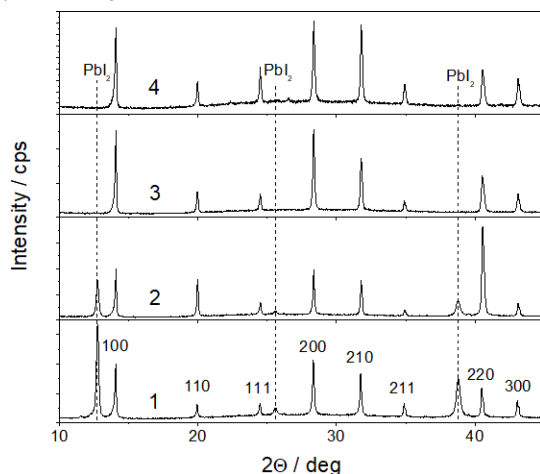


Fig. 1. Perovskite XRD patterns. (1 – 0%, 2 – 5%, 3 – 10%, 4 – 15% of Cs).

XRD patterns show that addition of Cs saturates the crystalline perovskite structure by eliminating phase impurities indicated by absence of PbI_2 in samples with higher cesium concentrations. This agrees with measured PCE graphs, where highest efficiencies are reached in samples with 10% Cs. However, further addition of cesium has a negative impact and the solar cell performance starts to decline.

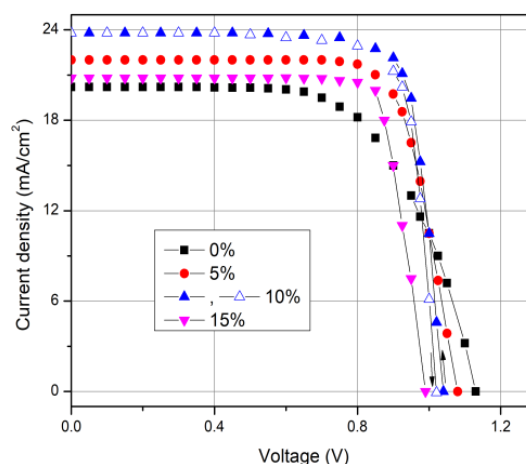


Fig. 2. Current-voltage characteristic of the perovskite solar cell with different cesium concentrations.

References

1. M.Saliba et al. Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy Environ. Sci.* 2016, 9, 1989–1997
2. A. Čerškus, S. Ašmontas, K. Petrauskas, A. Sužiedėlis, J. Gradauskas, A. S. Opanasyuk, B. Vengalis (2020). Photoluminescence properties of hybrid perovskites in solar cells with TiO_2 and $\text{Mg}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{O}$ electron transport layers. *Lithuanian Journal of Physics* Nr. 3

NAŠESNIS LAZERINIS MIKROAPDIRBIMAS PANAUDOJANT MODIFIKUOTUS BESELIO PLUOŠTUS

Laura Tauraitė¹, Ernestas Nacius^{1,2}, Pavel Gotovski^{1,3}, Orestas Ulčinas^{1,2},
Sergej Orlov¹, Vytautas Jukna^{1,4}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: laura.tauraite@ftmc.lt

²Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412 Vilnius

³Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Elektronikos fakultetas, Naugarduko g. 41, LT-03227 Vilnius

⁴Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius

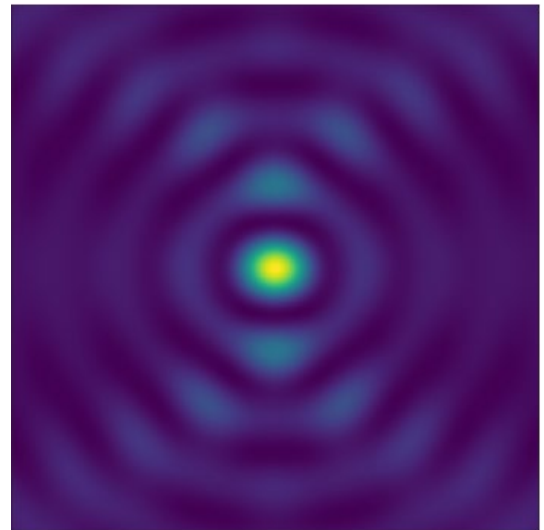
Lazerinių skaidrių terpių apdirbimo technologijų vystymas yra labai patraukli tyrimų sritis siekiant apdirbti bandinius greičiau ir efektyviau. Šioje srityje Beselio-Gauso pluoštai tampa vis populiarešni dėl jiems būdingos ilgos nedifraguojančios zonos. Lyginant su Gauso pluoštu, Beselio-Gauso pluoštu galima daug efektyviau stiklo formuoti mikrokanales vienu šūviu [1] arba raižyti įvairius stiklus net iki kelių milimetrų storio [2].

Įprastai Beselio-Gauso pluoštai yra formuojami eksikonu – kūginiu lęšiu su centre esančia aštria viršūne. Deja, net ir maži nukrypimai nuo tobulo eksikono formos, o ypač užapvalinta viršūnė, lemia didelį generuojamo pluošto kokybės mažėjimą išilgai sklaidimo ašies [3]. Siekiant gerinti generuojamo pluošto kokybę ar generuoti sudėtingesnius pluoštus, refrakcinis eksikonas gali būti pakeičiamas kitais optiniais elementais: difrakciniais optiniais elementais, erdvinio šviesos modulatoriumi (angl. *spatial light modulator*) ar metapaviršiais [4,5]. Šie nauji pluoštų formavimo optiniai elementai suteikia laisvę generuoti pluoštus, kurie turi Beselio-Gauso pluošto sklaidymo ypatumus, bet pakeisti taip, kad turėtų papildomų savybių paspartinančių apdirbimo procesą arba pagerinant kokybę.

