



12

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS
MOKSLŲ CENTRO

DOKTORANTŲ IR
JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ
KONFERENCIJA

2022 m. spalio 19-20d.

TEZIŲ RINKINYS



FIZINIŲ IR
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ
CENTRAS

TURINYS

- O1** **Rokas Silkinis.** Luminescence lineshape of the G-center in silicon from ab-initio calculations.
- O2** **Vytautas Žalandauskas.** The Application of the Scan Density Functional to Colour Centres in Diamond.
- O3** **Justas Berškys.** Sferiškai poliarizuoti vektoriniai Beselio pluoštai su skirmionine lauko struktūra.
- O4** **Klemensas Laurinavičius.** Azimutinės ir radialinės poliarizacijos Bessel-X vektoriniai sukuriniai impulsai.
- O5** **Paulius Šlevas.** Optinės adatos formavimas geometriniu fazės elementu neidealiomis sąlygomis.
- O6** **Skirmantas Norkus.** Adityvios gamybos būdu suformuotų $\text{Ti}_6\text{Al}_4\text{V}$ ir ZrO_2 medžiagų padengimas hidrogelinėmis medžiagomis.
- O7** **Lukas Ramalis.** Lazerinio grūdinimo efektas silicio oksido veidrodžiams.
- O8** **Ernestas Nacius.** Lazerio pluošto židinio zonos kontrolė panaudojant tuščiavidurius S-banginių plokštelių pagrindu įrašytus elementus.
- O9** **Augustinas Petrulėnas.** MJ eilės SWIR OPCPA kaupinamas 1.2 ps Yb:YAG lazeriu.
- O10** **Mantas Gaidys.** Našus lazerinis metalų poliravimas ultratrumpųjų impulsų voromis.
- O11** **Ada Steponavičiūtė.** Bimetallic 17-4 PH/CoCrMo Structure Formation by Direct Metal Laser Sintering.
- O12** **Vitalij Fiodorov.** Grafeno formavimas lazeriu polimerų paviršiuje naudojant ultravioletinės – artimos infraraudonosios diapazono bangos ilgio spinduliuotę.
- O13** **Gustas Liaugminas.** Mamyševio regeneratoriumi paremtas impulsų formavimas.
- O14** **Romuald Petkevič.** Aukštos skiriamosios gebos LMD galvutės spausdinimo parametrų įtaka pavienio takelio formavimui.
- O15** **Vytautas Vosylis.** Polikarbonato paviršiaus modifikacija lazeriu, metalo padengimui katalitiniu būdu.
- O16** **Matas Tartėnas.** Akrecinio disko reguliuojamas juodųjų skylių maitinimas ir grįžtamasis ryšys hidrodinaminuose modeliuose.
- O17** **Maryia Drobysh.** Study of electrochemical biosensors for the detection of antibodies against SARS-CoV-2.
- O18** **Laurynas Butkus.** Distributed feedback quantum cascade laser absorption spectroscopy for airborne methane measurements.
- O19** **Laurynas Bučinskas.** Stabiliųjų anglies ir sieros izotopų santykio ir radioanglies metodų taikymai aerozolių taršos šaltinių charakterizavimui.
- O20** **Kamilė Jonynaitė.** Mikrodumblių apdorojimas taikant šaltosios plazmos ir impulsinio elektrinio lauko poveikį.
- O21** **Daria Pashneva.** Indoor-outdoor infiltration of submicron particulate matter in the mechanically ventilated building.



- 
- O22** **Audrė Kalinauskaitė.** Oro taršos šaltinių kilmės nustatymas Vilniaus mieste.
- O23** **Alireza Shahidi.** Technology of 3D ceramic printing.
- O24** **Shathya Duobienė.** Advances in the Design of Wireless Sensor Networks for Environmental Monitoring and its Implementation using SSAIL Technology.
- O25** **Vitaliy Romanenko.** Investigation of the transport of Pu-239,240 and Cs-137 in the water system Curonian Lagoon - Neman River.
- O26** **Touqeer Gill.** Evaluation of the Aerosol Chemical Composition at Two Manila mega-city sites, Philippines.
- O27** **Mykola Koliada.** Enhancement of Room-Temperature Low-Field Magnetoresistance in Nanostructured Lanthanum Manganite Films for Magnetic Sensor Applications.
- O28** **Surya Revanth Ayyagari.** Development of silicon based Hybrid multi-phase fresnel lenses for THz frequencies.
- O29** **Daniil Pashnev.** Investigation of Transmission and Emission Spectra of 2D Plasmons in Grating-Gated AlGaIn/GaN Heterostructures at Temperature 80 K.
- O30** **Justinas Jorudas.** Terahertz responsivity of AlGaIn/GaN bow-tie detectors at the temperatures of 295 K and 80 K.
- O31** **Vladislovas Čižas.** Disipacinis parametrinis stiprinimas supergardelėse: silpno signalo stiprinimo ypatumai.
- O32** **Karolis Stašys.** Žematemperatūrinis MPE InAs formavimas ir charakterizavimas.
- O33** **Andrius Kamarauskas.** Multiple Fano Resonances in Periodic Metamaterial Caused by Plasmonic Resonance and Diffraction.
- O34** **Justina Anulytė.** Contribution of surface lattice to the propagation length of strongly coupled Tamm and hybrid surface plasmon polaritons.
- O35** **Julija Petkevičiūtė.** Investigation of electrical and wearing properties of wool fabrics coated with PEDOT: PSS.
- O36** **Kazimieras Petrauskas.** The optoelectronic properties and layer morphology of triple cation metal halide perovskite solar cells.
- O37** **Karolis Adomavičius.** Applications of Full Field Optical Coherence Tomography.
- O38** **Mohamed Abdelkader Fawzy Abdelkader.** Minimized Potentiostats: a Promising Solution for Electrochemical Sensing Applications.
- O39** **Katsiaryna Charniakova.** Effect of ammonium molybdate additive on the morphology and composition of formic acid anodic alumina.
- O40** **Edith Flora Joel.** Two-dimensional composite based on Chitosan-Graphene Oxide assessment of antimicrobial activity.
- O41** **Raman Novikau.** Investigation of the adsorption behaviour of Cs(I) and Co(II) on the muscovite mica clay/graphene oxide/ γ -Fe₂O₃-Fe₃O₄ composite.
- O42** **Audrius Sadaunykas.** Analizių koncentravimo ant dujų chromatografinės kolonėlės pritaikymas matuojant terpenų koncentracijas mėginiuose.

- O43** **Birutė Serapinienė.** Acid Sulphate Solution Additives Impact on Deposited Copper Honeycomb-Like Structures.
- O44** **Vytautas Žutautas.** Characterisation and application of laser induced graphene modified with polyfolate.
- O45** **Nadežda Traškina.** Effective hydrogen evolution suppression in Na-ion aqueous batteries.
- O46** **Gintarė Gečė.** Synthesis and Investigation of Mixed-Polyanion Cathode Materials for Na-Ion Batteries.
- O47** **Jokūbas Preikša.** Semiempirical Model for Predicting Experimental pKa Values of Primary Sulfonamides.
- O48** **Žana Činčienė.** 3D CuNi katalizatoriai modifikuoti Pt nanodalelėmis natrio borohidrido oksidacijai.
- O49** **Paulius Gaigalas.** Histidino įtaka molibdeno disulfido elektrokataliziniam aktyvumui vandenilio išskyrimo reakcijoje.
- O50** **Antanas Nacys.** Skruzdžių rūgšties oksidacijos tyrimas ant Ni ir Cu kietųjų putų.
- O51** **Raimonda Bogužaitė.** Electrochemical Deposition and Modifications of Polypyrrole with Methylene Blue.
- O52** **Lena Golubewa.** Analysis of doxorubicin/graphene quantum dot complex formation using black silicon-based SERS substrate.
- O53** **Kasparas Kižys.** Kamieninių ląstelių tyrimai skenuojančia elektrochemine mikroskopija.
- O54** **Ahmed Taha.** Emulsifying Properties of PEF-treated BSA/Starch Conjugates.
- O55** **Aliona Klimovich.** Human Urotensin II: Surface-Enhanced Raman Spectroscopy of Potentially Induced Changes.
- O56** **Neringa Bakutė.** Mikrotėkmės chipo, skirto ląstelių elektroporacijai, gamybos technologija.
- O57** **Karolina Maleckaitė.** Aukštos klampos tyrimams skirtas raudonai fluorescuojantis BODIPY mikrokampos jutiklis.
- O58** **Vincentas Mindaugas Mačiulis.** SARS-CoV-2 nucleocapsid protein immune complex investigation by combined acoustic and optical methods.
- P1** **Agnė Minderytė.** Aerosolio juodosios anglies šaltinių kilmės nustatymas ir aerosolio dalelių optinės savybės 2021-2022 m.
- P2** **Sonata Pleskytė.** Photocatalytic degradation of microplastic in aqueous environment.
- P3** **Kamilė Kandrotaitė.** Aerosolio dalelių poveikio darbo vietoje įvertinimas.
- P4** **Gytautė Sirgėdaitė.** Magnetito dekoravimas aukso ir sidabro nanodalelėmis.
- P5** **Sukomol Barua.** Three-dimensional Au(NiMo)/Ti catalysts for efficient hydrogen evolution reaction.
- P6** **Greta Gančytė.** Osmosinio šoko poveikis elektroporuotoms *Saccharomyces cerevisiae* ląstelėms.



- 
- P7** **Greta Pilvenytė.** Molecularly Imprinted Polymer-Based Biosensors for Cancer Biomarkers Detection.
- P8** **Darija Astrauskytė.** Plonų sluoksnių formavimas ant mikrostruktūrų paviršių naudojant atominių sluoksnių nusodinimo technologiją,
- P9** **Ignas Bitinaitis.** Sputtered silver film growth investigation.
- P10** **Mantas Drazdys.** ALD procesų stebėjimas ir optimizavimas naudojant optinės emisijos spektroskopiją.
- P11** **Povilas Jurkšaitis.** Modelling of strong coupling between surface plasmon polaritons and protein-dye complex excitons of HSA antibody labeled with Rhodamine101 dye.
- P12** **Dominykas Augulis.** Graphene transfer using a laminator for remote epitaxy of nitrides.
- P13** **Justas Kvedaravičius.** Erdvinių skirstinių pokyčiai kintant empirinių duomenų masteliui.
- P14** **Kernius Vilkevičius.** Pavieniais femtosekundinio lazerio impulsais suformuoti periodiniai aukso mikrogumbeliai, žadinantys hibridinę plazmoninę modą.
- P15** **Rodrigas Liudvinavičius.** Tiesioginis lazeris rašymas didelio mastelio mikro-gumbelių masyvo formavimui.
- P16** **Karolis Stravinskas.** Mechanical Properties Of Selective Laser Sintered Alloys For Aerospace Applications.
- P17** **Arnas Pukinskas.** Bismuto kvantinių taškų formavimas segregacijos metodu.
- P18** **Monika Jokubauskaitė.** Comparison of Single- and Two-Substrate-Temperature Grown GaAsBi/GaAs Multi-Quantum Wells.
- P19** **Vita Petrikaitė.** Bimetalių Au-Ag nanodalelių generavimas iš plonų dangų ant stiklo padėklo naudojant nanosekundinį lazerį.
- P20** **Abdullah Khan.** Personal Exposure and Deposition of Black Carbon on Human Lungs.
- P21** **Deividas Vainauskas.** Plonų sluoksnių cinko oksido dangų formavimas išsukimo (spin-coating) metodu.
- P22** **Karolis Mundrys.** Koherentinio ir nekoherentinio THz vaizdinimo struktūriniais pluoštais palyginimas skaitmeniniame eksperimente.
- P23** **Silvija Keraitytė.** Growth Optimization and Characterization of MQWs based on InGaAs and GaAsBi for VECSELs and NIR sources.
- P24** **Karolis Redeckas.** Quantum Well Infrared Photodetector Operating at Room Temperature.
- P25** **Andrea Zelioli.** Growth of series samples for optimization of MQW MBE parameters.
- P26** **Muhammad Mujahid.** Triple cation perovskite/silicon tandem solar cell.

LUMINESCENCE LINESHAPE OF THE G-CENTER IN SILICON FROM *AB-INITIO* CALCULATIONS

Rokas Silkinis, Lukas Razinkovas, Vytautas Žalandauskas, Audrius Alkauskas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Fundamental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: rokas.silkinis@ftmc.lt

In recent years, quantum technologies have been at the forefront of scientific interest due to a vast array of possible applications in sensing, communications, and computing. Optically-active single point defects in crystals, capable of emitting light as single photons, are of particular interest, which could be used for long-distance exchange of information [1]. The so called G-center, thought to be composed of an interstitial-substitutional carbon pair (C_iC_s) in silicon, is one of such defects [2, 3, 4]. It emits light at telecom wavelengths of 1280 nm (0.969 eV) and is thus a suitable candidate for a telecom-range single-photon source [5].

In this work, we present a theoretical analysis of the luminescence lineshape [6] of the C_iC_s defect in silicon. We performed first-principles density functional theory (DFT) calculations using the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [7] and the strongly-constrained and appropriately-normed (SCAN) meta-GGA [8] exchange-correlation functionals. Currently, our calculated zero-phonon line (ZPL) energies with PBE and SCAN functionals are respectively 0.709 eV and 0.901 eV, which are comparable to the experimental value of 0.969 eV. The calculated lineshapes conform with the experimental results for the G-center, and this reinforces the conclusion that the G-center is indeed the C_iC_s pair.

References

1. W. Redjem, A. Durand, T. Herzig *et al.*, Nat. Electron. **3**, 738 (2020).
2. K. Thonke, H. Klemisch, J. Weber, and R. Sauer, Phys. Rev. B **24**, 5874 (1981).
3. R. B. Capaz, A. Dal Pino, and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **58**, 9845 (1998).
4. P. Udvarhelyi, B. Somogyi, G. Thiering, and A. Gali, Phys. Rev. Lett. **127**, 196402 (2021).
5. C. Chartrand, L. Bergeron, K. J. Morse *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 195201 (2018).
6. L. Razinkovas, M. W. Doherty, N. B. Manson *et al.*, Phys. Rev. B **104**, 045303 (2021).
7. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
8. J. Sun, A. Ruzsinszky, J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. **115**, 036402 (2015).

THE APPLICATION OF SCAN DENSITY FUNCTIONAL TO COLOUR CENTRES IN DIAMOND

Vytautas Žalandauskas, Marek Maciaszek, Lukas Razinkovas,
Rokas Silkinis, Audrius Alkauskas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Fundamental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: vytautas.zalandauskas@ftmc.lt

In last decades, the Kohn-Sham density functional theory (DFT) has become the main tool to investigate the atomic and the electronic structure of solids. While being in principle exact, the theory needs to invoke approximations to the exchange-correlation (XC) contribution to the total energy, as the exact form of this contribution is unknown. Currently, the most popular functionals applied to solids are semilocal functionals based on the generalized-gradient approximation (GGA), and hybrid functionals [1][2]. The drawback of the GGA functionals is the under-estimation of the band gap of semiconductors and insulators. Hybrid functionals provide an improved description of the electronic structure, including the band gap, with at a much increased computational cost.

In 2015, a new semilocal meta-GGA class functional SCAN was introduced [3]. The advantages offered by the SCAN functional are particularly relevant for point defects in solids which are most conveniently modelled using the supercell-approach. However, despite an increasing popularity of the SCAN functional in modeling bulk materials, its application to defects has been scarce so far.

In this work, we benchmarked the SCAN density functional for colour centres in diamond. Our chosen defects were: the nitrogen-vacancy (NV) centre, the silicon-vacancy (SiV) centre, the germanium-vacancy (GeV) centre and the tin-vacancy (SnV) centre. Over the past two decades, these colour centres have gained prominence in various quantum-technological applications, in particular in quantum sensing and quantum communication. Our goal was to compare the parameters computed with the SCAN functional with those obtained using more traditional PBE and HSE functionals. Our results show that SCAN and rSCAN yield significant improvement of the calculated zero-phonon line energies, approaching the accuracy of HSE. Similar improvement is observed in the the calculated parameters of the Jahn-Teller Hamiltonian.

As a result, meta-GGA functionals can be recommended for the study of colour centres in diamond when the application of more accurate functionals is computationally too expensive.

Table 1. Calculated lattice constants a_0 , bulk moduli B and band gaps E_g in diamond.

	a_0 (Å)	B (GPa)	E_g (eV)
PBE	3.572	430	4.12
SCAN	3.554	460	4.56
rSCAN	3.556	456	4.38
r ² SCAN	3.561	452	4.33
HSE	3.546	473	5.34
Expt.	3.567 (3.555)	446	5.48

Table 2. Calculated zero-phonon line energies for negatively-charged colour centres in diamond (in eV).

	NV	SiV	GeV	SnV
PBE	1.69	1.49	1.86	1.85
SCAN	1.87	1.57	2.00	1.97
rSCAN	1.81	1.54	1.95	1.93
r ² SCAN	1.81	1.53	1.94	1.93
HSE	2.00	1.72	2.10	2.11
Expt.	1.95	1.68	2.06	2.00

References

1. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
2. J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003).
3. J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. **115**, 036402 (2015).

SPHERICALLY POLARIZED VECTOR BESSEL VORTEX BEAMS WITH SKYRMIONIC STRUCTURE

Justas Berškys, Sergejus Orlovas

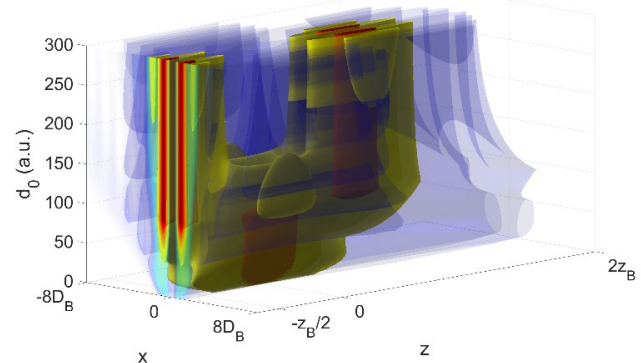
Center for Physical Sciences and Technology, Department of Fundamental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email justas.berskys@ftmc.lt

Laser beam shaping finds more and more applications in the fields of free-space and quantum communications, optical trapping, nano-fabrication, and others. Moreover, the evolving technologies of nano-fabrication or spatial light modulators let us produce not only smaller, but also more accurate and having other superior properties elements for beam shaping. Advances to the process of beam shaping are enabled not only by theoretical and experimental studies on various beam shaping elements and light interactions with matter but also by the introduction of new types of laser beams with novel properties.

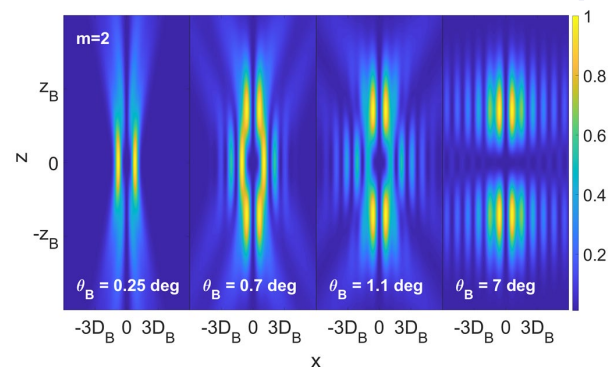
One of the most interesting type of beams in optics are non-diffracting beams [1]. Non-diffracting beams possesses some interesting properties such as beam robustness or the orbital angular momentum. The beam can restructure itself after perturbing its phase or amplitude, it means that after interaction with a nontransparent object the beam regenerates its transverse intensity profile. These beams can also carry a vortex in their phase or polarization. The vortex carrying angular momentum can be transferred to a spherical particle in a way that the particle starts to spin around its own axis or to rotate around the vortex of the beam.

In this work [2] one of the non-diffracting beams Bessel-like vortex beams are theoretically analyzed. This beam differs from known Bessel-Gauss beams in a way that our introduced beam has spherically modified intensity profile because of its polarization structure. Usual vector Bessel-Gaussian beams are either linearly or radially and azimuthally polarized. Here, the Bessel-like beams with a Gaussian envelope are either spherically - radially or meridionally - azimuthally polarized. We will be focusing on beams with a meridional - azimuthal polarization. By controlling topological charge of the beam and Bessel cone angle, we can distinguish few types of intensity distributions that display 'bottle' shape and double needle intensity profile distributions. Another exciting property of such beams is that a quasiparticle topological structure [3] is present in the electric vector field. It means that a field structure when mapped from plane to a sphere reassembles a topological

quasiparticle. Such fields just recently were started to be observed in an optical field domain, usually it was an object of study in magnetics.



1 pav. Distribution of the electric field intensity in the xz -plane for different values of Gaussian beam aperture d_0 .



2 pav. Distribution of the electric field intensity for different Bessel cone half-angles θ_B , the topological charge of the beam is $m=2$.

References

1. Durnin, J.J.J.A. "Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory." *JOSA A* 4.4 (1987): 651-654.
2. Berškys, Justas, and Sergej Orlov. "Spherically polarized vector Bessel vortex beams." *Physical Review A* 105.1 (2022): 013502.
3. Parmee, Christopher D., Mark R. Dennis, and Janne Ruostekoski. "Optical excitations of Skyrmions, knotted solitons, and defects in atoms." *Communications Physics* 5.1 (2022): 1-8.

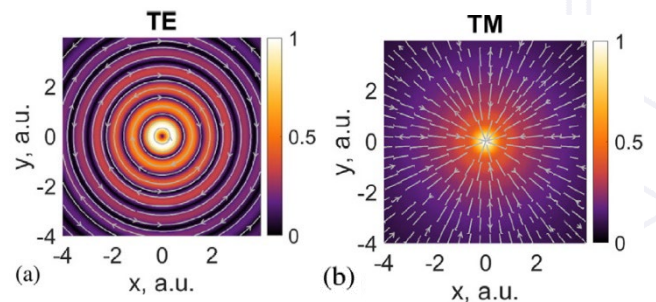
AZIMUTINĖS IR RADIALINĖS POLIARIZACIJOS BESSEI-X VEKTORINIAI SŪKURINIAI IMPULSAI

Klemensas Laurinavičius, Sergejus Orlovas

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

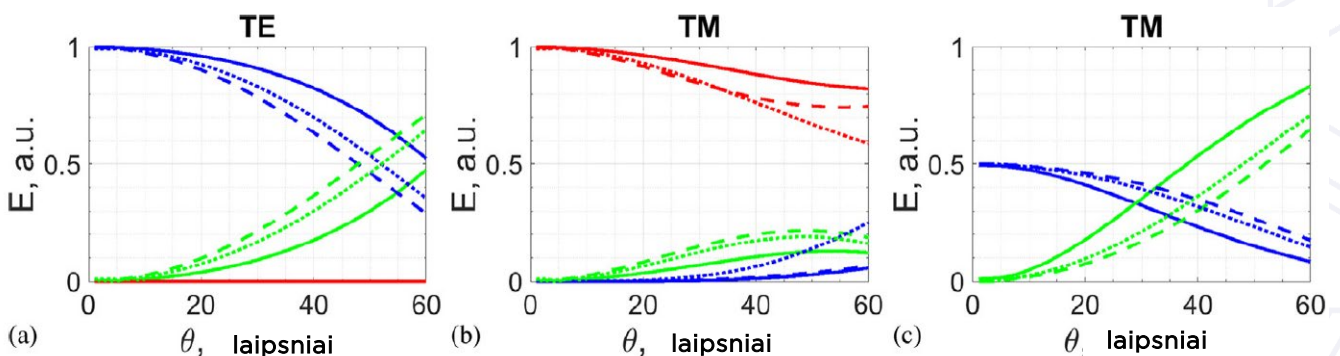
Nedifraguojantys Bessel pluoštai teoriškai pirmą kartą aprašyti 1941 m. Stratton'o [1], o eksperimentiškai gauti 1987 m. [2]. 1992 m. akustikoje buvo aptiktos X bangos, kurių modelis vėliau pradėtas naudoti ir optikoje. X bangos gaunamos kaip skirtingo dažnio ir amplitudžių Beselio pluoštų superpozicija, kurių bangų vektoriai guli ant to paties kūgio kampo. Pastariesiems impulsams sklindant laisvoje erdvėje nepasireiškia difrakcijos ir dispersijos reiškiniai. Tiesinėje dispersinėje terpėje X bangos sklinda nepasireiškiant dispersijai, kai parenkama atitinkama kampinė dispersija. Kai konkretizuojamas impulsą aprašantis dažnių spektras, gaunami Bessel-X impulsai [4]. Įvertinus laikinę priklausomybę iš nedifraguojančių pluoštų gaunami nedifraguojantys impulsai. Vienas plačiausiai naudojamų nedifraguojančių impulsų modelių yra X bangos.

Tai skirtingo dažnio ir amplitudės Beselio pluoštų superpozicija, kai visi pluoštai sklinda tuo pačiu Beselio kūgio kampu.



2 pav. Intensyvumo pasiskirstymai azimutinės (a) ir radialinės (b) poliarizacijos Bessel-X impulsams.

skaitmeniniai modeliavimai įvairiems Bessel kūgio kampams θ . Tiesinės poliarizacijos impulsas turi intensyvią vieną iš skersinių komponentių ir mažiau intensyvią išilginę komponentę, kurios didumas priklauso nuo θ kampo. Išilginės elektrinio lauko komponentės E_z vertės ir skersinių komponentių vertės E_x , E_y , kintant θ kampui parodytos (1 pav.). Kaip matyti, išilginė komponentė didėja kartu su θ kampo



1 pav. Normuotas komponentių intensyvumas skirtingiems Bessel kūgio kampams θ . Tiesiškai poliarizuotai TE modai (a), tiesiškai poliarizuotai TM modai (b), radialinei poliarizacijai (c). Topologiniai krūviai $m=0$ (ištininė linija), $m=1$ (punktyrinė linija), $m=2$ (taškuota linija). E_x komponentė atvaizduota raudonai, E_y komponentė mėlynai, E_z komponentė žaliai. (c) paveiksluke E_x ir E_y komponentės persikloja.

Skersinėje plokštumoje sudaromi Beselio žiedai, kurie yra apriboti Gauso gaubtine. Žiedų skaičius ir matmenys priklauso nuo Beselio kūgio pusės kampo θ ir santykinio spektro pločio Δ . Didėjant θ kampui, skersiniai žiedų matmenys mažėja, o Gauso gaubtinė skersinėje plokštumoje siaurėja. Didėjant santykiniam spektro pločiui Δ , Gauso gaubtinė siaurėja.

Vektoriniams Bessel-X impulsams išvedėme analitines išraiškas trimis atvejais: tiesinei, azimutinei ir radialinei poliarizacijoms. Atlikti

didėjimu, o skersinės atitinkamai mažėja. Tiesinės poliarizacijos TM atveju, prie didesnių kampų θ matome ir E_y komponentę.

Literatūra

1. J. Stratton, Electromagnetic Theory, An IEEE Press classic reissue (Wiley, 2007).
2. J. Durnin, Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory, Journal of the Optical Society of America A 4(4), 651 (1987).
3. P. Saari, H. Sonajalg, Pulsed Bessel beams, Laser Physics 7(1), 32–39 (1997).

OPTINĖS ADATOS FORMAVIMAS GEOMETRINIŲ FAZĖS ELEMENTŲ NEIDEALIOMIS SĄLYGOMIS

Paulius Šlevas^{a,b}, Pavel Gotovski, Sergej Orlov^{a,b}, Orestas Ulčinys^{a,b}, Antanas Urbas^{a,b}

^a Fizinis ir technologijos mokslų centras, fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: paulius.slevas@ftmc.lt

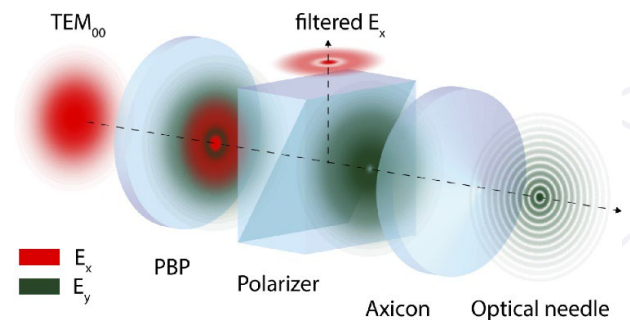
^b Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412, Vilnius

Lazeriniai pluoštai, pasižymintys dideliu išilginių ir skersinių matmenų santykiu, yra paklausūs įvairiose srityse, pavyzdžiui, siaurų, su bangos ilgiu palyginamų struktūrų mikrofabrikavimui. Pluoštai turintys tokią savybę yra vadinami optinėmis adatomis, o Beselio pluoštas yra vienas iš optinės adatos pavyzdžių [1]. Įprastai, Beselio pluoštams formuoti yra naudojamos kūginės prizmės – aksikonai. Tačiau, tokiu būdu suformuoti pluoštai turi ašinio intensyvumo maksimumą, o zonos pradžioje dažnai stebimi nepageidaujami ašinio intensyvumo svyravimai. Naudojant aksikono ir apoziduojančių optinių elementų kombinaciją, galima suformuoti plokščią ašinio intensyvumo pasiskirstymą bei sumažinti intensyvumo osciliacijas.

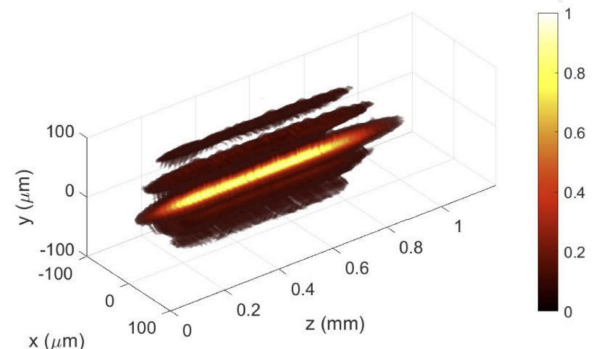
Šiame darbe mes pristatome geometrinės fazės (GF) optinį elementą, leidžiantį formuoti didelės galios optinę adatą su glotniu ir pastoviu ašinio intensyvumo profiliu [2]. Refrakciniuose optiniuose elementuose fazė atsiranda dėl optinių kelių skirtumo, o GF elementuose dėl geometrinės fazės, atsirandančios erdvėje manipuliuojant vektoriniu dvejetainiu subpikseliu. Mūsų eksperimento metu, optinis elementas yra pagaminamas lydyto kvarco tūryje įrašant II-o tipo modifikaciją – formuojant nanogardeles, kurios pasižymi dvejetainiškumo savybe ir kurių greitoji ašis yra statmena gardelės krypčiai. Šios gardelės formuojasi statmenai įrašinio pluošto elektrinio lauko krypčiai, tad įrašymo metu, erdvėje manipuliuojant poliarizacija, galima gaminti įvairius optinius elementus.

Šiame darbe mes tiek skaitmeniškai, tiek eksperimentiškai ištyrėme GF elemento ir poliarizatoriaus poros (1 pav) formuojamos optinės adatos (2 pav) sklaidimą esant tokiems eksperimentinių sąlygų netobulumams, kaip į elementą krintančio pluošto matmenų neatitikimas, GF elemento ir tiesinio poliarizatoriaus kampinis išderinimas, bei elemento skersinis poslinkis nuo optinės ašies centro. Geriausios sąlygos optinės adatos formavimui kai: į elementą krintančio pluošto diametro nuokrypio ir idealaus pluošto diametro santykis < 0.05 , elemento ir poliarizatoriaus kampinis išderinimas $< 5^\circ$ (3 pav), skersinio elemento poslinkio santykis su pluošto spinduliu < 0.125 .

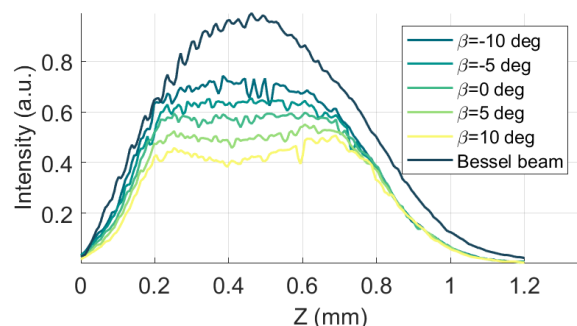
Taigi, esant nedideliems sistemos iškreipimas, formuojama optinė adata yra stabili.



1 pav. Principinė optinės adatos formavimo schema, sudaryta iš geometrinės fazės elemento, poliarizatoriaus ir aksikono.



2 pav. Eksperimentiškai suformuotos optinės adatos vaizdas.



3 pav. Optinės adatos ašiniai intensyvumai esant kampiniam išderinimui tarp GF elemento ir poliarizatoriaus.

Literatūra

1. S. N. Khonina, N. L. Kazanskiy, S. V. Karpeev, and M. A. Butt, *Micromachines*, 11, 997 (2020)
2. P. Gotovski, P. Šlevas, S. Orlov, O. Ulčinys, and A. Urbas, *Opt. Express* 29, 33331-33345 (2021)

ADITYVIOS GAMYBOS BŪDU SUFORMUOTŲ $Ti6Al4V$ IR ZrO_2 MEDŽIAGŲ PADENGIMAS HIDROGELINĖMIS DANGOMIS

Skirmantas Norkus^{1,3}, Airina Mazėtyte Godienė^{1,4}, Romuald Eimont^{1,4}, Osvaldas Grubys³,

Vytautas Cėpla¹, Tadas Jelinskas⁴, Ramūnas Valiokas¹, Brigita Abakevičienė²

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

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

³Ortho Baltic UAB, Taikos pr. 131A, LT-51124, Kaunas, Lietuva

⁴Ferentis UAB, Savanorių pr. 235, LT-02300, Vilnius, Lietuva

el. p.: skirmantas.norkus@ftmc.lt

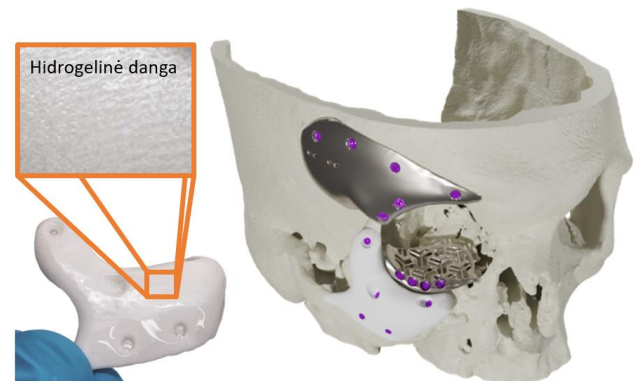
Chirurginių implantų skaičius visame pasaulyje kasmet auga. Taip yra dėl senėjančios žmonių populiacijos ir didėjančio chirurginių implantų prieinamumo. Tačiau net ir sparčiai tobulėjant medicinos technologijoms ir naujiems mokslo pasiekimams, chirurginio implantavimo terapijoje vis dar pasitaiko nesėkmių. Viena iš pagrindinių nesėkmės priežasčių yra ta, kad audinių atstatymas po traumų ir infekcijų visada buvo sudėtinga regeneracinės medicinos problema¹. Pastaruoju metu hidrogečiai tapo viena iš svarbiausių audinių inžinerijos medžiagų. Dėl didelio skysčių kiekio, geros maistinių medžiagų sklaidos ir biologinio suderinamumo hidrogečiai yra ypač tinkama terpė ląstelių dauginimuisi, gyvybingumui ir audinių regeneracijai². Apskritai hidrogečių mechaninės ir struktūrinės savybės yra labai panašios į mechanines ir struktūrinės audinių ir tarpląstelinės matricos savybes². Dėl šių hidrogečių savybių ortopediniai implantai, modifikuoti hidrogečių dangomis, turėtų skatinti aplink implantą esančių minkštųjų ir kietųjų audinių regeneraciją. Pagrindinis šio tyrimo tikslas buvo padengti eksperimentinius bandinius hidrogečiais dangomis bei atlikti *in vitro* tyrimus.

Eksperimentiniams bandiniams ir personalizuotiems chirurginiams implantams spausdinti buvo naudojamos tiesioginio metalo lazeriu sukepinimo (DMLS) ir litografijos pagrindu pagamintos keramikos gamybos (LCM) 3D spausdinimo technologijos. Eksperimentiniai bandiniai ir personalizuoti chirurginiai implantai atspausdinti iš $Ti6Al4V$, ZrO_2 medžiagų. Po paviršiaus apdirbimo, paviršiaus plovimo, paviršiaus aktyvavimo naudojant chemisorbcijos metodą eksperimentiniai bandiniai ir personalizuoti chirurginiai implantai padengti hidrogečiais medžiagomis.

Fizinis ir cheminis apibūdinimas buvo atliktas naudojant: pramoninę kompiuterinę tomografiją (μ CT), rentgeno spindulių difrakciją (XRD), optinį profilometrą (OP), optinį mikroskopą, kontaktinio kampo metodą, atominės jėgos mikroskopą (AFM).

In vitro tyrimai atlikti su žmogaus odos fibroblastų ląstelių linija ir hFOB 1.19 (žmogaus osteoblastai) ląstelių linija. *In vitro* tyrimu metu buvo analizuojama ląstelių kultūrų proliferacija, atliktas adhezinių zonų vaizdavimas ir ląstelių diferenciacijos įvertinimas ELISA ir qRT-PGR diagnostikos metodais.

Tyrimo metu nustatyta, kad eksperimentinių bandinių paviršiaus šiurkštumas $Sa < 1 \mu m$ prieš dengimą. Hidrogečio dangos storio matavimai parodė, kad dangos storis svyravo nuo 150 iki 200 μm . Nustatyta, kad susidariusios dangos Jungo modulis yra $167,61 \pm 36,25$ kPa. Tyrimai *in vitro* parodė, kad per 7 dienas ant hidrogečiu dengtų substratų / mėginių susiformavo visas ląstelių monosluoksnis.



1 pav. Personalizuotas chirurginis implantas padengtas hidrogečine danga

Hidrogečio dangos ant $Ti6Al4V$ ir ZrO_2 eksperimentinių bandinių ir personalizuotų chirurginių implantų buvo sėkmingai suformuotos naudojant chemisorbcijos metodą, nepaisant personalizuotų chirurginių implantų geometrijos sudėtingumo. *In vitro* tyrimai parodė, kad hidrogečio dangos pagreitina ląstelių atsaką ir padidina ląstelių proliferaciją bei metabolizmą, palyginti su nepadengtomis medžiagomis. Iš tyrimo metu gautų rezultatų galima teigti, kad personalizuoti chirurginiai implantai, padengti hidrogečių medžiagų dangomis, galėtų pagreitinti aplink implantą esančių minkštųjų audinių regeneraciją.

Literatūra

1. Tianyi L. *et al.*, J. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology. 25 January 2022.
2. Yasamin D.T. *et al.*, Current Medical Chemistry, 23, 2019.