Kontroliuojamam Beselio-Gauso pluošto generavimui tinka dar vienas metodas – dvejojo lūžio nanogardelės, įrašytos kvarcinio stiklo tūryje [6]. Kadangi galima kontroliuoti šių lazeriu įrašytų nanogardelių ilgį, bei orientaciją galime keisti pluoštų savybes sukuriant specialų gardelių skirstinį. Tokie elementai dažnai vadinami geometrinės fazės elementais (GFE). Naudojant GFE galima formuoti naujus ir įmantrius Beselio-Gauso pluoštus, pavyzdžiui, su elipsės formos centrinės smaile (1 pav.). Naudojant tokį pluoštą galima efektyviai fabrikuoti kontroliuojamus bei orientuotus mikrojūkimus stiklo.

Šiame darbe yra siekiama skaitmeninio modeliavimo pagalba rasti optimalų intensyvumo

skirstinį Beselio-Gauso pluoštui su elipsės formos centrine smaile. Bus sukurtas naujas, optimalus optinio elemento nanogardelių skirstinys, kurį bus galima naudoti stiklų raižymui.



1 pav. Beselio-Gauso pluošto su elipsės formos centrine smaile intensyvumo skirstinys.

Literatūra

1. J.Baltrukonis, O.Ulčinas, S.Orlov, and V.Jukna „Void and micro-crack generation in transparent materials with high-energy first order vector Bessel beam“, J.Opt.Soc.Am., **B37**, 2121-2127 (2020).
2. R.Meyer, M.Jacquot, R.Giust, J.Safioui, L.Rapp, L.Furfaro, P.-A. Lacourt, J.Dudley and F.Courvoisier „Single shot ultrafast laser processing of high-aspect ratio nanochannels using elliptical Bessel beams“, Optics Letters, **42**, 21 (2017).
3. O.Brzobohaty, T.Čížmar and P.Zemanek „High quality quasi-Bessel beam generated by round-tip axicon“, Opt.Express, **16**, 12688-12700 (2008).
4. A.Vasara, J.Turunen and A.T.Friberg „Realization of general nondiffracting beams with computer-generated holograms“, J.Opt.Soc.Am **A6**, 1748-1754 (1989).
5. D.Lin, P.Han, E.Hasman and M.Brongersma „Dielectric gradient metasurface optical elements“, Science,**345**, 298-302 (2014).
6. Y.Shimotsuma, P.G. Kazansky, J.Qiu and K.Hirao „Self-organized nanogratings in glass irradiated by ultrashort light pulses“, Phys.Rev.Lett. **91**, 247405 (2003).

SERS-ACTIVE SUBSTRATES BASED ON BLACK SILIKON FOR THE DETECTION OF ANALYTES WITH A HIGH POTENTIAL FOR REUSABILITY AND STORAGE

Aliona Klimovich¹, Lena Golubewa^{1,2}, Marina Fetisova³, Ieva Matulaitienė¹, Renata Karpicz¹, Petri Karvinen³, Polina Kuzhir^{2,3}

¹State research institute Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Institute for Nuclear Physics, Belarusian State University, Babrujskaja St. 11, 220006, Minsk, Belarus

³Institute of Photonics, University of Eastern Finland, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu, Finland
aliona.klimovich@ftmc.lt

Surface enhanced Raman spectroscopy (SERS) is a powerful tool to detect and investigate materials in low quantities [1]. The fabrication of stable SERS substrates with high-enhancement factor and reproducibility is still one of the hottest subjects in research. In this study, we present a new generation of SERS-substrates based on black silicon (bSi) uniformly coated with gold (Au) [2] and its cleaning protocol for reusability.

Through all experiment, the 4-mercapto-benzoic acid was used as model compound and for bSi/Au substrate 10 cleaning cycles

were applied (Fig. 1A). It was determined that after ten cleaning cycles the enhancement factor of bSi/Au substrates decreases four times. Storage of the substrate in an air atmosphere leads to decrease of the signal by 1.8% ($C(4\text{-MBA}) = 10^{-3} \text{ M}$, $t_{\text{storage}} = 120 \text{ days}$) (Fig. 1B, inset).

Keywords: SERS-substrate, black silicon, reusability, enhancement factor.

References:

1. J. Langer et al. ACS Nano, **114**, p. 28-117 (2020);
2. L. Golubewa et al. ACS Appl Mater Interfaces **12(45)** p. 50971-50984 (2020).

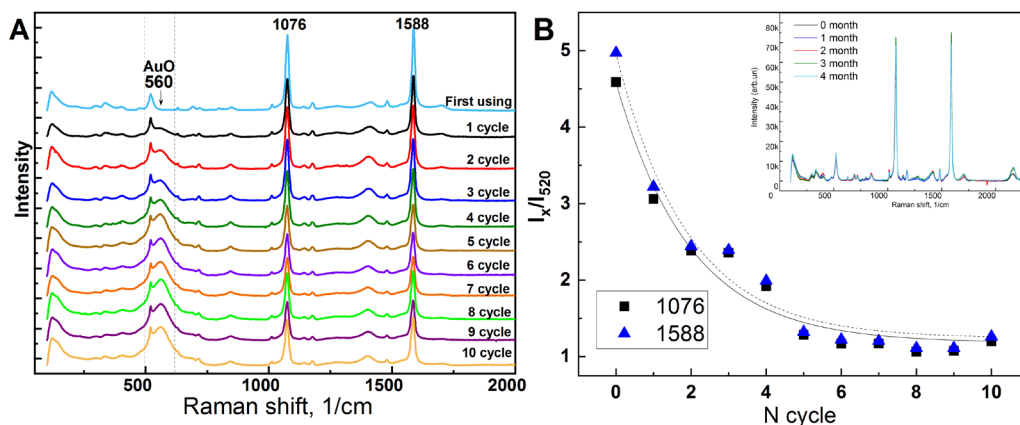


Fig. 1. SERS-spectra of 4-MBA, (A)-10 cycles, (B)-normalized I_{1076} and I_{1588} . Inset - bSi/Au aging.