Padėka

Autoriai dėkoja Europos regioninės plėtros fondui už finansinę paramą projektui Nr. 01.2.1-LVPA-K-856

LAZERINIO GRŪDINIMO EFEKTAS SILICIO OKSIDO VEIDRODŽIAMS

Lukas Ramalis¹, Rytis Buzelis¹, Gustė Dolmantaitė¹ 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 Radnici 835
Dolní Brežany, Čekija

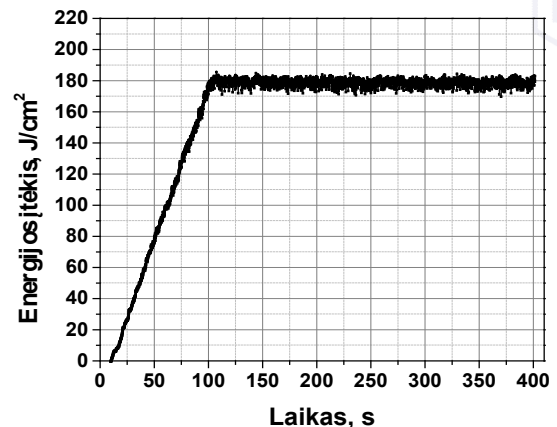
Optiniai elementai yra pagrindinės lazerinių sistemų dalys, ribojančios didesnių galių generaciją dėl optinio atsparumo. Lazerinės spinduliuotės skersmens padidėjimas gali kompensuoti elementų optines charakteristikas, tačiau tokiu atveju lazerinės sistemos fiziškai didėja. Taigi optinių dangų patobulinimas turi tiesioginės įtakos lazerinių sistemų dydžiui arba generuojamai galiai.

Tobulinant dangas yra atliekama daug tyrimų, įskaitant elektrinio lauko pasiskirstymo optimizavimą [1] formuojant daugiasluoksnes dangas, optinių elementų lazerinio grūdinimo procedūras [2] arba naujų bei inovatyvių medžiagų inžinerijos metodų pritaikymą [3]. Buvo pademonstruota, jog naudojant nanostruktūrizuotus sluoksnius veidrodžių formavime, lazerinio atsparumo vertės siekia 60 J/cm² 355 nm bangos ilgiui nanosekundiniame režime, tačiau didelis defektų skaičius riboja aukštesnius rezultatus [4]. Šiame darbe pademonstruotas lazerinio grūdinimo efektas silicio oksido veidrodžiams, pagerinant jų optines charakteristikas.

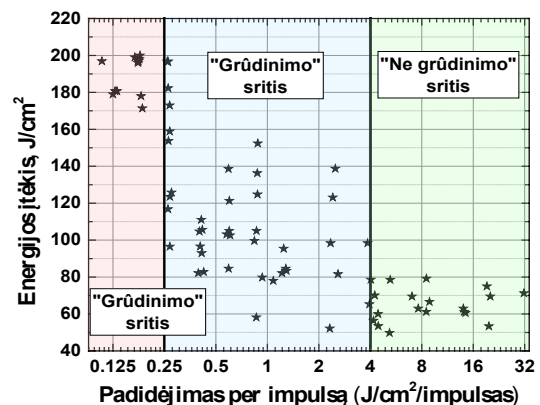
Garinimo kampu technologija suformuoti silicio oksido veidrodžiai 355 nm bangos ilgiui potencialiai gali siekti aukštas lazerinio atsparumo vertes, tačiau dangos degradoja laike - sugeria iš aplinkos vandenį ar kitas žalingas daleles. Taikant lazerinio grūdinimo efektą buvo pastebėtas optinių charakteristikų pagerinimas naudojant nanosekundinį Nd:YAG, 15 Hz lazerį. Pirmame paveikslėlyje pavaizduotas lazerinio grūdinimo pavyzdys, kur bandinys buvo nuolatos veikiamas lazerio spindulio, kurio energija pamažu keliama nuo 0 iki 180 J/cm². Tokių verčių 355 nm bangos ilgio veidrodžiams nepavyko dar niekam užfiksuoti.

Tyrinėjant grūdinimo efektą silicio oksido veidrodžiams buvo pastebėta lazerinio atsparumo priklausomybė nuo grūdinimo greičio - t.y. nuo lazerinės spinduliuotės kėlimo greičio (2 pav.). Siekiant išsiaiškinti kodėl lazerinio grūdinimo efektas yra itin veiksmingas skulptūrinių dangų pagrindu suformuotoms dangoms, buvo atlikta detali optinių charakteristikų analizė.

Ištyrus daugiasluoksnes skulptūrinių dangų pagrindu suformuotas dangas ir pritaikius lazerinio grūdinimo efektą, buvo pastebėtas



1 pav. Lazerinio grūdinimo efekto pavyzdys.



2 pav. Lazerinio grūdinimo efekto rezultatai.

ryškus optinių charakteristikų pagerinimas. 355 nm bangos ilgiui nusodinti veidrodžiai pasižymi apie 180 J/cm² lazeriniu atsparumu, pritaikius lazerinio grūdinimo efektą nanosekundiniame režime.

Literatūra

1. O. Arnon and P. Baumeister, "Electric field distribution and the reduction of laser damage in multilayers" Applied Optics Vol. 19, Issue 11, 1853-1855 (1980).
2. Kozłowski, M.R., Wolfe, "Large Area Laser Conditioning of Dielectric Thin Film Mirrors", Proceedings of SPIE, 1438, 376-390 (1989).
3. Hodgkinson, I. & Wu and Q. H F., "Serial bideposition of anisotropic thin films with enhanced linear birefringence", Applied Optics, 38, 3621-3625 (1999).
4. T. Tolenis, L. Grinevičiūtė, et. al. "Next generation highly resistant mirrors featuring all-silica layers", Scientific reports, 1-9, 7(1) (2017).

LAZERIO PLUOŠTO ŽIDINIO ZONOS KONTROLĖ PANAUDOJANT TUŠČIAVIDURIUS S-BANGINIŲ PLOKŠTELIŲ PAGRINDU ĮRAŠYTUS ELEMENTUS

Ernestas Nacius^{1,2}, Orestas Ulčinas², Sergejus Orlov¹, Vytautas Jukna^{1,3}

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

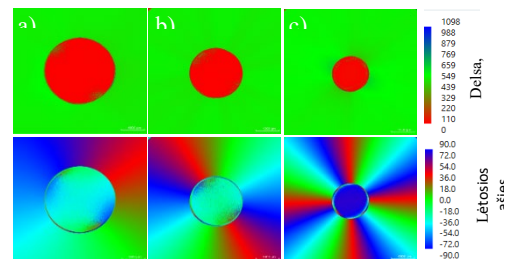
²Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412, Vilnius

³Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, LT-10223, Vilnius

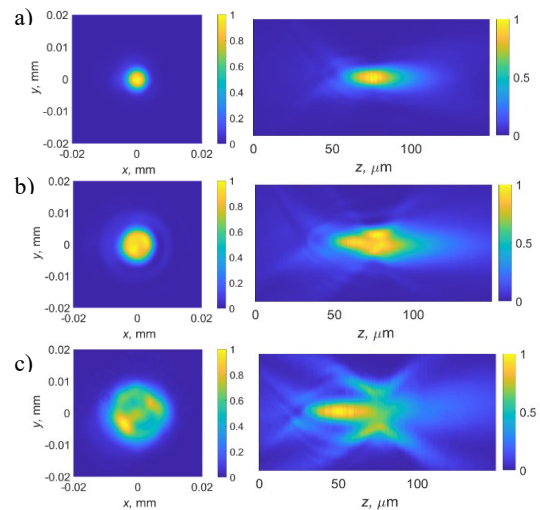
Lazerinis įvairių medžiagų mikroapdirbimas naudojant ultratrumpų impulsų šaltinius leidžia dideliu, mikronų eilės tikslumu pakeisti bandinių formas bei savybes: pjauti, gręžti (abliuoti), lydyti, įrašyti tūrinius pakitimus. Kiekvieno atskiro proceso pagerinimui ir pagreitinimui galima pasitelkti pluošto židinio zonos inžineriją, kurios pagalba įmanoma efektyviau paskirstyti pluošto intensyvumą erdvėje. Paprastai naudojamas Gauso pluoštas turi ribotą sąsmaukos ilgį ir dėmės dydį, todėl kai kuriems apdirbimo procesams tai tampa ribojančiu faktoriumi. Be to, šiūlaikiniai ultratrumpų impulsų lazeriniai šaltiniai geba generuoti didelės vidutinės galios bei aukšto pasikartojimo dažnio spinduliuotę, kuriai efektyviai panaudoti, standartinio pluošto formos nebepakanka. Todėl platus tyrimų laukas yra galimybė transformuoti pluošto židinio zoną panaudojant amplitudę, fazę ar poliarizaciją keičiančius optinius elementus: difrakcinius elementus, erdvinius šviesos modulatorius. Pavyzdžiui, pluošto židinio zonos išilginimas pritaikytas skaidrių terpių pjovime¹, o pluošto poliarizacijos transformacija į azimutinę ar radialinę suformuojant žiedo formos intensyvumo skirstinį². Šiame tyrime lazerio pluošto transformacijos židinio aplinkoje įvykdomos pasitelkiant lydyto kvarco tūryje suformuotų dvejetainių nanogardelių pagrindu pagamintus optinius elementus³. Yra žinoma, jog lazerine spinduliuote modifikuojant stiklo tūrį, galima sukurti trijų pagrindinių tipų pažeidas: lūžio rodiklio pokytį, anizotropines nanogardes ir mikrotuštumas. Dvejetainių nanogardelių yra ypatingos tuo, kad lazerinio rašymo metu galima valdyti delsą bei optinės ašies posūkio kampą keičiant tiesinės poliarizacijos kampą. Tai leidžia stiklo tūryje įrašyti kontroliuojamos orientacijos ir pozicijos struktūras⁴. Todėl, šiuo pagrindu pagamintas optinis elementas yra jautrus krentančio pluošto poliarizacijai ir gali ją pasukti arba pakeisti fazę. Šis efektas žinomas kaip geometrinė (Pancharatnam-Berry) fazė.

Šiame darbe pademonstruojami keli S-banginės plokštelės² pagrindu pagaminti elementai, kuriais galima keisti pluošto židinio intensyvumo skirstinius (žr. 1 pav.). Pasitelkiant skaitmeninį difrakcijos modeliavimą ir palyginant eksperimentinius duomenis (2 pav.), gauti pluoštai panaudojami

lazeriniame mikroapdirbime sudydant stiklus bei atliekant abliaciją.



1 pav. Trijų S-banginės plokštelės pagrindu pagamintų elementų su nemodifikuotais centrais delsos (viršutinė eilutė) ir lėtosios ašies kampų (apatinė eilutė) nuotraukos, kur lėtosios ašies moduliacija yra: a) $N = 1$, b) $N = 2$ ir c) $N = 4$ eilės. Mastelio žymuo atitinka 1 mm.



2 pav. Eksperimentiniai pluoštų židinio zonos matavimai, kai prieš fokusuojantį lęšį patalpinti elementai, kurių lėtosios ašies moduliacijos atitinkamai yra a) $N = 1$, b) $N = 2$ ir c) $N = 4$ eilės.

Literatūra

1. E. Nacius, P. Gotovski, O. Ulčinas, S. Orlov, A. Urbas, V. Jukna, Spatially displaced and superposed Bessel beams for transparent material laser microprocessing, J. Opt. Soc. Am. B 38, 3886-3895, (2021).
2. M. Beresna, M. Gecevičius, P.G. Kazansky, T. Gertus, Radially polarized optical vortex converter created by femtosecond laser nanostructuring of glass, Appl. Phys. Lett. 98, 201101 (2011).
3. M. Sakakura, Y. Lei, L. Wang, et al. Ultralow-loss geometric phase and polarization shaping by ultrafast laser writing in silica glass. Light Sci Appl 9, 15, (2020).
4. Y. Shimotsuma, P.G. Kazansky, J. Qiu, K. Hirao, Self-Organized Nanogratings in Glass Irradiated by Ultrashort Light Pulses, Phys. Rev. Lett. 91, 247405, (2003).

MJ-EILĖS SWIR OPCPA KAUPINAMAS 1.2 ps Yb:YAG LAZERIU

Augustinas Petrulėnas

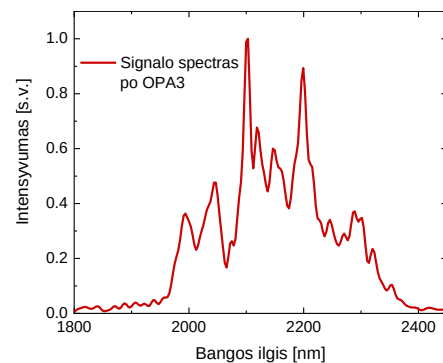
Fizinių ir technologijos mokslų centras, lazerinių technologijų skyrius
Savanorių al. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: augustinas.petrulenas@ftmc.lt

Kelių optinių ciklų trumpųjų infraraudonos spinduliuotės bangos ilgių (SWIR) ruožo impulsai yra plačiai pritaikomi stipraus lauko fizikos ir netiesinės optikos tyrimuose, efektyviai generuojant atosekundinius ar rentgeno spindulių impulsus ir THz spinduliuotę. Kartu plačiąjuose SWIR-MIR spinduliuotės impulsai, apimantys daugelį svarbių molekulinų virpesių, yra naudingi nuotoliniam atmosferos stebėjimui ir LIDAR'uose. Taip pat lazerinės sistemos su išvadinais kelių mJ energijos femtosekundiniais impulsais, kurių bangos ilgis 2 μm , reikalingos vidutinio IR (MIR) spektro ruožo parametriniams stiprintuvams su neoksidiniais kristalais (ZGP, CdSiP₂, OP-GaAs), kaupinti, kad būtų galima pasiekti daugiau nei 4 μm . Optinis parametrinis čirpuotas impulsų stiprinimas (OPCPA) buvo sėkmingai pritaikytas generuojant kelių mJ SWIR impulsus. Vienas iš galimų SWIR OPCPA įgyvendinimo būdų pagrįstas nedidelės kaupinimo lazerio energijos dalies panaudojimu superkontinuumui (SC) iki 2.5 μm generuoti, kuris stiprinamas vienoje ar kelyse OPCPA pakopose. Šiame darbe, mes pademonstravome baltos šviesos superkontinuumo impulsų stiprinimą trijose nekolineriose OPCPA pakopose. SWIR impulsai pastiprinti naudojant bismuto triborato (BiBO) kristalus iki 2.2 mJ 1.9-2.3 μm bangos ilgio diapazone.

Tiek SC, tiek OPCPA kaupinimo šaltinis yra FTMC kieto kūno lazerių laboratorijoje sukurtas dviejų pakopų dviejų praėjimų Yb:YAG čirpuotų impulsų stiprintuvas su gardelinio kompresoriumi, kuris užtikrina spektriškai ribotų impulsų trukmę iki ~1.2 ps ir impulso energija iki 20 mJ, ties 100 Hz pasikartojimo dažniu [1]. SC impulsai buvo generuojami 15 mm ilgio YAG kristale [2] ir išplėsti laike iki 550 fs panaudojus 30 mm ilgio ZnSe stiklą. Plačiąjuose SC impulsai stiprinami trijų pakopų nekolineriame OPCPA, panaudojus BiBO kristalus (I tipo, fazės suderinimo kampas $\theta = 8^\circ$), dengtus AR danga 1750-2500 nm diapazone.

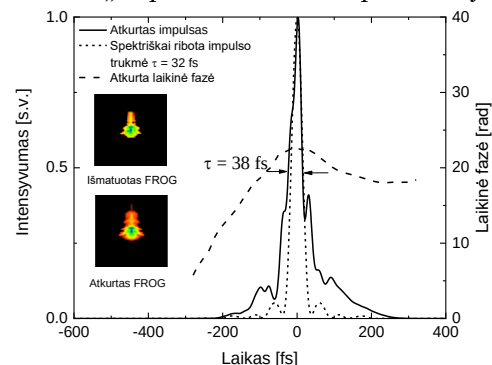
Pirmojoje OPCPA pakopoje geriausias kaupinimo į signalą konversijos efektyvumas ~3 %, o didžiausia signalo energija >10 μJ , buvo pasiekta esant 60 GW/cm² smailiniam kaupinimo intensyvumui. Antrojoje OPCPA pakopoje kaupinimo keitimo į signalą efektyvumas siekė 10 %, kai kaupinimo spinduliuotės smailinis intensyvumas buvo 40 GW/cm². Po dviejų OPCPA pakopų plačiąjuostis SC signalas buvo sustiprintas iki 220 μJ . Galiausiai trečiojoje OPCPA pakopoje pasiektas rekordinis

30 % konversijos efektyvumas, o išvadinių impulsų energija siekė daugiau nei 2 mJ. Taip pat po trijų OPCPA pakopų sustiprinto signalo spektro plotis siekė 220 nm kai centrinis bangos ilgis 2.15 μm , kas atitinka ~32 fs spektro ribotą impulsų trukmę [1pav].



1 pav. Sustiprinto signalo po trijų OPCPA pakopų spektras.

Po trijų OPCPA pakopų impulsai buvo suspausti nuo 480 fs iki 38 fs „Suprasil 300“ stiklo plokštelėje [2pav].



2 pav. Suspaustas impulsas po OPA3 ir laikinė fazė, atkurta iš SHG-FROG matavimo ir spektriškai ribota impulso trukmė.

Taigi, sukurta SWIR OPCPA su 40 GW smailinės galios išvadinais impulsais 1.9-2.3 μm bangų ilgių diapazone. To pakanka, kad būtų galima filamentuoti impulsus aukšto slėgio kiuvetėse, pripildytose N₂ arba H₂, ir gerokai išplėsti spektrą iki bangos ilgio, viršijančio 3 μm , sužadinant rotacinius Ramano aktyvios medžiagos virpesius.

Literatūra

1. P. Mackonis and A.M. Rodin, Opt. Express **28**(2) 1261-1268(2020).
2. P. Mackonis, A. Petrulėnas, V. Girdauskas and A.M. Rodin, The European Conference on Lasers and Electro-Optics (p. ca_p_43). Optical Society of America, (2019).

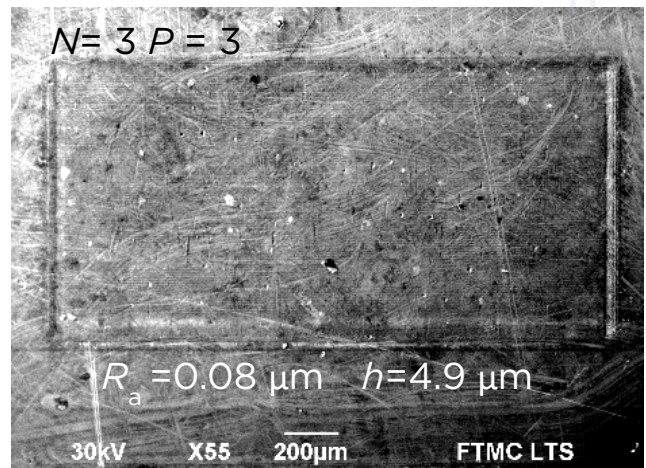
NAŠUS LAZERINIS METALŲ POLIRAVIMAS ULTRATRUMPŲJŲ IMPULSŲ VOROMIS

Mantas Gaidys, Andrius Žemaitis, Paulius Gečys, Mindaugas Gedvilas

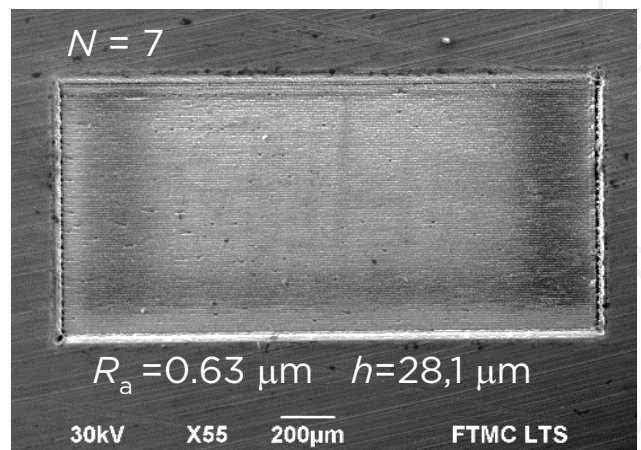
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: mantas.gaidys@ftmc.lt

Daugeliui įvairiose pramonės šakose naudojamų gaminių, didelę įtaką daro bandinio paviršiaus tekstūra ir paviršiaus kokybė. Lazerinis poliravimas leidžia pasiekti didelį tikslumą, gerą apdirbimo kokybę, platų galimų medžiagų pasirinkimą bei sudėtingų formų poliravimą. Taip pat ta pati lazerinė sistema gali būti naudojama tiek mikroapdirbimui, tiek ir poliravimui. Dabar plačiai naudojamos apdirbimo sistemos, kuriose naudojami MHz, GHz vorų bei bivorų režimai su didele vidutine optine galia. Šie režimai leidžia gerokai padidinti abliacijos efektyvumą [1], taip pat ženkliai pagerinti abliuojamo paviršiaus šiurkštumą [2], jei tinkamai optimizuojami lazerinio apdirbimo parametrai. Šiame darbe atliktas tyrimas, kurio metu, naudojant femtosekundinį lazerį impulsų vorų ir bivoros režimuose buvo ieškoma optimalių lazerinių parametrų norint pasiekti mažiausią paviršiaus šiurkštumą ant vario ir nerūdijančio plieno. Eksperimento metu buvo keičiamas impulsų skaičius vorose ir bivorose, o bandinio paviršius buvo išvedamas iš pluošto sąsmaukos padėties, taip keičiant medžiagą pasiekiantį energijos tankį.

Vario bandinyje gautas paviršiaus šiurkštumas naudojant MHz, GHz ir bivoros režimus buvo atitinkamai $0,23 \mu\text{m}$, $0,1 \mu\text{m}$ ir $0,08 \mu\text{m}$ (1 pav.), o nerūdijančio plieno bandinyje atitinkamai $0,63 \mu\text{m}$ (2 pav.), $0,55 \mu\text{m}$ ir $0,45 \mu\text{m}$. GHz ir bivoros režimai leidžia pasiekti mažesnius paviršiaus šiurkštumus dėl itin mažo laiko tarpo tarp impulsų, o tai leidžia maksimaliai išnaudoti šilumos akumuliacijos efektą.



1 pav. Vario paviršius po lazerinio poliravimo naudojant bivoros režimą. Skenuojančio elektronų mikroskopo nuotrauka. N – impulsų skaičius MHz impulse, P – impulsų skaičius GHz impulse, R_a – paviršiaus šiurkštumas, h – abliacijos gylis.



2 pav. Nerūdijančio plieno paviršius po lazerinio poliravimo naudojant MHz voros režimą. Skenuojančio elektronų mikroskopo nuotrauka. N – impulsų skaičius MHz impulse, R_a – paviršiaus šiurkštumas, h – abliacijos gylis.

Literatūra

1. A. Žemaitis, P. Gečys, M. Barkauskas, G. Račiukaitis, M. Gedvilas, Sci. Rep. **9**, 12280 (2019).
2. A. Žemaitis, M. Gaidys, P. Gečys, M. Barkauskas, M. Gedvilas, Opt. Express. **29**, 7641 (2021).

BIMETALLIC 17-4 PH/CoCrMo STRUCTURE FORMATION BY DIRECT METAL LASER SINTERING

Ada Steponavičiūtė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technologies
Savanoriu av. 231, LT-02300 Vilnius, email: ada.steponaviciute@ftmc.lt

Bimetallic structures are an excellent solution for a lot of engineering applications which require varying properties at different locations of the same object. Implementation of such structures into engineering fields can lead to easier maintenance, economical and space savings and can also open wider application possibilities. It is known that combining multiple materials together can result in customized chemical and mechanical properties of manufactured parts, such as electrical and thermal conductivity, hardness, corrosion resistance, etc. [1]. In recent years, production of bimetallic structures has been made possible with help of additive manufacturing (AM) technologies. Using laser powder-bed fusion (L-PBF) AM, there are a few different ways how bimetallic structures can be created: printing one material on a conventionally manufactured substrate from another material [2], printing one material after another [3] or using two powders in one layer by mixing them together [4].

In this work, two materials in powder form were used for bimetallic structure formation – CoCrMo and 17-4 PH stainless-steel. The bimetallic structure was successfully produced by using the L-PBF technology applied in EOSINT M280 machine. In-depth analysis of the 17-4 PH and CoCrMo materials and microstructural properties of the produced bimetallic sample were investigated in this study.

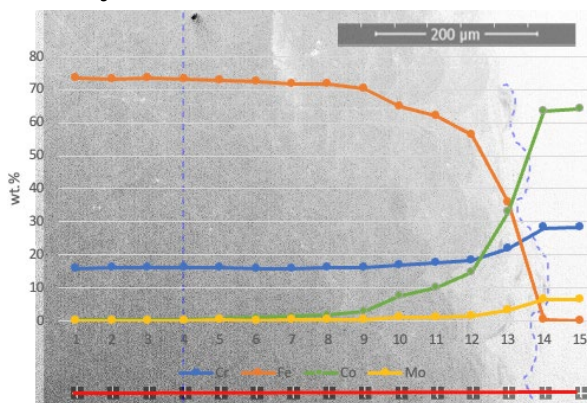


Fig. 1. Chemical element (Cr, Fe, Co, Mo) distribution in the 17-4 PH/CoCrMo fusion zone (red line marks the measurement location).

A gradual change in chemical element distribution is observed at the two-material fusion zone. The thickness of the fusion zone is around 400-450 μm .

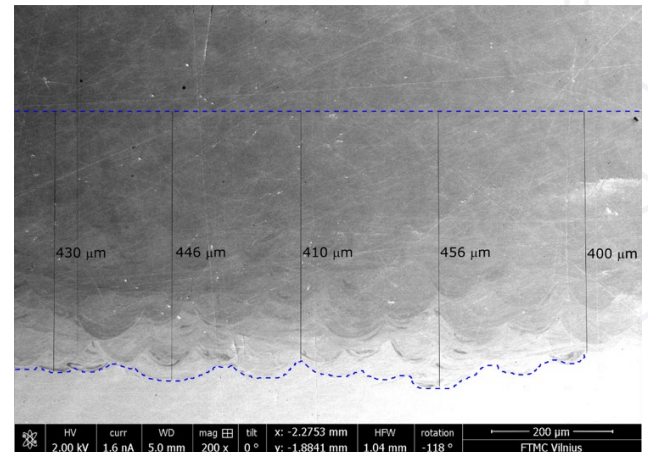


Fig. 2. Thickness of the fusion zone.

The hardness of the fusion zone (104 ± 2 HRB) is higher than the hardness of 17-4 PH (95 ± 2 HRB) but lower than CoCrMo (111 ± 2 HRB). The experimentally evaluated density of the bimetallic specimen is 8.01 g/cm^3 . The difference in values proves that the fusion zone of the specimen possesses unique characteristics that are not specific to either of the materials.

Table 1. Hardness of 17-4 PH, CoCrMo and the fusion zone.

Material/position	Hardness (HRB)	Density (g/cm^3)
17-4 PH	95 ± 2	7.75
CoCrMo	111 ± 1	8.30
Fusion zone	104 ± 2	8.01

References

1. J. Chen, Y. Yang, C. Song, D. Wang, S. Wu, M. Zhang. *Influence mechanism of process parameters on the interfacial characterization of selective laser melting 316L/CuSn10*. Mater. Sci. Eng. A 2020;792.
2. S. Shakerin, A. Hadadzadeh, B.S.Amirkhiz, S. Shamsdini, J. Li, M. Mohammadi. *Additive manufacturing of maraging steel-H13 bimetallics using laser powder bed fusion technique*, Addit. Manuf. 2019;29.
3. S.L. Sing, L.P. Lam, D.Q. Zhang, Z.H. Liu, C.K. Chua. *Interfacial characterization of SLM parts in multi-material processing: intermetallic phase formation between AlSi10Mg and C18400 copper alloy*, Mater. Charact. 2015;107, p. 220-227
4. C. Wei, L. Li, X. Zhang, Y.H. Chueh. *3D printing of multiple metallic materials via modified selective laser melting*, CIRP Ann. 2018; 67, p. 245-248.

GRAFENO FORMAVIMAS LAZERIU POLIMERŲ PAVIRŠIUJE NAUDOJANT ULTRVIOLETINĖS – ARTIMOS INFRARAUDONOSIOS DIAPAZONO BANGOS ILGIO SPINDULIUOTĘ

Vitalij Fiodorov¹, Karolis Ratautas¹, Zenius Mockus²,
Romualdas Trusovas¹, Lina Mikoliūnaitė³, 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

³Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

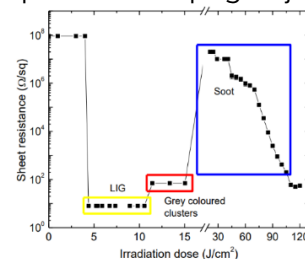
Pastarąjį dešimtmetį grafeno medžiagos sulaukia vis didesnio dėmesio elektronikos pramonėje dėl savo ypatingų cheminių ir fizinių savybių [1]. Kai kurių polimerų paviršiuje, paveikus jas lazerine spinduliuote, susidaro laidus grafeno sluoksnis [2, 3]. Suformuotas grafeno sluoksnis polimero paviršiuje dėl savo gero elektrinio laidumo galėtų būti naudojamas elektrai laidžių takelių gamyboje. Mūsų eksperimente, polimero paviršiuje lazerio spinduliu selektyviai suformuojamas grafeno sluoksnis, o tuomet bandinys yra panardinamas į galvanikos vonelę ir grafeno sluoksnis padengiamas variu. Pagrindinis metodo privalumas yra galimybė selektyviai gaminti elektrai laidžius takelius ant sudėtingos formos trimačių polimerinių paviršių, kur įprasti elektrai laidžių takelių gamybos metodai nėra tinkami.

Mūsų vykdomame tyrime yra nagrinėjamas lazeriu indukuoto grafeno susidarymas polimero paviršiuje, paveikus jį skirtingų bangos ilgių lazerine spinduliuote. Eksperimentai buvo atliekami naudojant Kapton® (PI) poliimido 127 μm storio plėveles. Bandiniai buvo apdirbami kieto kūno lazeriu, generuojančiu 10 pikosekundžių trukmės impulsus, naudojant 355 nm, 532 nm bei 1064 nm bangos ilgius. Eksperimente naudota vidutinė lazerio galia buvo nuo 0.25 iki 8.5 W, o impulsų pasikartojimo dažnis buvo keičiamas nuo 100 iki 400 kHz. Spindulio skenavimo greitis buvo keičiamas nuo 30 mm/s iki 100 mm/s, o atstumas tarp skenavimo linijų nuo 10 μm iki 100 μm. Atlikta išsami bandinių, apdirbtų visais minėtais bangos ilgiais, analizė. Bandinių charakterizavimui po lazerinio apdirbimo buvo atliekami paviršinės varžos matavimai, pasitelkiant keturių zondų metodą. Paviršiaus cheminė sudėtis buvo tirama, naudojant Ramano spektroskopiją. Taip pat, buvo atliktas šilumos laidumo bandinio paviršiuje, paveikiant jį lazerine spinduliuote, modeliavimas, kuriuo metu buvo įvertinta polimero paviršiaus temperatūra ir apšvitos trukmė, reikalinga susiformuoti grafenui.

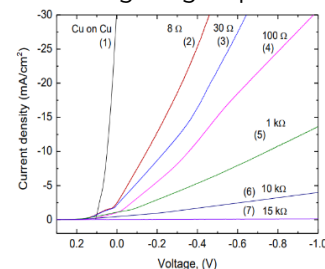
Eksperimento metu buvo atrasti trys spinduliuotės poveikio poliimido bandinio paviršiui režimai: paviršiuje susiformuoja anglies sluoksnis, kuomet bandinys apdirbamas didelio intensyvumo fokusuotu spinduliu (apšvitos dozėmis nuo 17.8 J/cm² iki

130 J/cm²), susiformuoja pilkos spalvos medžiaga, paveikiant ją apšvitos dozėmis nuo 11.4 J/cm² iki 15.5 J/cm², ir susiformuoja grafenas, paveikiant bandinį išfokusuotu spinduliu (apšvitos dozės nuo 4.4 J/cm² iki 10.8 J/cm²) (1 pav.). Kiekvienu atveju, apdirbto bandinio paviršiaus laidumas ženkliai padidėdavo. Konkreti apdirbto paviršiaus vertė priklausydavo nuo naudotos spinduliuotės parametrų. Mažiausia paviršinė varža (t.y. didžiausias laidumas) pasiekta suformuojant bandinio paviršiuje grafeną, ir lygi 8 Ω. Ramano spektrų analizė parodė ryškią 2D juostą indikuojančią apie grafeno požymius paviršiuje bei defektų nebuvimą.

Galiausiai, lazeriu apdirbti bandiniai buvo padengti variu, galvaniniu būdu. Pilnai pasidengę bandiniai, kurių paviršinė varža buvo nedidesnė kaip 100 Ω. Ploniausias dangos storis, kuria pavyko pilnai padengti 100 Ω varžos bandinį – 10 μm, o 8 Ω paviršinės varžos grafeno sluoksnį – 5 μm. Išmatuotos vario dengimo ant apdirbto laidaus poliimido paviršiaus voltamogramos (2 pav.) bei atlikti dengto paviršiaus topografijos tyrimai.



1 pav. Poliimido paviršinė varža, paveikus ją 1064 nm bangos ilgio spinduliuote.



2 pav. Vario galvaninio dengimo ant lazeriu suformuoto laidaus paviršiaus voltamograma.

Literatūra

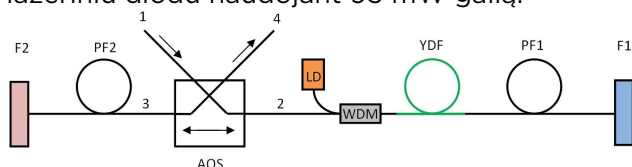
1. R. Ye, et al, *Advanced Materials*, **31**, 1803621 (2019).
2. V. Fiodorov, et al, *Polymers*, **14**, 781 (2022).
3. R.Trusovas, et al, *Applied Surface Science*, **471**, 154-161 (2019).

MAMYŠEVO REGENERATORIUMI PAREMTAS IMPULSŲ FORMAVIMAS

Gustas Liaugminas

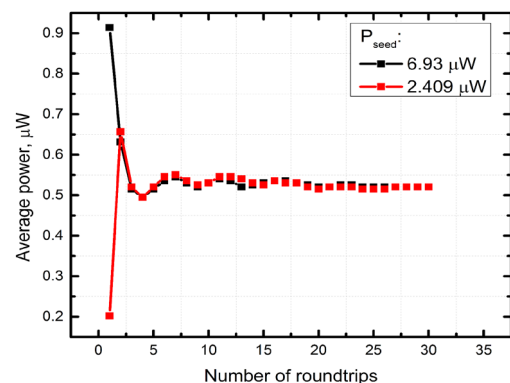
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: gustas.liaugminas@ftmc.lt

Daugumos ultratrumpųjų impulsinių lazerių veikimas pagrįstas modų sinchronizacija. Tokio tipo šaltiniai generuoja impulsus fiksuotu pasikartojimo dažniu, kurį lemia rezonatoriaus ilgis. Kai kuriems taikymams, tokiems kaip ar dvifotonė mikroskopija, dažnu atveju svarbu turėti kintamo pasikartojimo dažnio lazerinį šaltinį norint derinti vaizdavimo gylį išvengiant bandinio pažeidos [1]. Lazeriniai diodai maitinami trumpais įtampas impulsais gali generuoti pikosekundinius impulsus plačiame pasikartojimo dažnio diapazone, tačiau sugeneruoti impulsai pasižymi triukšmu, prasta pluošto kokybe, be to, impulsai negali būti suspaudžiami į spektriškai ribotas trukmes. Vienas iš metodų pagerinti impulsų kokybę yra leisti impulsus iš tokio tipo diodo į Mamyševo regeneratorių. Mamyševo regeneratoriuje impulsas yra pastiprinamas, jo spektras išplečiamas ir filtruojamas juostiniu filtru taip pagerinant jo koherentiškumą ir sumažinant trukmę [2]. Šio regeneravimo metodo trūkumas yra didelė regeneruoto impulso amplitudės priklausomybė nuo užkrato impulso amplitudės svyravimų [3]. Tam, kad impulsas pilnai susiformuotų ir nebepriklausytų nuo užkrato impulso, reikalingos kelios Mamyševo regeneratoriaus pakopos, o tai padaro sistemą didesnę, sudėtingesnę ir brangesnę. Šiame darbe pristatoma kompaktiška Mamyševo regeneratoriaus schema leidžianti realizuoti norimą skaičių apėjimų regeneratoriuje panaudojant elektriškai valdomą akusto-optinį keturių šakų perjungiklį (1 pav.). Regeneratorių sudaro pasyvūs šviesolaidžiai kuriuose vyksta spektrinis impulso plitimas (PF1, PF2), filtrai, kurie atlieka spektrinį filtravimą (F1, F2), šviesolaidinis stiprintuvas (YDF) ir keturių šakų akustooptinis perjungiklis (AOS). Užkrato impulsai iš išorinio šaltinio įvedami per jungiklio šaką 1 į šaką 2. AOS įjungiamas paduodant į ją stačiakampį įtampos impulsą, derinant jo trukmę galima valdyti apėjimų regeneratoriuje skaičių. Nuo F1 atsispindėjęs impulsas pradeda cirkuliuoti tarp šakų 2-3. Pasibaigus elektriniam impulsui AOS išsijungia ir suformuotas impulsas išleidžiamas per šaką 4. Regeneratoriaus stiprintuvas buvo kaupinimas lazeriniu diodu naudojant 95 mW galią.



1 pav. Eksperimentinė schema.

Į regeneratorių įvedus >100 pJ energijos ir kelių pikosekundžių trukmės impulsus iš išorinio užkrato šaltinio 10 kHz dažniu, pastebėta, kad susiformuoja stabili mažos amplitudės regeneruotų impulsų vora atitinkanti regeneratoriaus pasikartojimo dažnį. Vidutinė impulsų galia kiekvieno apėjimo metu fliktuoja, tačiau didėjant apėjimų skaičiui nusistovi į pastovią vertę. Tam, kad impulsas stabilizuotųsi reikia daugiau nei 22 apėjimų regeneratoriuje. Iš 2 pav. matyti, kad regeneruoto impulso vidutinė galia nuo užkrato impulso vidutinės galios priklauso tik pirmų kelių apėjimų metu. Toliau didėjant apėjimų skaičiui, kreivės pradeda persikloti, o tai rodo, kad regeneruotas impulsas nebepriklauso nuo pradinio impulso energijos, o jo energija ir spektrinės charakteristikos priklauso tik nuo regeneratoriaus parametų, tokių kaip filtrų juostos plotis, centriniai bangos ilgiai, šviesolaidžių ilgiai, stiprintuvo kaupinimo galia ir t.t. Regeneruotų impulsų energija siekė ~ 50 pJ, o regeneracija vyko stabiliai 10-50 kHz pasikartojimo dažnių diapazone. Šis diapazonas gali būti išplėstas tinkamai parenkant regeneratoriaus stiprintuvo kaupinimo galią.



2 pav. Regeneruotų impulsų vidutinės galios priklausomybė nuo apėjimų skaičiaus prie skirtingų užkrato impulso vidutinių galių.

Literatūra

1. V. Gautam, J. Drury, J. M. C. Choy, C. Stricker, H.-A. Bachor, V. R. Daria. Improved two-photon imaging of living neurons in brain tissue through temporal gating, Biomed. Opt. Express **6**, 4027-4036 (2015).
2. K. Regelskis, J. Želudevičius, K. Viskontas, G. Račiukaitis. Ytterbium-doped fiber ultrashort pulse generator based on self-phase modulation and alternating spectral filtering. Opt. Lett. **40**, 5255-5258 (2015).
3. W. Fu, L. G. Wright, F. W. Wise. High-power femtosecond pulses without a modelocked laser. Optica **4**, 831-834 (2017).