STABILIJŲ SIEROS IZOTOPŲ SANTYKIO IR RADIOANGLIES METODŲ TAIKYMAI AEROZOLIŲ ŠALTINIŲ CHARAKTERIZAVIMUI

Laurynas Bučinskas, Inga Garbarienė, Justina Šapolaitė, Žilvinas Ežerinskis,
Andrius Garbaras

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: laurynas.bucinskas@ftmc.lt

Atmosferos aerozolio dalelės susidaro dėl įvairių natūralių ir antropogeninių vyksmų. Žmogaus sukeliamas emisijas apima šiluminės jėgainės, transporto priemonės, buitinis šildymas, atliekų ir biomasės deginimas bei kitos pramonės emisijos. Nors radioanglies metodika plačiausiai taikoma archeologijoje, ji taip pat taikoma ir aplinkos moksluose, ypač šaltinių charakterizavimo tyrimuose [1]. Stabiliųjų izotopų ir radioanglies metodų derinys leidžia mums išsamiau atskirti natūralias ir antropogenines aerozolių emisijas [2].

Šio tyrimo tikslas yra sieros ir anglies aerozolių šaltinių charakterizavimas. KD_1 aerozolių dalelių mėginiai buvo renkami Vilniuje, ant Fizinių ir technologijų mokslų centro stogo, nuo 2020 m. lapkričio 11 d. iki 2021 m. kovo 16 d. Miesto aplinkoje antropogeninė tarša yra pagrindinis sulfatinių ir anglingųjų aerozolių šaltinis. Naudojant tik stabilųjų izotopų analizę, dažnai sunku apibūdinti šiuos taršos šaltinius dėl persiklojančių δ verčių intervalų. Tačiau radioanglies analizė leidžia atskirti iškastinį ir biogeninės kilmės kurą, nes iškastiniame kure visos radioaktyvios ^{14}C izotopas yra suskilęs.

Sieros ir anglies stabilūs izotopų matavimai buvo atlikti naudojantis stabilųjų izotopų masės spektrometru, o radioanglies matavimai atlikti naudojant vienos pakopos greitintuvo masės spektrometrą. Išmatuotos $\delta^{34}S$, $\delta^{13}C$ ir ^{14}C buvo lyginamos su oro monitoringo duomenimis ir atgalinėmis oro masių pernašos trajektorijų modeliais.

Darbo metu išmatuota, jog atmosferos aerozolio $\delta^{34}S$ vertės skirtingais laikotarpiais kito ruože nuo 1,7 ‰ iki 6,5 ‰ su vidutine 3,5 ‰ verte, o $\delta^{13}C$ vertės kito nuo -26,7 ‰ iki -25,7 ‰ su vidutine -26,2 ‰ verte. Per visą mėginių ėmimo laikotarpį pagrindinis aerozolio anglies šaltinis buvo biogeninės kilmės frakcija su vidutine 72,5 %. Anglies emisijų frakcija svyravo plačiame intervale nuo 7 % iki 32 % su vidutine 19 % verte. Nustatyta, jog vietiniai taršos šaltiniai pasižymėjo mažesne, o tolimieji – didesne $\delta^{34}S$ verte. Toks stabilųjų izotopų ir radioanglies analizės metodų derinys leidžia išsamiai apibūdinti sieros ir anglies aerozolių taršos šaltinius.

Literatūra

1. Y. L. Zhang *et al.*, „On the isolation of OC and EC and the optimal strategy of radiocarbon-based source apportionment of carbonaceous aerosols“, *Atmos. Chem. Phys.*, 2012.
2. I. Garbarienė *et al.*, „Origin identification of carbonaceous aerosol particles by carbon isotope ratio analysis“, *Aerosol Air Qual. Res.*, t. 16, nr. 6, p. 1356–1365, 2016.

DEVELOPMENT OF ELECTROCHEMISTRY-DRIVEN BIOSENSING METHODS FOR DETERMINING ANTIBODIES AGAINST SARS-CoV-2 PROTEIN

Maryia Drobysh¹, Viktorija Liustrovaitė², Alma Ručinskienė³, Ieva Plikusienė^{1,2}, Almira Ramanavičienė², Urtė Samukaitė-Bubnienė^{1,2}, Roman Viter⁴, Chien-Fu Chen⁵, Arūnas Ramanavičius^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Functional Materials and Electronics, Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius email: maryia.drobysh@ftmc.lt

²Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko st. 24, LT-03225, Vilnius

³Center for Physical Sciences and Technology, Department of Electrochemical Materials Science, Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius

⁴Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Street 3, LV-1004, Riga, Latvia

⁵Institute of Applied Mechanics, National Taiwan University, 1, Sec. 4, Roosevelt Rd., Da'an Dist., Taipei City 106, Taiwan

The ingestion of severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) into the host organism induces humoral immune responses through the expression of antigen-specific antibodies. SARS-CoV-2 genome encodes four main structural proteins, two of which spike (S) and nucleocapsid (N) generally act as antigens for specific binding to antibodies. Biosensors for antigen-antibody interaction registration (immunosensors) are commonly used for coronavirus disease 2019 (COVID-19) diagnosis. Electrochemistry-based immune-sensors are one of the most prevalent types of sensors due to their rather low cost and simplicity without sacrificing accuracy and sensitivity [1].

Our study aimed to develop an appropriate sensitive electrochemical based biosensor for the detection of antibodies against SARS-CoV-2. Recombinant spike protein of SARS-CoV-2 (SCoV2-rS) was used as an antigen for antibodies (Anti-rS) and as a sensitive element in the biosensor. Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) was chosen as the starting electrochemical approach, as it is a non-destructive method for exploring the interface properties of events happening on modified working surfaces [2].

One of the challenging tasks was to get stable sensitive element by effective immobilisation of the antigen on the working gold (Au) surface. The immobilisation technique used in the optical method for studying SARS-CoV-2 antigen-antibody interactions [3] was chosen as the basis for electrochemical approaches. The technique was centred on the usage of self-assembled monolayer (SAM), namely, 11-mercaptopundecanoic acid (11-MUA). The full immobilisation method included several stages: (1) incubation of the Au electrode for a night in methanol (MeOH) solution of 11-MUA; (2) activation of terminal carboxyl groups of SAM with N-(3-dimethylaminopropyl)-N'-ethylcarbodiimide hydrochloride (EDC) and N-hydroxysuccinimide (NHS); (3) incubation with

SCoV2-rS. Whereupon coupling with Anti-rS was performed.

EIS measurements after each stage revealed correspondences between impedimetric signals and step-by-step modifications of the working surface. We achieved a trend of significant increasing electron-transfer resistance on the key stage of the Anti-rS coupling. However, it has been found that this immobilisation technique is not as effective when applied to other electrochemical techniques, e.g., cyclic voltammetry (CV) showed that formed SAM is tightly packed and blocks the Au surface, thereby significantly complicating the transfer of electrons to the surface and, consequently, making the signal detection on the following SCoV2-rS immobilisation and Anti-rS coupling stages almost impossible. We adapted the immobilisation technique by decreasing SAM density. For this purpose, we reduced incubation time and used the mixture of long-chain COOH-terminated 11-MUA and OH-terminated 6-mercaptop-1-hexanol (6-MCOH) as a spacer [4]. Since the number of terminal COOH-groups of SAM became lower, the concentrations of EDC/NHS were correspondingly decreased. The improved immobilisation technique made it possible to adapt the immunosensor for other electrochemical methods, such as CV and differential pulse voltammetry (DPV). Additionally, the experiment was time optimized with reproducibility improving.

Acknowledgements: This research was conducted under Lithuanian-Latvian-Taiwan project and it has received funding according to agreement No S-LLT-21-3 with Research Council of Lithuania (LMTLT).

References

1. M. Drobysh, A. Ramanaviciene, R. Viter, and A. Ramanavicius, *Micromachines*. **12**(4), 390 (2021).
2. A. Ramanavicius, A. Finkelsteinas, H. Cesiulis, and A. Ramanaviciene, *Bioelectrochemistry*. **79**(1), 11-16 (2010).
3. I. Plikusiene et al., *Colloid Interface Sci.* **594**, 195-203 (2021).
4. Rajesh, V. Sharma, V. K. Tanwar, S. K. Mishra, and A. M. Biradar, *Thin Solid Films*. **519**(3), 1167-1170 (2010).

PLOKŠČIO THz ELEMENTO PAGAMINTO ABLIUOJANT SILICIJ FEMTOSEKUNDINIAIS LAZERINIAIS IMPULSAIS ANALIZĖ

Paulius Kizevičius¹, Ernestas Nacius¹, Sergejus Orlovas¹, Vytautas Jukna^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: paulius.kizevicius@ftmc.lt

²Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius

Plokšti lazerinio pluošto formavimui skirti optiniai elementai įgauna vis didesnę populiarumą. Šie elementai, skirtingai negu tradiciniai, tokie kaip sferiniai lęšiai, yra plonesni, lengvesni, kompaktiškesni, o gamybos lankstumas leidžia kurti ypač didelės skaitinės apertūros lęšius neturinčius aberacijų. Tokie difrakciniai elementai pagerina objektų vaizdinimo raišką ir leidžia lanksčiai kontroliuoti elektromagnetinių bangų pluošto židinio struktūrą. THz diapazono elektromagnetinė spinduliuotė gali būti pritaikoma aptikti įvairias medžiagas dėl jų išskirtinių absorpcijos spektrų būtent šiame diapazone, tačiau iki šiol yra sudėtinga kontroliuoti pluoštus dėl optinių elementų stygiaus. Yra tikimasi, kad galima sėkmingai pritaikyti plokščiosios THz optikos elementus atlikti objektų vaizdinimą, o pasitelkiant Beselio pluoštą pasiekti ir super raišką [1]. Panašų rezultatą galima gauti ir su Airy pluoštais, kurie optinio diapazono mikroskopijoje storų biologinių mėginių vaizdavime pasiekia didelę raišką [2]. Abu šie idealizuoti pluoštai vadinami nedifraguojančiais, nes jų intensyvumas nepriklauso nuo atstumo z . Šio projekto tikslas yra išnagrinėti plokščiosios specialios THz optikos elementų gamybos femtosekundiniais lazeriniais impulsais ypatumus, pagrindinį dėmesį sutelkiant į aberacijas atsirandančias elementuose dėl gamybos ypatumų.

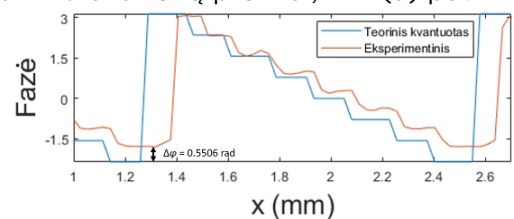
Silicio medžiaga yra skaidri THz spinduliuotei ir turi didelį lūžio rodiklį todėl įmanoma iš šios medžiagos pagaminti optinius elementus. Silicio draustinės juostos tarpas yra apie 1,14 eV, todėl naudojant Light Conversion Pharos lazerio spinduliuotę 1030 nm, kas atitiktų 1,2 eV, galime efektyviai abliuoti šią medžiagą. Siekiant išsiaiškinti tokio gamybos proceso pagamintų elementų kokybę buvo pagaminti 8 ir 4 lygių difrakciniai aksikonai THz spinduliuotei. Pluoštui suteikiamo fazės vėlinimo $\phi(\rho)$ priklausomybė nuo išobliuoto gylio $h(\rho)$ yra:

$$\phi(\rho) = h(\rho)[(n_1 - n_0)k], \quad (1)$$

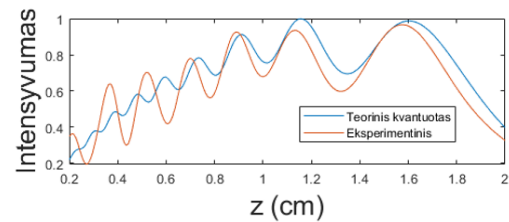
čia k yra laisvosios erdvės bangos skaičius, n_0 ir n_1 yra atitinkamai oro ir silicio lūžio rodikliai. Laiptuotas arba kelių lygių aksikono profilis kvantuojamas į vienodo aukščio pakopas Δ . Kvantuotą aukštį nurodo

$$h_q(\rho) = \text{int}[h(\rho)/\Delta]\Delta, \quad (2)$$

čia $\Delta = 2\pi/N_q$, kur N_q yra laiptelių skaičius. Pasitelkiant aprašytą algoritmą buvo lyginami sumodeliuoti teoriniai ir eksperimentiškai pagaminti aksikonų profiliai, žr. 1 (a) pav.