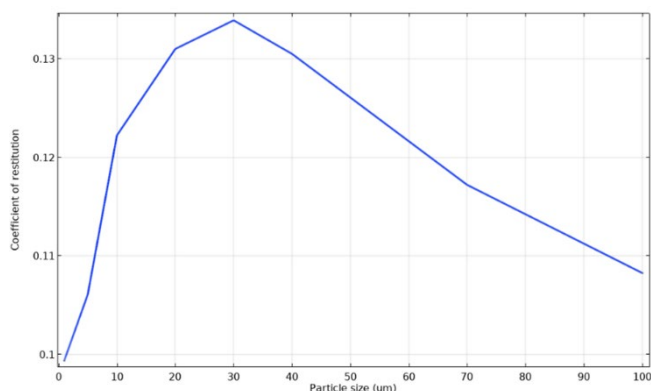
AUKŠTOS SKIRIAMOSIOS GEBOS LMD GALVUTĖS SPAUSDINIMO PARAMETRŲ ĮTAKA PAVIENIO TAKELIO FORMAVIMUI

Romuald Petkevič

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

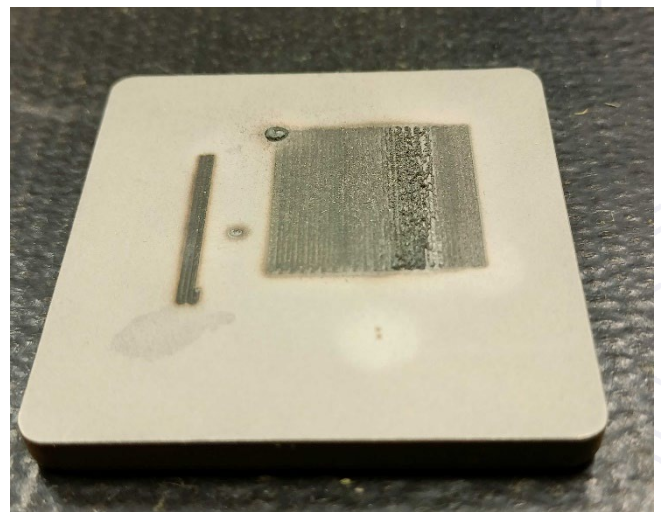
Metalo priedų gamybai pastaraisiais dešimtmečiais buvo skiriamas didelis dėmesys, todėl siūlomos įvairios technologijos, skirtos trimačiams objektams gaminti. Viena iš tokių technologijų, leidžiančių gaminti didelio dydžio objektus, yra metalo nusodinimas lazeriu (angl. LMD) [1]. Šios technologijos ribas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

Mūsų darbo tikslas buvo sukurti naują LMD purkštuką su centruotu dalelių srautu bei atlikti jo testavimą, formuojant pavienius spausdintus takelius. Šiame darbe mes atlikome skysčių dinamikos, dalelių ir paviršiaus sąlyčio bei termodinaminės būsenos kontakto metu skaičiavimus. Tuo pagrindu buvo suprojektuotas purkštukas, pagrįstas de Laval geometrija su Bicubic konvergencijos zonos kreive. Suprojektavus purkštuką buvo apskaičiuotas 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. Dalelių ir paviršiaus sąlyčio skaičiavimai atlikti taikant Cowper-Symonds modelį. Iš gautų rezultatų akivaizdu, kad maksimalus restitucijos koeficientas (angl. COR) ir minimalus bedimensis įdubimas pasiekiami, kai dalelių dydis yra 30 μm . pav.:1 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.



1 pav. Restitucijos koeficiento priklausomybė nuo metalo dalelių dydžio.

Remiantis atliktais skaičiavimais buvo pagamintas naujas LMD purkštukas, kuris maksimaliai pagreitina metalo daleles prie ankščiau nustatytų paduodamų dujų slėgio parametrų. Tam kad nustatyti prie kokių spausdinimo parametrų yra nusodinamas optimalus metalo dalelių kiekis, yra vykdomi fiziniai eksperimentai keičiant LMD galvutės judėjimo greitį ir lazerio galią pav. 2. Paveikslas parodo kokią įtaką turi lazerio galia pavienių takelių formavimui. Atliekami kiekybiniai eksperimentai leis optimizuoti lazerinio metalo nusodinimo procesą bei pasiekti aukštą spausdinimo skiriamąją gebą.



2 pav. Bandinys vaizduojantis nusodinto 17-4PH metalo kiekio skirtumą pakeitus lazerio galią.

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 Donadelloa, 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).

POLIKARBONATO PAVIRŠIAUS MODIFIKACIJA LAZERIU, METALO PADENGIMUI KATALIZINIU BŪDU

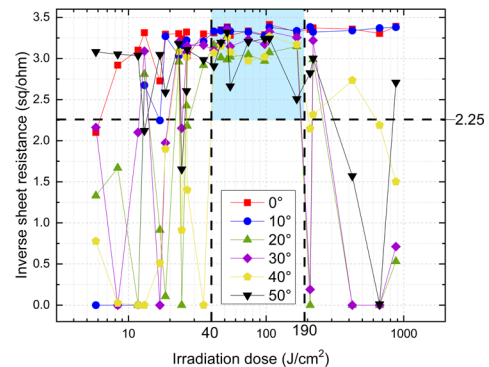
Vytautas Vosylius¹, Karolis Ratautas¹, Šarūnas Mickus¹, Evaldas Kvietkauskas¹,
Aldona Jagminienė², Ina Stankevičienė², Eugenijus Norkus², Gediminas Račiukaitis¹

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

Pramonei sparčiai besivystant auga poreikis kurti vis kompaktiškesnius bei funkcionalesnius gaminius. Tam ieškoma naujų medžiagų, technologijų, bei metodų. SSAIL (*Selective Surface Activation Induced by Laser*) technologija gali būti taikoma sparčiai elektrai laidžių takelių gamybai [1, 2]. SSAIL technologija susideda iš kelių etapų: medžiagos paviršius modifikuojamas lazeriu; bandinys chemiškai aktyvuojamas tirpale; bandinys nuplaunamas dejonizuotame vandenyje; tuomet kitame tirpale padengiamas variu kataliziniu būdu.

Eksperimente naudoti komerciškai prieinami polikarbonato (PC) 2mm storio lakštai iš „Heliopolio“. Šiai technologijai PC buvo dar nebandytas, todėl pirmiausiai eksperimentuota su įvairiais lazerinio mikroapdirbimo bei cheminio proceso parametrais, siekiant pritaikyti technologiją kokybiškų elektrai laidžių takelių gamybai ant polikarbonato. SSAIL procesas priklauso nuo įvairių lazerinio apdirbimo proceso parametrų: impulsų trukmės, pasikartojimo dažnio, skenavimo greičio, impulsų energijos, pluošto diametro ant paviršiaus, spinduliuotės bangos ilgio, atstumų tarp gretimų poveikio zonų centrų, spinduliuotės dozės, bei vidutinės lazerio galios bei skenavimo būdo [2]. Eksperimentai atlikti motorizuota lazerinio mikroapdirbimo sistema su galvanometriniu skeneriu greitam manipuliavimui lazerine spinduliuote, fokusavimui naudota telecentrinė lešių sistema. Valdymui naudota „DMC“ programa.

Eksperimento supaprastinimui buvo pasirinkta surišti atstumus tarp impulsų X bei Y ašyse, tam atitinkamai buvo parenkami skenavimo greičiai, priklausomai nuo lazerio pasikartojimo dažnio, bei atstumai tarp eilučių. Lazerio pasikartojimo dažnis pasirinktas 100 kHz, kadangi su didesniu dažniu buvo stebimas paviršiaus apsilydimas, o mažesnis dažnis reikėtų lėtesnį apdirbimo procesą. Kiti parametrai po pirminių eksperimentų buvo pasirinkti atitinkamai: lazerio bangos ilgis $\lambda = 532$ nm; impulso trukmė $\tau = 10$ ps; pluošto diameteras sąsmaukoje $d = 26$ μ m ($1/e^2$ lygyje). Tirta priklausomybė nuo lazerio impulso energijos E , bei atstumo tarp gretimų poveikio zonų centrų p . Ant PC plokštelės lazeriu modifikuojama 8x8 mm zona, tuomet keičiama impulso energija, šalia apdirbama sekanti zona ir taip suformuojama visa eilutė su skirtingom lazerio impulso energijom E .



Pav. 1. Variu dengto PC paviršiaus matricos zonų elektrinio laidumo priklausomybė nuo lazerinio proceso spinduliuotės dozės.

Tuomet pakeičiamas atstumas tarp gretimų poveikio zonų centrų p ir daroma sekanti eilutė – tokiu būdu suformuojama parametrų matrica. Pagamintos parametrų matricos kiekvienam lazerinio proceso kampui kas 10 laipsnių. Matricos fotografuotos optiniu mikroskopu. Optiniu profilometru tirtas paviršiaus šiurkštumas, kuris neparodė aiškos koreliacijos. Lašo kontaktinis kampas su modifikuotu PC paviršiumi taip pat neparodė aiškos priklausomos nuo lazerinių parametrų. Po cheminio proceso gautų zonų paviršinis laidumas pamatuotas keturių zonų metodu. Aiškiausius rezultatus parodė laidumo priklausoma nuo apšvitos dozės (**Pav. 1**). Kaip matosi grafike, dozės ribose nuo 40 iki 190 J/cm² gaunami elektrai laidūs takeliai, nepriklausomai nuo lazerinio proceso kampo su paviršiumi (jis atvaizduotas atitinkamomis spalvomis). Lazerinės spinduliuotės dozė priklauso nuo lazerio impulso energijos, bei atstumų tarp gretimų impulsais paveiktų zonų centrų.

Eksperimentiškai pademonstruota, kad SSAIL Procesas veikia be parametrų paderinimo ant paviršių, pasvirusių iki 50 laipsnių kampu ir gauti vientiso vario sluoksnio dangą be trūkių, išlaikant tą pačią paviršiui tenkančios lazerinės spinduliuotės dozę. Blieka išspręsti techninius niuansus, kad procesą galimą būtų taikyti greitam ir efektyviam 3D detalių selektyviam padengimui variu. Tam reikia priklausomai nuo kampo sutankinti lazerinio proceso linijas.

Literatūra

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

AKRECINIO DISKO REGULIUOJAMAS JUODŲJŲ SKYLIŲ MAITINIMAS IR GRĮŽTAMASIS RYŠYS HIDRODINAMINIUOSE MODELIUOSE

Matas Tartėnas, Kastytis Zubovas

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

Modernūs kosmologiniai bei galaktikų modeliai gerai atkuria galaktikų ir jų centrinių juodųjų skylių (SMBH) savybes bei tarpusavio sąryšius. Visgi juose naudojami gana paprasti SMBH maitinimo aprašymai, priklausantys nuo laisvai parenkamų parametrų. Norint tyrinėti galaktikos aktyvumo poveikį mažesniuose, galaktikos centrų masteliuose, reikalingas detalesnis SMBH maitinimo aprašas, leidžiantis teisingai atkurti galimą poveikio kitimą laike.

Šiame darbe nagrinėjama galaktikos centro evoliucija po dujų žiedo ir dujų debesies susidūrimo, inicijuojančio SMBH aktyvumo (AGN) epizodą, aplinkoje, panašioje į Paukščių Tako centrą. pasitelkus *Gadget-3* [1] hidrodinaminį kodą, sukurtas 12 modelių rinkinys, kuriame sekama sistemos evoliucija be SMBH grįžtamojo ryšio (nFB), bei su grįžtamoju ryšiu, kuriu iškart vos tik SMBH dalelė praryja dujas (INST) arba reguliuojamu subraiškinio akrecinio disko modelio (FB) [2]. FB naudojamas akrecinio disko modelis yra standartinis plonas akrecinis diskas, kurio pagrindinė paviršinio tankio evoliucijos lygtis [3,4]:

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

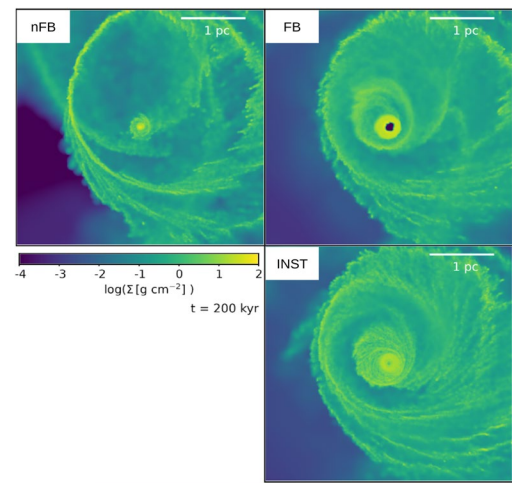
gaunama pritaikius P-W potencialą [5]:

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

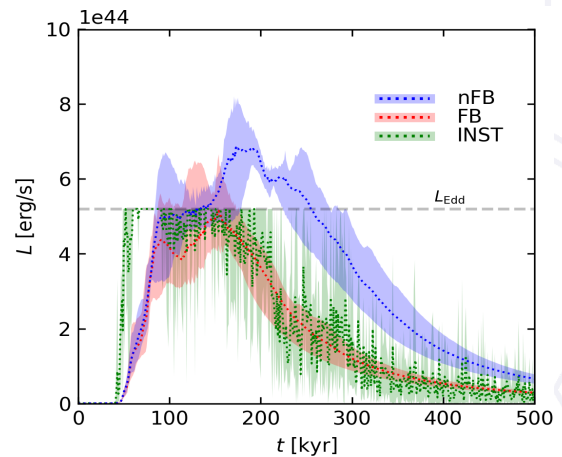
Lygtis (1) sprendžiama kartu su likusiu modeliu, sinchronizuojant laiko žingsnius ties SMBH dalelės laiko žingsniais.

Po susidūrimo pradinė sistema išardoma. Nemaža dujų dalis krenta centro link ir maitina SMBH dalelę. FB modeliuose akrecinis diskas natūraliai prislopina kuriamą šviesį bei pavėlina jo veikimą, lyginant su INST modeliu. FB modelių centruose susiformuoja aiški tuštuma, kuri neatkuriama INST modelių, nors bendra aktyvumo periodo metu išlaisvinta energija juose didesnė, nei FB modeliuose. Be to, akrecinio disko sekimas leidžia įvertinti per išorinį jo kraštą pabėgančios medžiagos kiekį. Detalesnio SMBH akrecijos aprašo naudojimas reikšmingai keičia galaktikos centro evoliuciją, lyginant su keliais

kitais tipiniais, skaitmeniniuose modeliuose naudojamais aprašais. Ateityje metodas bus naudojamas AGN poveikio žvaigždžių formavimuisi centrinėje molekulinėje zonoje ir centriniam žvaigždžių telkinyje tyrimui.



1 pav. Tankio žemėlapiai praėjus 200 tūkst. m. FB stebima aiški centrinė ertmė, neatsiradusi INST. nFB formuojasi labiau centre susitelkę ir iškreipti diskai.



2 pav. Šviesio kitimas laike. Punktyrinės linijos - vidutinės vertės to pat tipo modeliuose, nuspaldintos sritis - variacija.

Literatūra

1. V. Springel, MNRAS, **364**, 1105-1134, (2005).
2. M. Tartėnas and K. Zubovas, MNRAS, **516**, 2522-2539, (2022).
3. J. E. Pringle, ARA&A, **19**:137-162, (1981).
4. N. I. Shakura and R. A. Sunyaev, A&A, **24**, 337-355, (1973).
5. B. Paczynsky and P. J. Wiita, A&A, **500**, 203-211, (1980).

STUDY OF ELECTROCHEMICAL BIOSENSORS FOR THE DETECTION OF ANTIBODIES AGAINST SARS-COV-2

Maryia Drobysh¹, Viktorija Liustrovaite², Alma Rucinskiene³, Ausra Baradoke¹, Almira Ramanaviciene², Ieva Plikusiene^{1,2}, Urte Samukaite-Bubniene^{1,2}, Roman Viter⁴, Chien-Fu Chen⁵, Arunas Ramanavicius^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanotechnology, 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 application of electrochemical methods for the detection of antibodies against the severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) Spike protein was investigated. The research aimed to find optimal experimental conditions through the use of various electrochemical methods, substrate materials, as well as methods for immobilizing a sensor element, namely, recombinant Spike protein (rSpike).

In the first study, we used a custom-built three-electrodes electrochemical cell. The working electrode was a microscopic slide coated with Au by sputtering. The rSpike was immobilized on the surface by employing the mixture of thiol-based self-assembled monolayers (SAMmix), namely, 1-mercaptopundecanoic acid (11-MUA) and 6-mercapto-1-hexanol (6-MCOH). Further, we performed stepwise incubation with antibodies against Spike protein (anti-rSpike) in the range of concentrations. All stages of surface modification were accompanied by cyclic voltammetry (CV) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS) (fig. 1). The anti-rSpike was detected with a limit of detection (LOD) of 2.53 nM and 1.99 nM using CV and EIS methods, respectively [1].

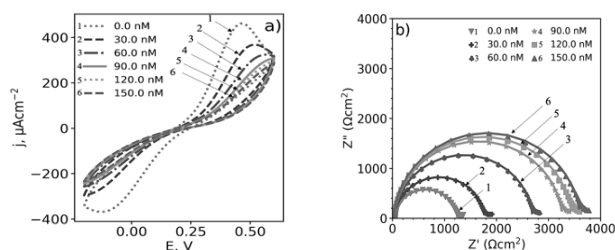


Fig. 1. A - Cyclic voltammograms and B - Nyquist plots after affinity interaction with anti-rSpike of different concentrations (0-150 nM). Potential scans range from -0.2 to +0.6 V vs Ag/AgCl(KCl sat) at 50 mV/s. EIS measurements were performed from 100 kHz to 0.1 Hz, at 10 mV amplitude, and applied potential 0.2 V vs Ag/AgCl(KCl sat). CV and EIS measurements were performed in PBS pH 7.4 while adding 2 mM of $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$, signal normalised to the geometrical area of the working electrode (0.179 cm²).

The next experiment was working on the data gained from using screen-printed carbon electrodes (SPCE)

modified with Au nanostructures (AuNS) by electrodeposition. Herein, we used L-cysteine as SAM, while other stages of the experiment remained unchanged. In this work, CV and differential pulse voltammetry (DPV) were used for signal registration (fig. 2). It was revealed, that for these systems LOD for the detection of anti-rSpike for CV and DPV are 0.27 nM and 0.14 nM, correspondingly [2].

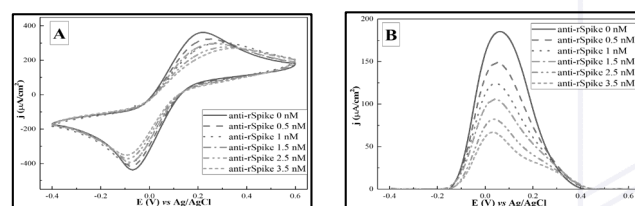


Fig. 2. Cyclic voltammograms (A) and differential pulse voltammograms (B) after interaction with anti-rSpike antibodies of different concentrations (0-3.5 nM). The potential range was from -0.4 to +0.6 V, with a CV scan rate of 0.05 V/s, DPV step size of 0.004 V, pulse height of 0.05 V, pulse period of 100 ms, and pulse width of 50 ms, in 1 mM PBS, pH 7.4, containing 2 mM $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$. The signal was normalised to the geometrical area of the working electrode (0.126 cm²).

Comparing LODs for the CV technique in both experiments, we can conclude that the system based on the AuNS-modified SPCE is more sensitive toward anti-rSpike detection. Noteworthy is that using SPCE improves the reproducibility of the biosensor as well. However, among all applied electrochemical methods, DPV is the fastest technique which revealed the lowest LOD.

Acknowledgements: These researches were conducted under the Lithuania-Latvia-China (Taiwan) project, and it has received funding according to agreement No S-LLT-21-3 with the Research Council of Lithuania (LMTLT) (No. 110-2923-E-002-004-MY3 for Taiwan).

References

1. V. Liustrovaite, M. Drobysh, A. Rucinskiene, A. Baradoke, A. Ramanaviciene, I. Plikusiene, U. Samukaite-Bubniene, R. Viter, C-F. Chen, A. Ramanavicius, J. Electrochem. Soc. **169**(3), 037523 (2022).
2. M. Drobysh, V. Liustrovaite, A. Baradoke, R. Viter, C-F. Chen, A. Ramanavicius, A. Ramanaviciene, Biosensors. **12**(8), 593 (2022).

DISTRIBUTED FEEDBACK QUANTUM CASCADE LASER ABSORPTION SPECTROSCOPY FOR AIRBORNE METHANE MEASUREMENTS

Laurynas Butkus, Žilvinas Ežerinskis, Artur Plotnikov, Anton Koroliov, Justina Šapolaitė, Algirdas Pabedinskas, Artūras Plukis, Vidmantas Remeikis

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nuclear Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: laurynas.butkus@ftmc.lt

The intensive development of industry, agriculture, and transportation causes many issues related to the negative impact on the environment and human health. Harmful products of human technogenic activity accumulate in the environment. Due to increasing concentrations of greenhouse gases (methane, carbon dioxide, etc.), the effects of global warming are already being observed. Research that addresses the challenges of climate change mitigation and creates science-based assumptions for new environmental monitoring systems and technologies is becoming more and more relevant.

A new two drone system with a variable optical path for measuring greenhouse gases (CH_4 , CO_2) is currently in development. Here, we will present a distributed feedback (DFB) quantum cascade laser absorption spectroscopy system which is used for measuring methane concentrations in the atmosphere. The DFB laser for methane measurements is being operated at 3371.5 nm and 3368.8 nm, for higher and lower concentrations respectively. Measurement capabilities and detection limits of the system will be presented and discussed.

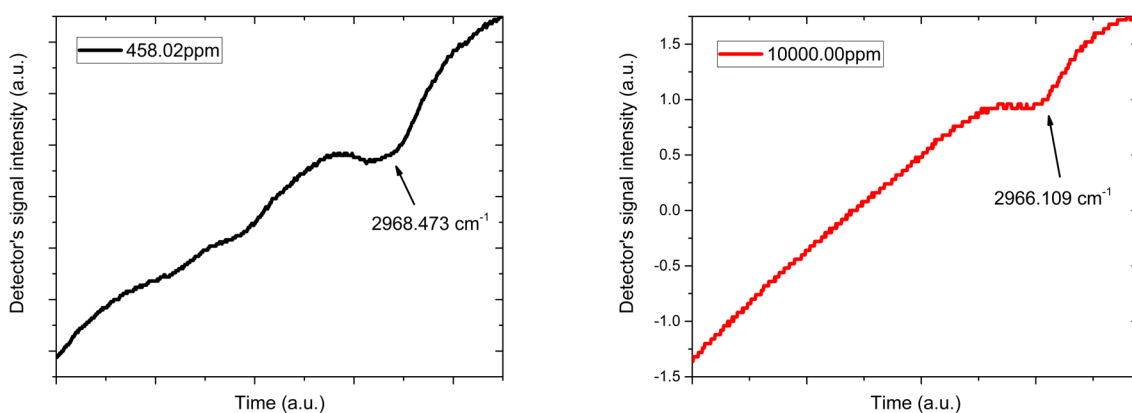


Fig. 1. Absorption spectra of methane at 3368.8 nm and 3371.5 nm. Laser current was modulated with a sawtooth signal.

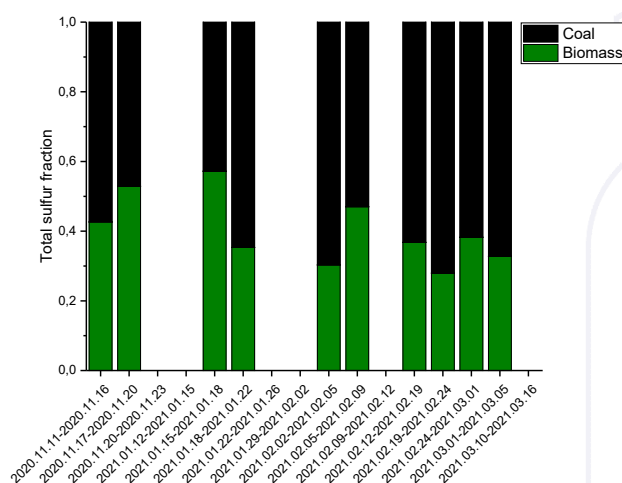
STABIILIŲJŲ ANGLIES IR SIEROS IZOTOPŲ SANTYKIO IR RADIOANGLIES METODŲ TAIKYMAI AEROZOLIŲ TARŠOS ŠALTINIŲ CHARAKTERIZAVIMUI

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

Antropogeninės taršos miesto aplinkoje neatsiejama dalis yra anglies ir sieros aerolinės dalelės, kurios savo ruožtu daro neigiamą poveikį žmonių sveikatai, klimato kaitai ir matomumui [1, 2]. Lokalūs miesto taršos šaltiniai yra elektrinės, transporto priemonių, biomasės deginimas, pramoninės emisijos. Tačiau tolimesni taršos šaltiniai taip pat gali daryti didelę įtaką vietiniam klimatui, ypač KD_1 pavidalo dalelės, kurios, suspenduotos ore, gali išlikti iki kelių savaičių ir nukeliauti šimtus kilometrų. Pirminės dalelės, patekusios į atmosferą, dalyvauja įvairiose cheminėse ir fizikinėse reakcijose, kurios keičia jų struktūrą ir sudėtį. Vienas iš pavyzdžių yra SO_2 heterogeninės oksidacijos reakcijos ant aerolinės dalelės paviršiaus. Svarbus kietųjų dalelių analizės metodas yra stabilųjų izotopų santykio masių spektrometrija, suteikianti informacijos apie jų šaltinius. Papildomas radioanglies metodo pritaikymas leidžia mums išsamiau atskirti antropogeninius taršos šaltinius. Šių dviejų metodikų derinys buvo pritaikytas šiame darbe siekiant charakterizuoti KD_1 aerolinės taršos šaltinius [3]. Sieros ir anglies stabilūs izotopų matavimai buvo atlikti naudojantis stabilųjų izotopų masės spektrometru, o radioanglies matavimai atlikti naudojant vienos pakopos greitintuvo masės spektrometrą. Išmatuotos $\delta^{34}S$, $\delta^{13}C$, ^{14}C ir SO_2^{-4} , TC koncentracijų vertės buvo lyginamos su oro

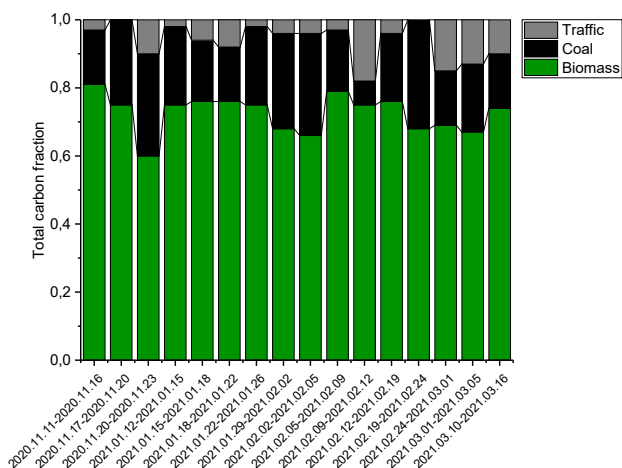
monitoringo duomenimis ir atgalinėmis oro masių pernašos trajektorijų modeliais. Pritaikius maišymosi lygtį buvo išskirti pagrindiniai aerolinės dalelių šaltiniai (1 ir 2 pav.).



2 pav. Anglies ir biomasės deginimo šaltinių pasiskirstymas aerolinės sieros frakcijoje.

Literatūra

1. C. A. Pope ir D. W. Dockery, "Health effects of fine particulate air pollution: Lines that connect", *J. Air Waste Manag. Assoc.*, t. 56, nr. 6, 2006.
2. C. Tomasi, C. Lanconelli, M. Mazzola, and A. Lupi, "Aerosol ir Climate Change: Direct and Indirect Aerosol Effects on Climate", *Atmospheric Aerosols*, 2016.
3. I. Garbarienė, A. Garbaras ir V. Remeikis, "Origin identification of carbonaceous aerosol particles by carbon isotope ratio analysis", *Aerosol Air Qual. Res.*, 2016.



1 pav. Transporto emisijų, anglies deginimo ir biomasės deginimo šaltinių pasiskirstymas aerolinės anglies frakcijoje.

MIKRODUMBLIŲ APDOROJIMAS TAIKANT ŠALTOSIOS PLAZMOS IR IMPULSINIO ELEKTRINIO LAUKO POVEIKĮ

Kamilė Jonynaitė¹, Rolandas Uscila², Skirmantas Keršulis¹, Žydrūnas Kavaliauskas²,
Liutauras Marcinauskas², Arūnas Stirkė¹, Voitech Stankevič¹

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

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

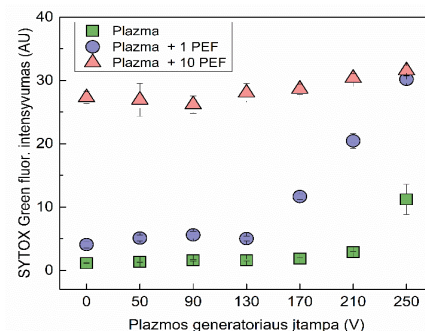
Mikrodumbliai vertingas maistinių medžiagų ir biologiškai aktyvių junginių šaltinis. Siekiant užtikrinti pastarųjų junginių prieinamumą vartotojams, būtina padidinti ekstrakcijos išeigą ir sumažinti proceso kaštus. Priešingai nei įprasti cheminiai ar mechaniniai dumblių apdorojimo metodai, impulsinis elektrinis laukas (angl. pulsed electric field (PEF)) ir neterminis plazminis apdorojimas išsiskiria kaip turintys didžiausią potencialą spręsti minėtas problemas.

Jau yra tyrimų, įrodančių jog žinduolių ir bakterijų ląstelių membranos, po apdorojimo plazma, tampa jautresnės PEF poveikiui [1,2]. Manoma, jog tai nulemia plazmos generuojamų radikalų sąveika su membranoje esančiais lipidais. Ko pasekoje, sumažėja energijos kiekis reikalingas inicijuoti plazminės membranos pralaidumo padidėjimą. Tačiau iki šiol nėra žinoma, kaip kombinuotas plazmos ir PEF apdorojimas veikia mikrodumblių ląsteles. Todėl šio darbo tikslas yra išsiaiškinti plazmos ir PEF poveikio efektyvumą gerinant mikrodumblių vertingų junginių ekstrakciją.

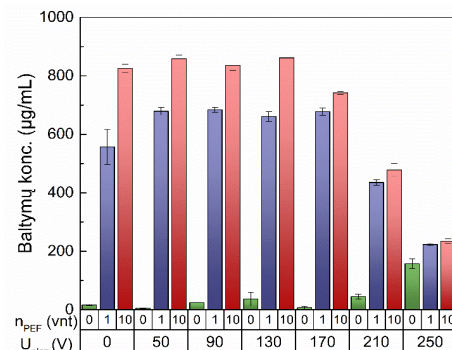
Šiam tikslui įgyvendinti slenkančio lanko išlydžio ir PEF technologijos buvo panaudotos gėlavandenių dumblių *Chlorella vulgaris* apdorojimui. Plazmai generuoti buvo taikomi šie parametrai: suslėgto oro srauto greitis ~22,8 L/min, atstumas tarp "peilio ašmenų" tipo elektrodų ir dumblių suspensijos paviršiaus 30 mm, apdorojimo trukmė 300 s, plazmos generatoriaus įtampa 50-250 V, dažnis 270 kHz. Apdorojant PEF buvo taikomi 10 μs trukmės, 1-10 impulsų, kurių pasikartojimo dažnis 1 Hz ir elektrinio lauko stipris 23-25 kV/cm. Po apdorojimo nustatyti dumblių suspensijos elektrinio laidumo, ląstelių pralaidumo ir išskirtų baltymų koncentracijos pokyčiai. Neapdorota dumblių suspensija buvo naudojama kaip kontrolė. Gauti ląstelių pralaidumo rezultatai parodė jog plazmos poveikis atskirai pasižymi mažesniu efektyvumu nei PEF (1 pav.). Didžiausias SYTOX Green dažo fluorescencijos intensyvumas gautas veikiant 250 V plazmos iškvos įtampa. Tuo tarpu, efektyvus dumblių ląstelių pralaidumo padidėjimas nustatytas taikant kombinacinį plazmos ($U > 170$ V) ir 1 PEF impulso poveikį. Tačiau, kombinacinio apdorojimo efektyvumas nebuvo užfiksuotas, kai dumblių suspensija buvo veikama plazmos ir 10 PEF impulsų poveikiu.

Baltymų ekstrakcijos požiūriu, didėjantis PEF impulsų skaičius nulėmė 550-800 μg/mL baltymų ekstrakciją (2 pav.). Tuo tarpu plazmos apdorojimas atskirai baltymų ekstrakciją iniciavo tik taikant stipriausią plazmos iškvos įtampą (210-250 V). Kombinacinio plazmos ir PEF efektyvumas nustatytas tik naudojant 50-170 V plazmos įtampą ir 1 PEF impulsą. Priešingas efektas nustatytas apdorojant stipriausią plazmos iškvos įtampą (210-250 V) ir PEF. Gauta *C. vulgaris* baltymų koncentracija buvo mažesnė, nei apdorojant su PEF atskirai.

Siekiant išsiaiškinti sumažėjusio baltymų ekstrakcijos efektyvumo priežastį bus atlikti tolesnį kombinuoto plazmos ir PEF apdorojimo tyrimai.



1 pav. Dumblių ląstelių pralaidumo priklausomybė nuo apdorojimui naudojamos plazmos iškvos įtampos ir PEF impulsų skaičiaus.



2 pav. Išskirtų baltymų koncentracijos priklausomybė nuo plazmos iškvos įtampos (U_{plaz}) ir PEF impulsų skaičiaus (n_{PEF}).

Literatūra

- C.M. Wolff, A. Steuer, I. Stoffels, T. von Woedtke, K.-D. Weltmann, S. Bekeschus, J.F. Kolb, Clinical Plasma Medicine. **16** (2019).
- Q.Zhang, J.Zhuang, T. von Woedtke, J.F.Kolb, J.Zhang, J.Fang, K.-D.Weltmann, Appl. Phys. Lett. **105** (2014).

INDOOR-OUTDOOR INFILTRATION OF SUBMICRON PARTICULATE MATTER IN THE MECHANICALLY VENTILATED BUILDING

Daria Pashneva, Inga Garbarienė, Julija Pauraitė, Agnė Minderytė, Karolis Sarka, Vadimas Dudoitis, Lina Davulienė, Mindaugas Gaspariūnas, Vitalij Kovalevskij, Danielis Lingis, Laurynas Bučinskas, Justina Šapolaitė, Žilvinas Ežerinskis, Kristina Plauškaitė-Šukienė, Steigvilė Byčenkienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environment
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: daria.pashneva@ftmc.lt

Nowadays, natural ventilation is often replaced or at least partially provided by a mechanical ventilation/filtration system in modern buildings. In low-energy buildings, outdoor particulate matter (PM) enters the indoor environment mainly through the ventilation system. Thus, exposure to PM often depends on filtration efficiency, temperature and humidity control, and air exchange rate [1,2]. Several studies have shown that mechanical ventilation and air filtration systems can significantly reduce the penetration of PM into residential and office buildings [3,4,5].

The purpose of the study was to study the chemical composition and sources of submicron aerosol particles (PM_{10}) indoors and outdoors to assess the impact of atmospheric PM pollution on indoor air quality.

Online measurements of PM_{10} chemical composition were performed using an Aerosol Chemical Speciation Monitor (ACSM (organics, sulfate, and nitrate)) and an Aethalometer (equivalent black carbon, BC). In parallel with the online measurements, filter-based elemental composition and were performed using a Particle-Induced broad-beam X-ray Emission (PIXE) and a Single Stage Accelerated Mass Spectrometer (SSAMS), respectively. Measurements were carried out during the heating season from 2020.10.15 to 2021.02.08 at the Center for Physical Sciences and Technologies in Vilnius, Lithuania.

Emissions from biomass burning (BB) during the heating season are an important contributor to the carbonaceous fraction of PM_{10} pollution in Vilnius, Lithuania. The predominant share of outdoor PM_{10} was organic matter (49%), while sulfates, nitrates and BC accounted for 25%, 17% and 8%, respectively. The concentrations of organic substances, sulfates, nitrates and BC in the open air were $7.31 \pm 6.54 \mu g/m^3$, $3.74 \pm 2.95 \mu g/m^3$, $2.50 \pm 2.33 \mu g/m^3$ and $1.20 \pm 0.97 \mu g/m^3$, respectively. Total trace elements account for only 1% of outdoor PM_{10} at an average mass concentration of $0.16 \pm 0.09 \mu g/m^3$.

The concentrations of all PM_{10} components were significantly lower (~90%) indoors than outdoors due to the use of a highly efficient three-stage building filtration system (G4-F7-F9). The low infiltration coefficient (~0.03) of all PM_{10} components studied indicates that the filtration system provides a high degree of protection against pollution by particles of various origins and significantly reduces indoor PM_{10} exposure. The average contribution of organic matter, sulfates, nitrates, BC and ME in the room was 59%, 24%, 11%, 5% and 1%, respectively. I/O ratios of semivolatile PM_{10} components depended on the magnitude of the temperature and the relative humidity gradients between indoor and outdoor spaces. During the week, the contribution of BB sources remained ~19% (outdoors) and 21% (indoors). The I/O ratio of BC was almost unchanged during the week (0.03 - 0.04) due to the absence of indoor sources under non-occupied conditions.

References

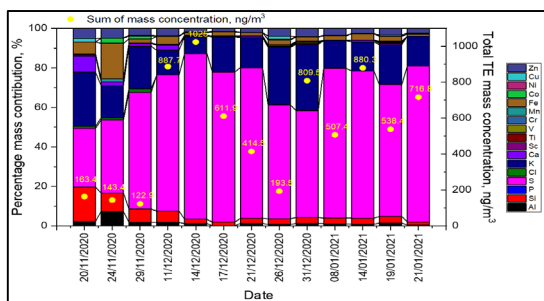
1. I. Stasiulaitiene, E. Krugly, T. Prasauskas, D. Ciužas, L. Kliucininkas, V. Kauneliene, D. Martuzevicius, Build. Environ. 157 (2019) .
2. B. Stephens, J.A. Siegel, Indoor Air 22 (6) (2012).
3. M. Jamriska, L. Morawska, B.A. Clark, Indoor Air 10 (1) (2000) .
4. J.L. Parker, R.R. Larson, E. Eskelson, E.M. Wood, J.M. Veranth, Indoor Air 18 (5) (2008).
5. K. Partti-Pellinen, O. Marttila, A. Ahonen, O. Suominen, T. Haahtela, Indoor Air 10 (2) (2000).