(a)



(b)

1 pav. (a) 8 lygių priartintas, vieno fazės periodo išilginis teorinio ir eksperimentinio aksikono pjūvis, bei generuojamo pluošto išilginiai intensyvumo pjūviai.

Pastebimi pagaminto elemento nuokrypiai nuo teorinio dėl gamybos ypatumų, tokių kaip pluošto diametras, apsilidimas, medžiagos išmetimas ir k.t. Nustatant šių nuokrypių įtaką kuriamam pluoštui, buvo sukurtas pluošto sklaidimo skaitmeninio modeliavimo įrankis. Per aksikonus perleidžiamas Gauso pluoštas ir stebimi susidariusio Beselio pluošto skersinis ir išilginis intensyvumai. Ašinis generuojamo pluošto intensyvumas pateiktas 1(b) pav. Jame matome, kad eksperimentinis intensyvumo skirstinys yra palyginamas su teoriniu ir tikimasi tik šiek tiek didesnių intensyvumo moduliacijų, kurias galime sumažinti sumažinant pluošto diametrą arba padidinant elemento apertūrą. Šie skaitmeninio modeliavimo intensyvumo skirstiniai bus palyginti su realiais eksperimentiniais rezultatais tolimesniame tyrime.

Literatūra

- [1] L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, G. Valušis, Bessel terahertz imaging with enhanced contrast realized by silicon multi-phase diffractive optics, Optics express 27(25), (2019).
- [2] T. Vettengburg, H. I. Dalgarno, J. Nylk, C. Coll-Lladó, D. E. Ferrier, T. Čižm'ar, F. J. Gunn-Moore, K. Dholakia, Light-sheet microscopy using an airy beam, Nature methods 11(5), (2014).

ITIN MAŽAI ANGLIES TURINČIŲ MEDŽIAGŲ GRAFITIZAVIMAS SU SISTEMA AGE3

Laurynas Butkus, Žilvinas Ežerinskis, Justina Šapolaitė, Inga Garbarienė, Andrius Garbaras, Laurynas Bučinskas, Algirdas Pabedinskas, Vidmantas Remeikis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: laurynas.butkus@ftmc.lt

Greitintuvo masių spektrometrija (angl. Accelerator Mass Spectrometry, AMS) įgalino atlikti radioanglies (^{14}C) analizę itin mažuose bandiniuose, kuriuose anglies kiekis gali neviršyti 1 mg. Didžiausia problema, kuri kyla grafitizuojant mažiau nei $<200\ \mu\text{g C}$ turinčius bandinius su automatizuota grafitizavimo sistema (AGE-3), yra ta, jog esant tokiems anglies kiekiams nepilnai įvyksta grafitizacijos reakcija. Daugelis radioanglies laboratorijų atlieka įvairius patobulinimus siekiant dar labiau sumažinti AMS matavimams reikalingą anglies kiekį net mažiau nei $50\ \mu\text{g C}$ [1]. Norint maksimizuoti gaunamo grafito kiekį yra tobulinamas pats grafitizacijos procesas (pvz., optimizuojamas grafitizavimo sistemos tūris, reakcijos temperatūra, katalizatoriaus kiekiai bei kiti sistemos parametrai) [2].

Tokių mažų bandinių problemą taip pat galima spręsti į mažo anglies kiekio bandinį pridėdant tam tikrą kiekį žinomos ^{14}C koncentracijos medžiagos bei pasinaudojant masės balanso lygtimi apskaičiuoti, kokia radioanglies koncentracija yra bandinyje. Norint įvertinti metodo pritaikomumo ribas kaip bandinys buvo naudojama OXII pamatinė medžiaga (oksalo rūgštis), kurios ^{14}C vertė yra lygi 134,06 pMC. Kaip priedas buvo pasirinkta IAEA-C7 pamatinė medžiaga, kurios ^{14}C vertė yra lygi 49,53 pMC. Grafitizavimas buvo atliekamas naudojantis automatizuota grafitizavimo sistema AGE-3 (Ionplus AG), kurią sudaro grafitizatorius, sujungtas su elementiniu analizatoriumi. AGE-3 sistemoje yra galimybė atskirai sudeginti bandinį ir priedą, o pasinaudojant ceolitine gaudykle sukombinuoti skirtingų deginimų metu susidariusias CO_2 dujas. Tikslūs anglies kiekiai pačiame bandinyje ir priede yra nustatomi elementiniu analizatoriumi.

Šiame tyrime buvo sugrafitizuota 13 bandinių (OXII), kuriuose anglies kiekis svyruoja nuo 5 iki $180\ \mu\text{g}$ ir 11 realių oro filtrų bandinių, kurie 2015 metais buvo išmatuoti Lundo radioanglies (Švedija) bei National Electrostatics Corporation (JAV) laboratorijose tradiciniais metodais [3].

Nustatyta, kad šiuo metodu paruoštų OXII bandinių (kuriuose yra daugiau nei $80\ \mu\text{g C}$) ^{14}C vertės paklaidų ribose atitinka nominalią OXII ^{14}C vertę. Mažiau nei $80\ \mu\text{g C}$ turinčių bandinių radioanglies koncentracijos vertės yra pasislinkusios į mažesnę pusę. Dėl to galima teigti, jog šis metodas yra tinkamas bandiniams, kuriuose yra ne mažiau nei $80\ \mu\text{g C}$. Nagrinėjant oro filtrų bandinių radioanglies analizės rezultatus skirtingais metodais pastebėta, kad didžioji dalis filtrų ^{14}C verčių, kurios buvo išmatuotos naujuoju metodu, paklaidų ribose sutampa su ^{14}C vertėmis, kurios buvo matuojamos Lundo ir National Electrostatics Corporation laboratorijose.

Atliktas tyrimas su pamatinėmis medžiagomis bei realiais bandiniais parodė, jog šis metodas yra puiki alternatyva labai mažai ($80\text{--}200\ \mu\text{g}$) anglies turinčių bandinių paruošimui ^{14}C analizei. Ypatingai jeigu viso bandinio neužtektų standartinei analizei atlikti nemodifikuojant turimos įrangos.