ORO TARŠOS ŠALTINIŲ KILMĖS NUSTATYMAS VILNIAUS MIESTE

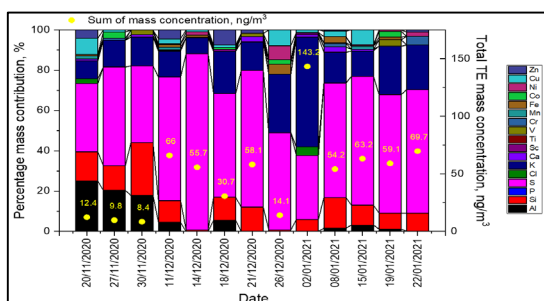
Audrė Kalinauskaitė, Inga Garbarienė, Agnė Minderytė, Julija Pauraite,
Vadimas Dudaitis, Lina Davulienė, Kristina Plauškaitė-Šukienė, Vitalij Kovalevskij,
Mindaugas Gaspariūnas, Steigvilė Byčėnienė

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

Intensyvesnis pirotechnikos gaminių naudojimas ir biomasės deginimas atvirose vietose įvairių švenčių metu sukelia staigų aerozolio dalelių koncentracijos ore padidėjimą [1,2], kuris yra žalingas sveikatai, ypač pažeidžiamoms visuomenės grupėms [3]. Pirmasis tyrimo tikslas – ištirti pėdsakinių elementų koncentracijų svyravimus 2020 m. lapkričio – 2021 m. sausio mėn. miesto foninėje aplinkoje (Vilnius, 54.64N, 25.18E). Pasitelkus mažo tūrio mėginių ėmiklį SVEN LECKEL, LVS6 ir rentgeno analizės įrangą CANBERRA SL30165 ir CANBERRA DSA1000 buvo atlikta vidaus ir lauko oro filtrų (PTFE ir PCTE) mėginių elementinė kiekybinė analizė. Gruodžio 31 dienos lauko oro filtrų mėginyje buvo nustatytos padidėjusios elementų koncentracijos (ng/m^3): K (271.1), S (439.3), Zn (33.4), Si (23.7), Fe (17.8), Al (10.2), V (3.5), Co (2.00), Sc (1.4), Cr (1.7) ir Mn (1.1) (1 pav.).



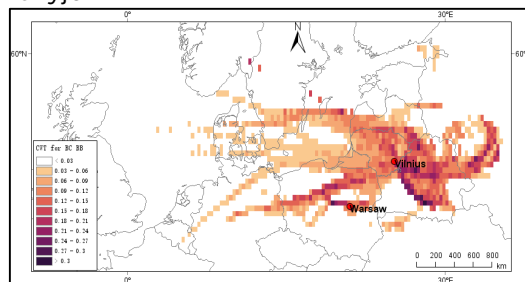
1 pav. Pėdsakinių elementų koncentracija ir indėlis masės koncentracijai lauko oro mėginiuose prieš, per ir po Naujųjų metų 2020–2021 m.



2 pav. Pėdsakinių elementų koncentracija ir indėlis masės koncentracijai vidaus oro mėginiuose prieš, per ir po Naujųjų metų 2020–2021 m.

Vidaus oro filtrų mėginyje, imto gruodžio 31 d. – sausio 2 d., nustatytas koncentracijos (ng/m^3) padidėjimas: K (77.8), S (45.3), Si (8.5), Cl (6.4), Ca (1.8), Cu (1.8), Sc (1.2) ir Mn (0.4) (2 pav). Koncentracijų padidėjimas buvo susijęs su inten-

syvesniu fejerverkų naudojimu žiemos švenčių laikotarpyje esant palankioms meteorologinėms sąlygoms oro taršos stiprėjimui atmosferos paribio sluoksnyje.



3 pav. CWT vertės 2022 m. birželio mėn.

Antrasis šio tyrimo tikslas – nustatyti 2022 m. birželio mėn. į Vilnių atkeliavusių oro masių, turėjusių didesnę juodosios anglies (susidariusios iš biomasės deginimo, BC_{BB}) koncentraciją, galimus šaltinių regionus ir trajektorijas. Šiam tikslui buvo naudojami klasterinės analizės, potencialaus šaltinio indėlio funkcijos (Potential Source Contribution Function, PSCF) ir koncentracija normuotos trajektorijos (Concentration Weighted Trajectory, CWT) metodai. BC koncentracija buvo matuojama septynių bangos ilgių (370–950 nm) Aetalometru (A Magee Scientific Company Model AE31 Spectrum, manufactured by Optotek, Slovenia) Vilniuje (FTMC, 54.72N, 25.32E). 72 valandų atgalinės oro masių trajektorijos buvo klasterizuotos į keturis klasterius: oro masių slinkimas iš ŠV (1 klasteris) sudarė 28.75%, iš V (2 ir 4 klasteriai) sudarė atitinkamai 32.22% ir 9.44% bei iš R (3 klasteris) sudarė 29.58%. Didžiausios BC_{BB} koncentracijos buvo stebėtos oro masėms slenkant iš ŠV ($0.17 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ir R ($0.18 \mu\text{g}/\text{m}^3$) krypčių. PSCF metodas parodė, kad potencialūs BC_{BB} šaltinių regionai buvo Baltarusijos, Rusijos ŠV ir Latvijos P teritorijos. Tai patvirtina CWT vertės (3 pav.): oro masės, turėjusios didžiausias biomasės deginimo sąlygotas BC koncentracijas, keliavo iš Baltarusijos, Lenkijos V-R, Rusijos ŠV, Latvijos P bei Baltijos jūros teritorijų.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-20-28.

Literatūra

1. F.E. Greven, J.M. Vonk, P. Fischer, F. Duijm, N.M. Vink, and B. Brunekreef, Sci. Rep. **9**, 5735 (2019).
2. R.L. Cordell, M. Mazet, C. Dechoux, S.M.L. Hama, J. Staelens, J. Hofman, C. Stroobants, E. Roekens, G.P.A. Kos, E.P. Weijers, K.F.A. Frumau, P. Panteliadis, T. Delaunay, K.P. Wyche, P.S. Monks, Atmos. Environ. **141**, 276–28 (2016).
3. N. Englert, Toxicol. Lett. **149**, 235–242 (2004).

TECHNOLOGY OF 3D CERAMIC PRINTING

Alireza Shahidi

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technology,
3D Technologies and Robotics Laboratory
Savanoriu 231, Vilnius, email Alireza.shahidi@ftmc.lt

Introduction

Additive manufacturing is defined by ISO 17296 and ASTM F2792 to be “the process of joining materials to make parts or objects from 3D model data, usually layer upon layer, as opposed to subtractive manufacturing methodologies [1]. There are some different method to produce ceramic parts from CAD model, Stereolithography (STL) is based on exposure of UV-curing photopolymer (resin), which is deposited layer-wise by a sweeper before the cross-section is scanned by a focused laser beam according to the 3D CAD data [2]. Fused Deposition Modeling (FDM) was firstly commercialized by STRATASYS in 1991 for prototyping and production of lost molds for investment casting and injection molding. 3D parts are processed layer-wise by extruding build material and supporting material through heated nozzles, which move in lateral directions [3]. Selective Laser Sintering (SLS) was invented at the University of Texas at Austin and patented by Carl Deckard in 1989. During processing, thin layers of powder material < 100 μm are repetitively deposited by a wiper onto the build platform before the layer information is selectively sintered according to the 3D CAD data. [4]

Development

On material preparation an ultrasonic separator developed to separated agglomerated powder by remained powder after processing and mixing new powder for continues process, as ceramic powder are low density and fine so separation process takes about twelve hours and mesh clog rapidly, by ultrasonic sieve the separation time reduce to five minutes.



Figure 1) Developed ultrasonic sieve for material preparation

For the wet ceramic 3D printer a servo mechanism and screw based extruder designed and developed and 2 mm diameter of final nozzle selected, As additive manufacturing is a multidisciplinary technology [5] so a XYZ computer numerical control needed for extruder movement by predefined path. Yaskawa Motoman robot MH5S, selected 6 DOF manipulator mechanism. This robot is a industrial robot and required customized software for path generation and then transform to robotic motion language. For powder bed selective laser sintering a seven DOF servo

mechanism developed. For material chamber elevator, product chamber elevator, powder roller rotation and powder roller lateral movement, XYZ control of laser scanning head, the SLS machine developed to for SLS and SLM [7] technology for ceramic material.

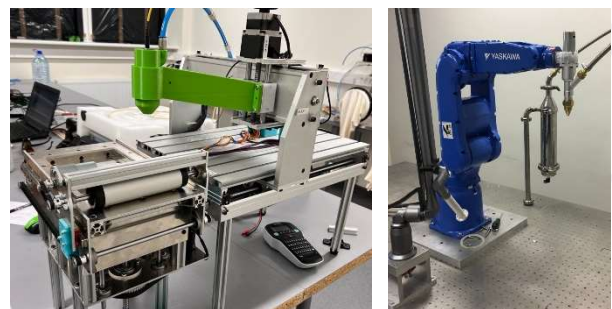


Figure 2) SLS and Robotic FDM developed machine

Experimental study

Based on literature about Ceramic selective laser sintering Zirconium oxide and Zirconia, Alumina, Silica equal mixture selected and by different energy density of diode laser by 976 nm wave length sintered to do single track test.

Conclusion

Additive manufacturing of ceramics become a technology trend and two main technology in this filed are wet extruding ceramic and dry powder bed technology, by the developed machine its possible to test different material and sintering laser wavelength which is not possible on commercial available 3D printers.

References

1. Michael Schmidt, Marion Merklein Laser based additive manufacturing in industry and academia (CIRP Annals - Manufacturing Technology 66 (2017) 561–583)
2. S. Gruber, J. Stampfl, R. Felzmann, S. Springer & R. Liska. Lithographiebasierte Fertigung keramischer Bauteile. RTejournal - Forum für Rapid Technologie, 8:(2011), 1–5.
3. Stratasys, Inc. Rapid Prototyping Using FDM: A Fast, Precise, Safe Technology. In H. L. Marcus, J. J. Beaman, J. W. Barlow, D. L. Bourell & R. H. Crawford, eds., Solid Freeform Fabrication Symposium, 1992
4. C. R. Deckard. Method and Apparatus for Producing Parts by Selective Sintering. U.S. Patent 4.863.538, 1989
5. C. K. Chua, K. F. Leong & C. S. Lim. Rapid Prototyping: Principles and Applications (Singapore: World Scientific Publishing Co. Pre. Ltd.), 2nd edn., 2003
6. J. Wilkes. Selektives Laserschmelzen zur generativen Herstellung von Bauteilen aus hochfester Oxidkeramik. Ph.D. thesis, RWTH-Aachen, 2009
7. I. Yadroitsev*, I. Smurov (Selective laser melting technology: from the single laser melted track stability to 3D parts of complex shape), Physics Procedia 5 (2010) 551–560

ADVANCES IN THE DESIGN OF WIRELESS SENSOR NETWORKS FOR ENVIRONMENTAL MONITORING AND ITS IMPLEMENTATION USING SSAIL TECHNOLOGY

Shathya Duobiene¹, Karolis Ratautas¹, Romualdas Trusovas¹, Paulius Ragulis², Gediminas Šlekas², Rimantas Simniškis² and Gediminas Račiukaitis¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technologies, Savanoriu ave. 231, LT-02300 Vilnius, email: shathya.kodeeswaran@ftmc.lt

²Center for Physical Sciences and Technology, Department of Physical Technologies, Saulėtekio ave. 3, LT-10257 Vilnius

The functional aspect of IoT technologies and applications transforms real-world objects into smart objects and joins 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. The proposed embedded sensor node model with proprietary technology of FTMC- Selective Surface Activation Induced by Laser (SSAIL) to manufacture electrical circuits on free-shaped plastic bodies of the sensors with electronics [1]. A low-cost asynchronous web server for monitoring temperature and humidity sensors connected to the ESP32 Wi-Fi module has been developed.

Data from sensor nodes across the facility are collected and displayed in real-time charts on a web server. Multiple web clients on the same network can access the sensor data. The energy to the sensor nodes could be powered by harvesting energy from the surrounding sources of electromagnetic radiation. This automated and self-powered system monitors environmental and climatic factors, helps with timely action, and benefits sensor design by allowing antenna and rf-circuit formation on various plastics, even on the body of the device itself [2].

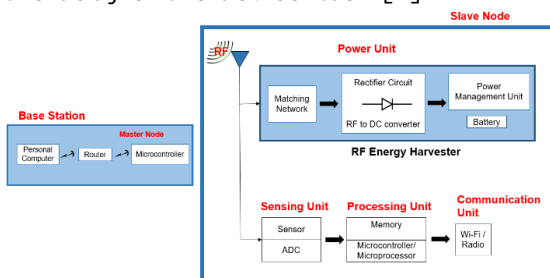


Fig. 1. Sensor node Architecture

The proposed IoT-based temperature and humidity monitoring framework comprises sensor nodes with ESP32 Wi-Fi module and a DHT11 temperature and humidity sensor with a power supply. In this research, the ESP32 microcontroller with a dual-core processor, and Wi-Fi connectivity was used. The sensor nodes connect with a base

station either directly or via Wi-Fi-enabled nodes near the base station. The base station provides connectivity to the internet. Sensor data can be obtained via connecting to the internet.

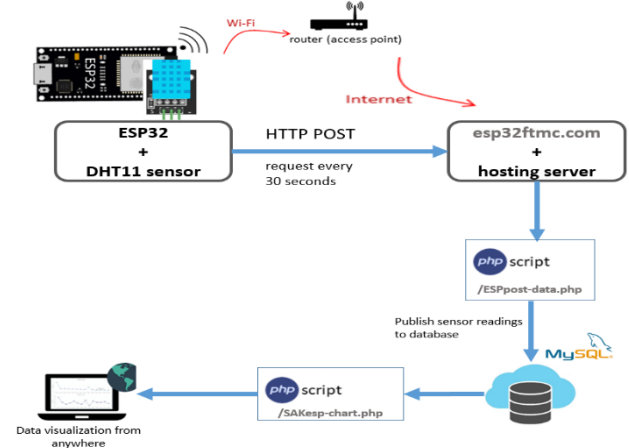


Fig. 2. Overview of hosting PHP application and MySQL database

The estimated total power consumption of the sensor network with ten nodes is presented in Table 1 below. In light of the numerous communication channels, its duty cycles have been brought up for discussion. This particular operating regime has a duty cycle of 10 min intervals.

1 Table Power consumption of sensor network			
Nodes	If one duty cycle is 10 min, mW	If one duty cycle is 1h, mW	Overall Consumption per Day, mW
1	8,450	1,408	33,792
2	0,845	0,412	3,408
3-10	0,845	0,412	3,408
Time synchronisation	-	-	0,845
Overall Power consumption			65,31

References

1. S. Duobiene, K. Ratautas, R. Trusovas and G. Raciukaitis, *Design of an Internet of Things Network for Temperature and Humidity Monitoring and Its Implementation Using SSAIL Technology*. ICEIB 2021, pp. 23-27.
2. S. Duobiene, K. Ratautas, R. Trusovas, P. Ragulis, G. Slekas, R. Simniškis, G. Račiukaitis, *Development of Wireless Sensor Network for Environment Monitoring and Its Implementation Using SSAIL Technology*. Sensors 2022, 22, 5343.

INVESTIGATION OF THE TRANSPORT OF PU-239,240 AND CS-137 IN THE WATER SYSTEM CURONIAN LAGOON - NEMAN RIVER

Vitaliy Romanenko, Galina Lujanienė, Šemčuk Sergej, Jonas Mažeika, Olga Jefanova

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

Sediment transport with surface water is an important process in river systems, redistributing nutrients and pollutants. Particle-reactive radionuclides are a suitable tool for studying such processes [1].

The Curonian Lagoon area is a collector of sediments and associated substances from the catchment area of the Neman River with an area of about 100,458 km². The catchment area is contaminated with caesium and plutonium due to global fallout from nuclear weapons testing and the Chernobyl accident. The radionuclides enter and disperse in the area of the Curonian Lagoon and the coastal area of the south-eastern part of the Baltic Sea in the area of the Klaipėda Strait (Fig. 1).



Fig. 1. Scheme of transport of radionuclides of fallout on particles with surface runoff.

In this work, the content of plutonium and caesium in bottom sediments and suspended matter of the Neman River, the Curonian Lagoon and the south-eastern part of the Baltic Sea was investigated. The approximate annual inflow of radionuclides into the Curonian Lagoon with suspended sediments was calculated.

The theoretically estimated ^{239,240}Pu input from the Neman catchment is ~0.9 Gb/year. This estimation was based on assumption that the average plutonium inventory in the catchment area is 39 Bq/m² [2]. The residence time of plutonium in the catchment was set to 3,000 years for the calculations, which corresponds to an annual erosion rate of 0.023%. The calculations show that the amount of plutonium that accumulates in the lagoon each year is about 0.56 Gb.

The activity of ¹³⁷Cs in suspended sediments in the water of the Neris River ranged from 5±2 Bq/kg

to 10 ± 3 Bq/kg with a geomean value of 6.7 Bq/kg. Cesium activities were determined in the three fractions of suspended sediments: 0.2-1 mkm, 1-20mkm and >20 mkm. The higher activities were observed in the fraction >25 mkm (Fig. 2).

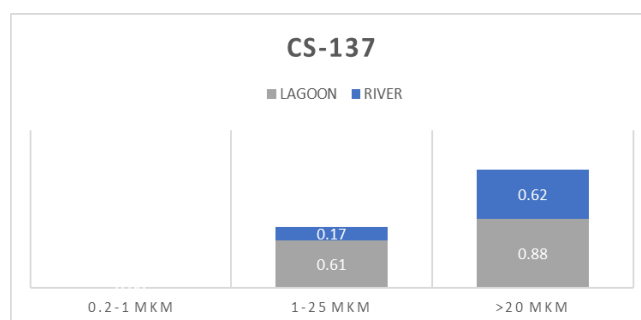


Fig. 2. Cesium activities (Bq/kg) in suspended sediments.

The activity level of ¹³⁷Cs in the fine fraction (<63 mkm) of bottom sediments was close to the suspended sediments at 5 Bq/kg. Based on previous observations, it was assumed that about 80% of the cesium occurs in dissolved form in the Neman River. The total flux is estimated to be 0.44 Ci/year, which is close to the previous estimates [3].

The analysis of the plutonium content in bottom sediments in the coastal area of the south-eastern Baltic Sea, where sediments are discharged from the Curonian Lagoon, was carried out. In the studied depth interval from 11 to 117 m, an increase in the range of plutonium concentrations from 0.03-0.15 to 0.12-1 Bq/kg is observed, which is explained by increased sedimentation rate per unit area as a result of sediment focusing processes.

References

1. G. Lujanienė, B. Šilobritienė, D. Tracevičienė, S. Šemčuk, V. Romanenko, G. Garnaga-Budrė, J. Kaizer, P.P. Povinec, Distribution of ²⁴¹Am and Pu isotopes in the Curonian Lagoon and the south-eastern Baltic Sea seawater, suspended particles, sediments and biota, J. Environ. Radioact. 249 (2022) 106892. <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106892>.
2. UNSCEAR Report to the General Assembly with Annexes. Ionising Radiation Sources and Biological Effects, pp. 228 and 238. UN Press, New York, (1982).
3. V. Lujanas, N. Tarasyuk, and N. Spirkauskaitė. "The peculiarities of radiocesium migration in the Nemunas-Neris water system (Lithuania)." Radionuclide transport dynamics in freshwater resources (2002): 77.