Literatūra / References

1. M. de Rooij, J. van der Plicht, and H. A. J. Meijer. "Sample dilution for AMS ^{14}C analysis of small samples ($30\text{--}150\ \mu\text{g C}$).³" *Radiocarbon* 50.3 (2008): 413-436.
2. J. Genberg et al. "Development of graphitization of μg -sized samples at Lund University." *Radiocarbon* 52.3 (2010): 1270-1276.
3. I. Garbarienė et al. "Origin identification of carbonaceous aerosol particles by carbon isotope ratio analysis." *Aerosol Air Qual. Res.* 16.6 (2016): 1356-1365.

OPTINIŲ AIRY PLUOŠTŲ ERDVINIO VALDYMO METODAI PASITELKUS FAZINIUS ELEMENTUS

Karolis Mundrys, Sergejus Orlovas, Klemensas Laurinavičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius. Pranešėjo el. p.: karolis.mundrys@ftmc.lt

Lazerinis skaidrių terpių mikroapdirbimas yra strategiškai svarbus aukštų technologijų srityje. Šio proceso metu vis dažniau reikalaujami netradiciniai lazeriniai pluoštai, kadangi be impulsinių pluoštų trukmių tampa svarbi ir pluošto struktūra židinio arba linijinio židinio aplinkoje. Vienas iš tokių netradicinių lazerinių pluoštų yra Airy pluoštas. Pagrindinis Airy pluošto privalumas yra tai, kad jo skirstinio padėtį galima valdyti tiek ant sklaidimo ašies (tiesinė inžinerija), tiek pluošto skerspjūvio plokštumoje (pluoštų forma). Ši savybė leidžia sugeneruoti Airy pluoštą, turintį tam tikrus pageidaujamus specifinius parametrus.

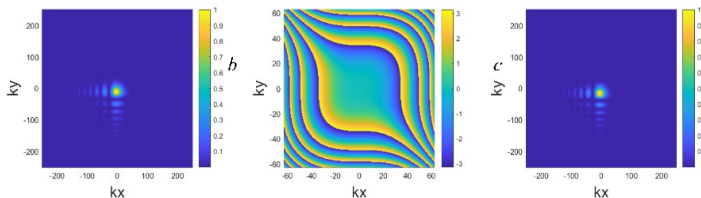
Dar 1979 m. buvo pastebėta, jog laisvą dalelę aprašančios Šriodingerio lygties sprendinys gali turėti bangų paketą, kuris matematiškai apibrėžiamas pasinaudojus Airy funkcija [1]. Toks sprendinys yra aprašomas šraiška:

$$\varphi(s, \xi) = Ai\left(s - \frac{\xi^2}{4} + i a \xi\right) e^{as - \frac{a\xi^2}{2} + i\left(\frac{a^2\xi}{2} - \frac{\xi^3}{12} + \frac{s\xi}{2}\right)}, \quad (1)$$

čia $\varphi(s, \xi)$ yra elektrinio lauko paketo pasiskirstymą nusakanti funkcija, $s = x/x_0$ – bedimensinė skersinė koordinatė, $\xi = z/kx_0^2$ – bedimensinė koordinatė sklaidimo kryptimi, a – slopinimą nusakanti konstanta, Ai žymi Airy funkciją. Furjė transformavus šį bangų paketą gaunama tokia išraiška [2]:

$$\tilde{\varphi}(k_x, k_y) = A_0 e^{-a(k_x^2 + k_y^2)} \exp\left(i \frac{k_x^3 + k_y^3}{3}\right), \quad (2)$$

čia A_0 yra normavimo konstanta. Taigi norint gauti Airy pluoštą reikia Gauso pluoštą moduluoti kubine faze bei atlikti Furjė transformaciją. Rezultatai pateikti žr. 1 pav.

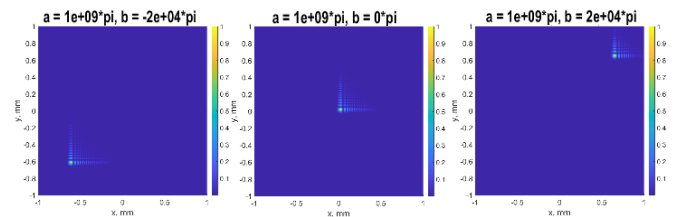


1 pav. Analitiškai apskaičiuoto Airy pluošto elektrinio lauko skirstinys (a). Kubinės fazės kaukė (b). Su kubine fazės kauke skaitmeniškai sugeneruoto Airy pluošto elektrinio lauko skirstinys (c).

Prie kubinės fazinės kaukės pridėjus tiesinį narį, Airy pluoštą galima valdyti skersinėje plokštumoje. Dabar fazinės kaukės išraiška aprašoma taip:

$$T = e^{-i[a(x^3+y^3)+b(x+y)]}, \quad (3)$$

čia a – konstanta nusakanti kubinės fazės periodą, b – konstanta nusakanti tiesinės fazės statumą. Airy pluoštą galima valdyti keičiant b vertę, žr. 2 pav.

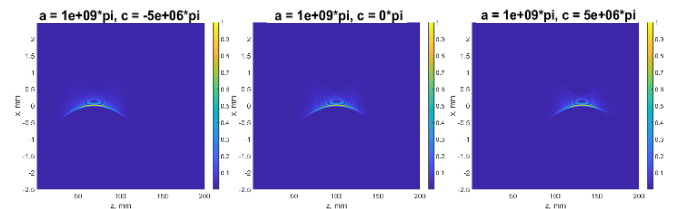


2 pav. $b(x+y)$ nario įtaka Airy pluoštui. Rezultatai pavaizduoti XY plokštumoje. Naudoti parametrai: $a = 400\pi$, $b = -100\pi$; $a = 400\pi$, $b = 0$; $a = 400\pi$, $b = 100\pi$.

Airy pluoštą taip pat galima valdyti ir sklaidimo krypties atžvilgiu, prie kubinės fazinės kaukės pridėjus parabolinį narį. Fazinės kaukės išraiška aprašoma taip:

$$T = e^{-i[a(x^3+y^3)+c(x^2+y^2)]}, \quad (4)$$

čia c – konstanta nusakanti fazės vėlinimo statumą. Airy pluoštą galima valdyti keičiant koeficiento c vertę, žr. 3 pav.



3 pav. $c(x^2+y^2)$ nario įtaka Airy pluoštui. Rezultatai pateikti XZ plokštumoje. Naudoti parametrai: $a = 400\pi$, $c = -200\pi$; $a = 400\pi$, $c = 0$; $a = 400\pi$, $c = 200\pi$.

Tokiais metodais galima generuoti nedifraguojantį Airy pluoštą tam tikroje specifinėje erdvėje pagal poreikius. Nedifraguojantys bei erdvėje valdomi Airy pluoštai gali būti pritaikomi įvairiose srityse kaip medžiagų apdirbimas bei vaizdinimas.

Literatūra

- [1] Berry, M. V., & Balazs, N. L. Nonspreading wave packets. American Journal of Physics, 47(3), 264-267. (1979)
- [2] Wei, Bing-Yan, et al. Polarization-controllable Airy beams generated via a photoaligned directorvariant liquid crystal mask. Scientific reports, 5:1: 1-8. (2015)

ELECTRICAL PROPERTIES OF InGaAs TERAHERTZ DETECTORS WITH INTEGRATED DIFFRACTION OPTICS

Adomas Charevičius, Domas Jokubauskis, Renata Butkutė,
Vytautas Jakštas and Linas Minkevičius

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania, email: adomas.charevicius@ff.stud.vu.lt

Terahertz (THz) spectral range detection is still a novel area in physics with one of the main issues being optimizing for noise origin detection, manufacturing performant semiconductor detectors, evaluating, minimizing, and understanding their defects [1]. InGaAs is a semiconductor displaying properties suitable for manufacturing diode antennas in THz range.

In this research a detailed study of electrical properties as well as microscopy imaging is done of InP substrates with InGaAs integrated diffraction optics.

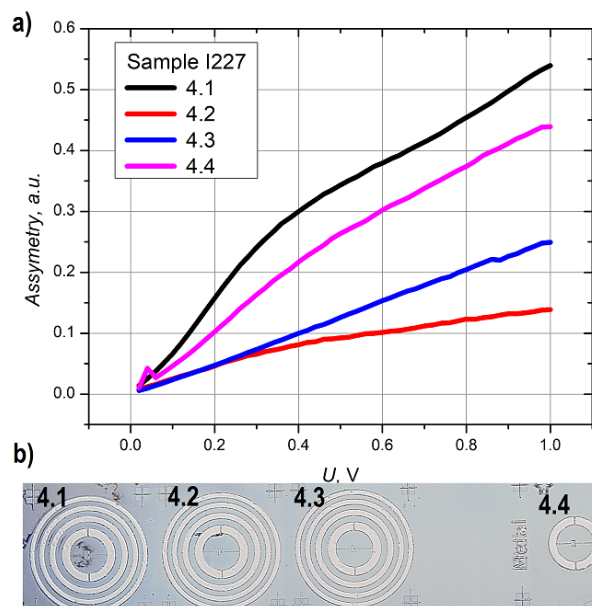


Fig. 1. a) Depicts different displayed asymmetrical properties of InGaAs diodes on InP substrate. Asymmetry measured of 4.1-4.4 active zones with voltage of $U \in [-1;1]$ with 0.02 V step size, while b) Shows the microscopy images of InP wafer with InGaAs diodes.

Figure 1 depicts the measured asymmetry of 4 different InGaAs diodes, grown on isolating InP wafer. The sample I227 had 4 active zones, depicted numerically 4.1 to 4.4. Antennas 4.1-4.3 were formed with concentric rings and 4.4 without. With ideal conditions the field uniformity of sample would be high and low asymmetry would be observed, however, as Fig. 1 depicts, diodes response to bias current varies with I227 4.1 showing asymmetry change up to 60% in electrical potential from 0 to 1 V, while active zone I227 4.2 on same wafer showing an increase of asymmetry of only 13% in electrical potential from 0 to 1V.

To conclude, InGaAs shows a positive electrical response in room temperature and displays varying asymmetrical properties with possibility of manufacturing good quality diodes with integrated diffraction optics of low defects and high IV symmetry for THz sensing and imaging [2].

Keywords: Electrical properties; electrical response; asymmetry; InGaAs diodes; THz detectors

References

1. Palenskis, V.; Minkevičius, L.; Matukas, J.; Jokubauskis, D.; Pralgauskaitė, S.; Seliuta, D.; Čechavičius, B.; Butkutė, R.; Valušis, G. InGaAs Diodes for Terahertz Sensing—Effect of Molecular Beam Epitaxy Growth Conditions. *Sensors* 2018.
2. Minkevičius, L.; Tamošiūnas, V.; Kojelis, M.; Žasinas, E.; Bukauskas, V.; Šetkus, A.; Kašalynas, I.; Butkute, R. Influence of Field Effects on the Performance of InGaAs-Based Terahertz Radiation Detectors. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves* 2017.

DESIGN OF A WIRELESS SENSOR NETWORK FOR TEMPERATURE AND HUMIDITY MONITORING

Shathya Duobiene

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technologies
Savanoriu pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: shathya.kodeeswaran@ftmc.lt

The functional aspect of the Internet of Things (IoT) technologies and applications can take on and transform real-world objects into smart objects and join everything under common infrastructure to control them and provide timely updates. Society needs a complete environmental monitoring system for the quality of life, green economy and pollution control with easy-to-use functionalities and maintenance.

For this, an embedded sensor node was created to collect the environmental monitoring results based on a low-cost asynchronous web server. It is used to monitor the DHT11 sensors associated with the ESP32 Wi-Fi module. The implemented web server receives data from the sensor nodes distributed in laser laboratories, and multiple web clients connected to the same network can access the sensor data. In addition, energy harvesting from electromagnetic fields in the environment could be adapted to power the sensor nodes.

Wireless Sensor Network (WSN), including the defected node detection, was simulated using MATLAB. Figure 1 shows the simulation result of WSN.

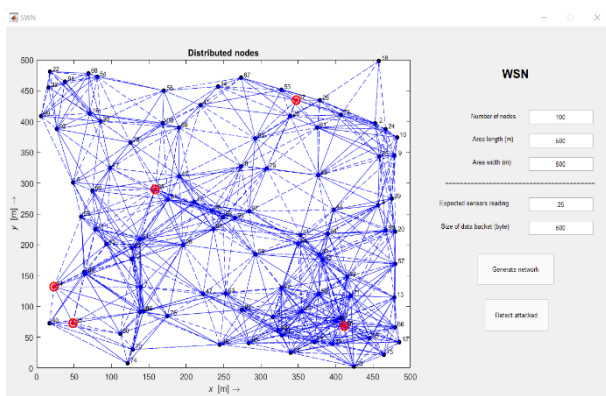


Fig. 1. Wireless sensor network- simulation result.

This model can be used to build a wireless network of an unlimited number of sensors. Machine learning methods are applied to detect incorrectly working (attacked) nodes in WSN.

The simulation results help develop the real sensor nodes, and its network architecture for multiple sensor nodes are shown in Fig. 2.

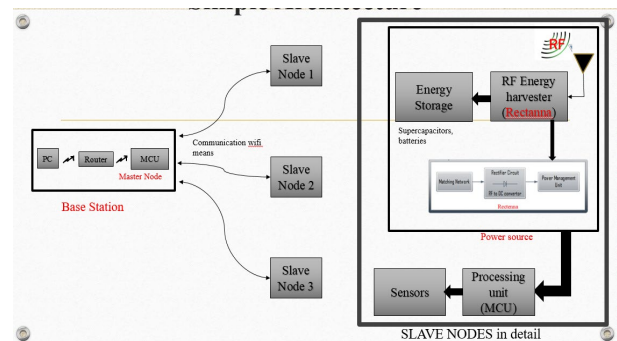


Fig. 2: Sensor node architecture.

Figure 3 shows the temperature and humidity sensor readings obtained in the real-time webserver.

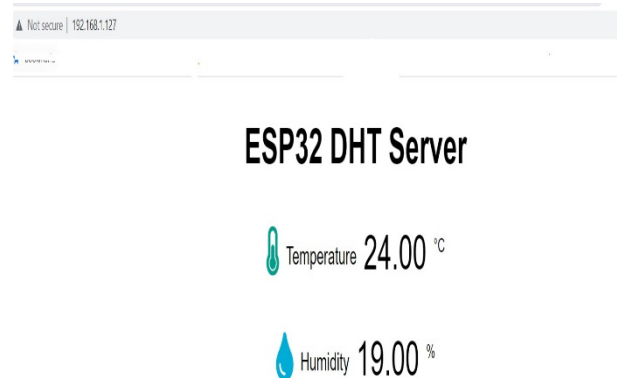


Fig 3: Experimental result.

When fully implemented, this automated system will help monitor the environmental or climatic conditions leading to better living conditions, timely pollution recognition, and taking necessary actions on time.

Keywords— Internet of Things, Webserver, Web clients.

PHOTO-ACTIVE HYDROGEL: AN ALTERNATIVE TO TREAT CHRONIC WOUND INFECTIONS

Nargis Sardar, Arunas Stirke and Wanessa Melo

Department of Functional Materials and Electronics, Center for Physical Sciences and Technology,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania, email: nargis.sardar@ftmc.lt

Chronic wounds infections are one of the greatest challenges in modern health care, causing severe problems to public health, medicine and economic system. [1] These infections most often take the form of three-dimensional biofilm communities, which are notoriously recalcitrant to antibiotics and immune clearance, contributing to the chronic wound state. [2] Extracellular polymeric substances (EPS) is one of the main and first biofilm resistance mechanism, acting as a virulence factor of the microorganism related to chronic wounds infections. [3] Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) has been reported as the main pathogen found in these infections. [4] Thus, there is a great need for alternative therapies for infected chronic wounds, and antimicrobial photodynamic therapy (aPDT) is a promising candidate. aPDT involves the synergistic combination of a photosensitizer (PS), molecular oxygen and visible light of appropriate wavelength in order to produce highly reactive oxygen species (ROS), which leads to the oxidation of several cellular components. [5] Even though this therapy was shown to be efficient in attacking many components of the biofilm, the EPS hampers the PS access to the deeper biofilm cells

promoting the regrow of this microorganism community. Therefore, to overcome this problem, it is necessary to combine the aPDT with a device, as hydrogel, which will deliver the PS to the wound site (deeper layer of biofilm). [6] To evaluate the effect of aPDT/Hydrogel on wound-infected site at immune, molecular and cellular levels, we will perform studies using tissue-engineered human skin equivalent model (TSE). [7,8] During the last decades, TSE is considered as an alternative approach once exhibits comparable structures to the natural human skin, mainly bilayered TSE (epidermal+dermal layer). [7] The aim of this project is to verify the effectiveness of aPDT/hydrogel combination against chronic wound infection by MRSA biofilm on bilayered-TSE model.

References

1. Siddiqui, AR and Bernstein, JM. *Clin. Dermat.* 28, 5 (2010).
2. Duerden, BI. *Clin. Microbial. Rev.* 14, (2001).
3. Franchi, EPLP, Barreira, MRN, Costa, NSLM, Fortaleza, CMCB and Cunha, MRS. *Rev. Soc. Bras. Med. Trop.* 50, 6 (2017).
4. Wu, YK, Cheng, NC. and Cheng, CM, *Trends Biotechnol.* 37, 5 (2019).
5. Melo, WCMA, Germaniené, RC, Šimonis, P and Stirke, A. *Virulence* 12, 1 (2021).
6. Tavakoli, S, and Klar, AS. *Biomolecules* 10, 8 (2020).
7. Yildirim, L, Hobson, D, Lin, ZY, Cui, W, and Zhao, X. *Tissue Engineer. Artif. Org.: Reg. Med., S. Diagno., and Perso. Med.*, 8, (2017).
8. Zhang, Z and Kohn, BBM. *Pharmaceutics* 4, 1 (2012).