EVALUATION OF THE AEROSOL CHEMICAL COMPOSITION AT TWO MANILA MEGA-CITY SITES, PHILIPPINES

Tougeer Gill¹, Vadimas Dudoitis¹, Abdullah Khan¹, Kamilė Kandrotaitė¹, Agnė Minderytė¹,
Simonas Kecorius¹, Steigvilė Byčenkienė¹ and Kristina Plauškaitė¹

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

Black carbon (BC) particles have gathered worldwide attention due to their impacts on climate and adverse health effects on humans in heavily polluted environments. Therefore, it is crucial to deepen the knowledge of aerosols chemical composition and pathways of formation. Aerosol main chemical components were investigated in the urban environment of Manila mega-city: Quezon City's East Avenue roadside (QCG site) and Manila's North Port (Port site), Philippines by using aerodynamic particle sizer (APS), and Athalometer. The measurements were carried out during a 3-months period (20-12-2019 to 26-02-2020) in winter season.

Time series, diurnal trends, source apportionment of black carbon (BC) and particle size distribution, cumulative percentage of particulate matter (PM_1 , $PM_{2.5}$, PM_{10}) were analysed. During all measurement period black carbon emission from transport BC_{TR} had higher contribution (71-72 %) to the total black carbon than black carbon from wood burning BC_{WB} (28-29%). Diurnal trends of BC_{TR} and BC_{WB} were assessed in order to characterise possible day and night aerosol chemistry and sources. Diurnal trend of BC_{TR} at QCG site and Port site showed a higher mass concentration ($2.27 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $0.59 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively) during morning hours (3-6 h) and lower mass concentration ($0.76 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $0.19 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively) during daytime (11-12 h). Similar trend was observed for BC_{WB} mass concentration, which reached maximum ($0.81 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $0.19 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively) between 3-6 h and minimum ($0.35 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $0.16 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively) between 11-12 h (Fig 1).

During all measurement campaign particulate matter (PM_1 , $PM_{2.5}$, PM_{10}) had higher average mass concentration ($43.45 \pm 12.01 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, $102.09 \pm 25.95 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, and $326.18 \pm 48.05 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively) at the QCG site than the Port site particulate matter (PM_1 , $PM_{2.5}$, PM_{10}) average mass concentration ($37.04 \pm 9.38 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, $101.38 \pm 21.69 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, and $245.03 \pm 48.05 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ respectively). $PM_{2.5}$ and PM_{10} mass concentration at the QCG site and Port site reaches levels that are higher than the world health organization (WHO) ($PM_{2.5} = 15 \mu\text{g}/\text{m}^3$, $PM_{10} = 45 \mu\text{g}/\text{m}^3$) and Philippines (PHL) ($PM_{2.5} = 50 \mu\text{g}/\text{m}^3$, $PM_{10} = 150 \mu\text{g}/\text{m}^3$) clean air Act 24h limit. In addition to that daily limit set by WHO

($PM_{2.5} = 05 \mu\text{g}/\text{m}^3$, $PM_{10} = 15 \mu\text{g}/\text{m}^3$) and PHL clean air Act ($PM_{2.5} = 25 \mu\text{g}/\text{m}^3$, $PM_{10} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3$) for $PM_{2.5}$ and PM_{10} mass concentration were also exceeded during all the time of measurement campaign at both sites (Fig 2). Alas et al., (2018) in his study found the same results with the higher mass concentration of $PM_{2.5}$, PM_{10} and frequently exceeded the WHO and PHL daily standards. He also explained that the highest contributor to $PM_{2.5}$ is traffic sources and soot is a major component of $PM_{2.5}$ in Manila [1]. The results of this study could provide a better understanding regarding climate changes in Manila at local and global scale.

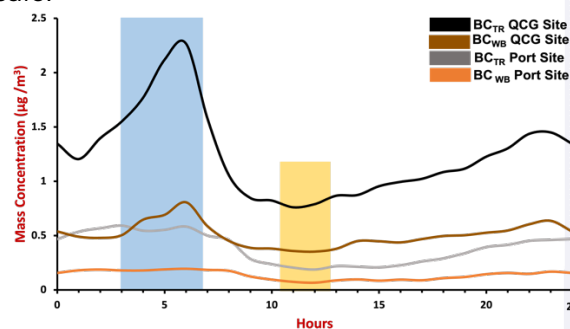


Fig. 1. BC_{TR} and BC_{WB} diurnal trend at Manila port site and QCG site.

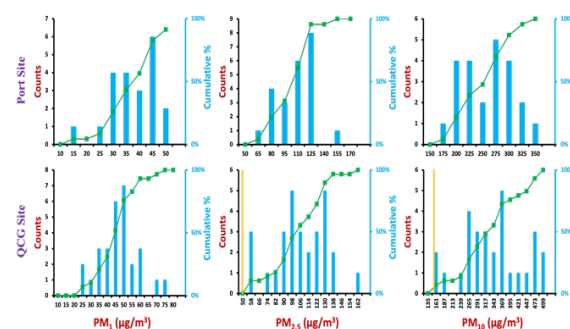


Fig. 2. Frequency count and cumulative frequency of PM_1 , $PM_{2.5}$ and PM_{10} at Manila port site and QCG site along with PHL 24 h (bold yellow line) limits for $PM_{2.5}$ and PM_{10} .

References

1. Alas, H. D., Müller, T., Birmili, W., Kecorius, S., Cambaliza, M. O., Simpas, J. B. B., ... Wiedensohler, A. (2018). Spatial Characterization of Black Carbon Mass Concentration in the Atmosphere of a Southeast Asian Megacity: An Air Quality Case Study for Metro Manila, Philippines.

ENHANCEMENT OF ROOM-TEMPERATURE LOW-FIELD MAGNETORESISTANCE IN NANOSTRUCTURED LANTHANUM MANGANITE FILMS FOR MAGNETIC SENSOR APPLICATIONS

Mykola Koliada¹, Nerija Zurauskiene^{1,2}, Voitech Stankevici^{1,2}, Skirmantas Kersulis¹, Milita Vagner¹, Valentina Plausinaitiene^{1,3}, Jorunas Dobilas¹, Remigijus Vasiliauskas¹, Martynas Skapas¹, Jaroslaw Pietosa⁴, Andrzej Wisniewski⁴

¹ Center for Physical Sciences and Technology, 10257 Vilnius, Lithuania; mykola.koliada@ftmc.lt

² Faculty of Electronics, Vilnius Gediminas Technical University, 03227 Vilnius, Lithuania

³ Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, 03225 Vilnius, Lithuania

⁴ Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences, 02-668 Warsaw, Poland

The increasing demand in magnetic field sensors and high-performance magnetometers has resulted in the rapid advance of various sensor technologies [1]. Different areas of sensor applications require diverse properties, from high sensitivity and detectivity for biomedical applications to a wide range of magnetic field sensing for industrial and scientific applications. Recent technological progress allows the fabrication of compact, small physical dimension sensors with increased sensitivity and reduced cost for mass production. Among commercially available MR sensors, the performance of which is based on such physical phenomena as anisotropic, tunneling, and giant magnetoresistance (AMR, TMR, and GMR, respectively) [1,2], the colossal magnetoresistance effect (CMR) is also promising for future sensor development technologies [3,4].

For a long time, the main disadvantages of the CMR effect – high sensitivity to ambient temperature variations and low room-temperature sensitivity to the magnetic field – were the main obstacles in the development of the CMR sensor technologies up to higher technological readiness levels (TRL).

In this study, the results of colossal magnetoresistance (CMR) properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (LSMO) films grown by the pulsed injection MOCVD technique onto an Al_2O_3 substrate are presented [5]. The grown films with different content of Sr ($0.05 \leq x \leq 0.3$) and Mn excess ($y > 1$) were nanostructured with vertically aligned column-shaped crystallites spread perpendicular to the film plane. It was found, that the microstructure, resistivity, and magnetoresistive properties of the films strongly depend on the strontium and manganese concentration. All films (including low Sr content) exhibit a metal-insulator transition typical for manganites at a certain temperature, T_m . The T_m vs. Sr content dependences for films with a constant Mn amount have maxima that shift to lower Sr values with the increase in Mn excess in the films. Moreover, the higher the Mn

excess concentration in the films, the higher the T_m value obtained. The obtained low-field MR values were relatively high in comparison to those published in the literature for lanthanum manganite films prepared without additional insulating oxide phases. It can be caused by high Curie temperature (383 K), high saturation magnetization at room temperature (870 emu/cm³), and relatively thin grain boundaries of the nanostructured films. The obtained results allow to fabricate CMR sensors for low magnetic field measurement at room temperature.

References

1. C. Zheng, K. Zhu, S. Cardoso de Freitas, J.-Y. Chang, J.E. Davies, P. Eames, P.P. Freitas, O. Kazakova, C.G. Kim, C.-W. Leung, *et al.* Magnetoresistive sensor development roadmap (non-recording applications). *IEEE Trans. Magn.* **55**, 1-30 (2019).
2. M.A. Khan, J. Sun, B. Li, A. Przybysz, J. Kosel, Magnetic sensors-A review and recent technologies. *Eng. Res. Express* **3**, 022005 (2021).
3. D. Pla, C. Jimenez, M. Burriel, Engineering of functional manganites grown by MOCVD for miniaturized devices. *Adv. Mater. Interfaces* **4**, 1600974 (2017).
4. T. Stankevič, L. Medišauskas, V. Stankevič, S. Balevičius, N. Žurauskienė, O. Liebfried, M. Schneider, Pulsed magnetic field measurement system based on colossal magnetoresistance-B-scalar sensors for railgun investigation. *Rev. Sci. Instrum.* **85**, 044704 (2014).
5. N. Zurauskiene, V. Stankevici, S. Kersulis, M. Vagner, V. Plausinaitiene, J. Dobilas, R. Vasiliauskas, M. Skapas, M. Koliada, J. Pietosa, A. Wisniewski. Enhancement of Room-Temperature Low-Field Magnetoresistance in Nanostructured Lanthanum Manganite Films for Magnetic Sensor Applications. *Sensors* **21**, 1293 (2021).

Development of silicon based Hybrid multi-phase fresnel lenses for THz frequencies

Surya Revanth Ayyagari¹, Simonas Indrišiūnas², and Irmantas Kašalynas¹

¹ Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Terahertz Photonics Laboratory, Saulėtekio 3, 10257 Vilnius, Lithuania

² Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Laser Microfabrication Laboratory, Savanoriu ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania

surya.revanth@ftmc.lt

Abstract: Engineering of hybrid diffractive fresnel lenses capable of efficient THz beam focusing is the main aim of this research work. The hybrid multi-phase Fresnel lenses (H-MPFLs) were successfully developed demonstrating up to 10 % higher values as compared to the standard design MPFL at target 0.585 THz frequency. The optimal phase offset was found to be of $+\pi/4$ independently on the hybridization order of the H-MPFL samples.

Diffractive optical elements, such as Fresnel lenses, define the beam shape by describing the phase and amplitude distribution of incident wave at the focal plane. Such Fresnel lenses may have different phase profiles like binary or multi-level step pattern that are of the order of wavelength to achieve a constructive interference of the beam. The MPFL introduces multiple phase shifts in the order of $2\pi/Q$ instead of only phase shift equal to 2π leading to high diffraction efficiency of the beam. The design of standard MPFL and H-MPFL can be described by analytical equation [1,2]:

$$r_n = \sqrt{\frac{2\lambda n \left(F + \frac{\lambda}{2Q(\sqrt{\epsilon}-1)} \left(1 + \frac{m}{8} \right) \right)}{Q}} + \frac{n^2 \lambda^2}{Q^2},$$

here r_n is the outer radius of n^{th} subzone, F is the focal length ($F=13\text{mm}$), λ is the designed wavelength ($\lambda=0.512\text{mm}$), Q – the number of phase quantization levels ($Q=8$), ϵ – the refractive index of HRFZ-Si substrate used ($\epsilon = 3.45$), and m – the optimization factor of phase. The depth of single subzone was defined as $d = \frac{\lambda}{Q(\sqrt{\epsilon}-1)} \left(1 + \frac{m}{8} \right)$. The H-MPFL with two times smaller amount of phase quantization levels at outer most zones were developed of high resistivity silicon by using the direct laser ablation technology. The focusing gain of hybrid lenses was found to be up to 10 % higher in comparison to a standard design MPFL (see Fig.1) validating a new approach suitability for development of new diffractive optical elements with much simpler and less complex fabrication details suitable for on-chip integration with other THz devices.

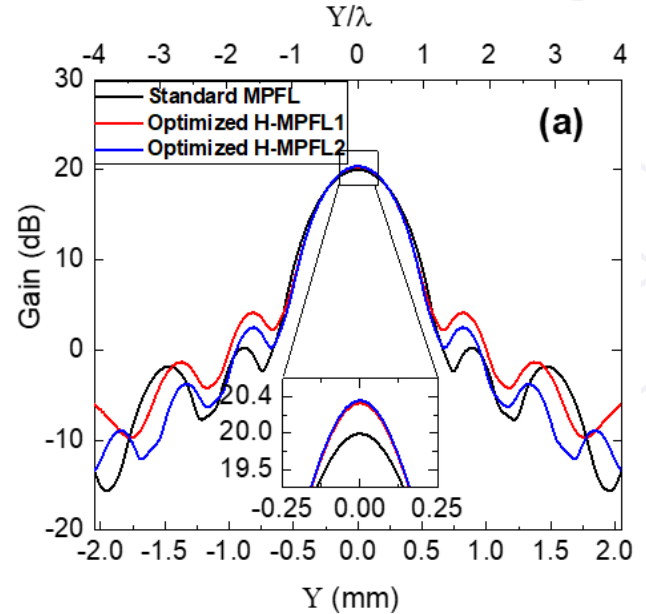


Fig: The simulated focusing gain characteristics at focal plane for the standard MPFL sample and two optimized H-MPFL1 and H-MPFL2 samples. The results are shown in semi-log scale, where $\text{dB} = 10 \log(\text{Gain})$. Inset shows the gain characteristics of the same samples in linear scale in zoomed area. Note, bottom axis is in millimeters, whereas top is normalized to the design wavelength λ .

References

1. H. D. Hristov, Fresnel zones in wireless links, zone plate lenses, and antennas. Artech House, 2000.
2. S. R. Ayyagari et al, "Hybrid Multi-Phase Fresnel Lenses on Silicon Wafers for Terahertz Frequencies," IEEE TTST (under revision).

INVESTIGATION OF TRANSMISSION AND EMISSION SPECTRA OF 2D PLASMONS IN GRATING-GATED AlGaIn/GaN HETEROSTRUCTURES AT TEMPERATURE 80 K

Daniil Pashnev, Roman M. Balagula, Justinas Jorudas, Liudvikas Subačius, Andrzej Urbanowicz and Irmantas Kašalynas

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

Electrically-driven tunable-frequency terahertz (THz) oscillators are desired solid-state devices for many new applications [1,2]. Electrical strength, high electron mobility, and temperature stability of III-nitride heterostructures serve as a promising material for the development of plasmonic devices in the THz range [3]. In this work, THz spectroscopy of 2D plasmons in grating-gated AlGaIn/GaN high-electron mobility transistor (HEMT) heterostructures were investigated in the transmission and emission geometries at liquid nitrogen temperature. The plasmonic samples were fabricated by positioning periodic metal stripes on top surface over an area of about $2 \times 2 \text{ mm}^2$. Three gratings with a filling factor of 50 % and the period of 600 nm, 800 nm, and 1000 nm were fabricated on the same sample with a size of about $10 \times 10 \text{ mm}^2$ in order to minimize fabrication uncertainties and nonuniformity of material parameters. The transmission spectra of the 2D plasmons were recorded using THz TDS system in the frequency range of 0.1-4 THz. The emission spectra of the same samples were measured by FTIR spectrometer in a wider spectrum range applying meander shape, 3 ms duration, and 50 % duty cycle pulses to the plasmonic sample via source (S) and drain (D) terminals. Sample picture and arrangement of the contact pads are shown in inset of Fig. 1.

A fundamental 2D plasmon mode was observed in all plasmonic samples with grating period. Plasmons were identified as the distinctive minimum and inflection point in the transmission amplitude and phase spectra, respectively. The change of grating period from 1000 nm to 600 nm resulted in the blue-shift of the resonance position frequency and in the increased quality factor values from 1.4 THz to 2.2 THz and from 3.5 to 5.6, respectively [4]. The absorption spectra were found by taking a logarithm of respective transmission spectra of the plasmonic sample. The absorption spectrum of the sample with grating period of 800 nm with the spectral resolution of 8 cm^{-1} (without Fabry-Perot fringes) is shown in Fig. 1, by red line. Measured emission spectrum from the same sample is shown in Fig. 1, by black line. Notably, only a 2D plasmon related features was observed in the emission spectrum without the black-body radiation or shallow impurity

electroluminescence owing to the successful optimization of the AlGaIn/GaN HEMT structures and usage for the development of our plasmonic samples [3]. The peak position and FWHM values were found to be similar in both spectra. In addition, the 2D plasmon resonance was found to be modified by the photon-based oscillator originating in a Fabry-Pérot cavity [5]. As the result Rabi splitting of 2D plasmon resonance was observed in the emission spectrum demonstrating split value of 345 GHz being much larger than previously reported in Ref. [6].

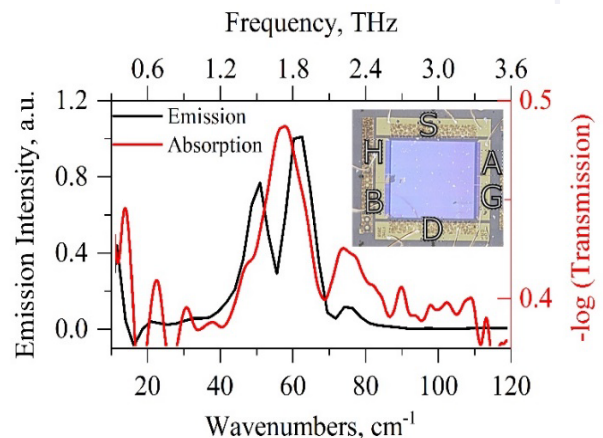


Fig. 1. Measured emission (black line) and absorption (red line) spectra for the plasmonic sample with grating period of 800 nm. Inset: photograph of plasmonic sample with arrangement of transistor contacts (A, B, G, H stand for interdigitated gates, S and D – for source and drain, respectively).

This project has received funding from European Regional Development Fund (project No 01.2.2-LMT-K-718-03-0096) under a grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT). We would like to acknowledge Maksym Dub, Maciej Sakowicz, Pavlo Sai and Grzegorz Cywinski for arrangement of FTIR spectrometer for THz emission experiments at the CENTERA laboratory in Warsaw, Poland.

References:

1. T. Otsuji *et al.*, *Nanophotonics*, **11**(9), 1677-1696, (2022).
2. M. S. Shur, *IEEE Sens. J.* **21**, 12752 (2021).
3. V. Janonis *et al.*, in *Terahertz Emit. Receiv. Appl. XI*, edited by M. Razeghi and A. N. Baranov (SPIE, 2020), p. 8.
4. D. Pashnev *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 051105 (2020).
5. D. Pashnev *et al.*, 2022 47th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), pp. 1-2, (2022)
6. Y. Yu *et al.*, *Opt. Express* **26**, 31794 (2018).

Sub-THz RESPONSIVITY OF AlGa_N/Ga_N BOW-TIE DIODES AT THE TEMPERATURES OF 295K AND 80K

Justinas Jorudas and Irmantas Kašalynas

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

Terahertz (THz) detectors operating at the room temperature, that are compact and have a fast response time are highly desired. The AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistor (HEMT) structures are used for various types of THz detectors such as the antenna-coupled field-effect transistors (TeraFETs) [1], Schottky barrier diodes [2], hot-electron micro-bolometers [3], and bow-tie (BT) diodes [4].

In this work, the planar BT diodes as THz detectors were characterized in sub-THz frequency region at selected temperatures of 295 K and 80 K. Principle operation of the BT diode relies on a 2DEG heating in the apex of geometrically shaped semiconductor under antenna-coupled electric field [3,5]. A quasi-optical setup was used for detection of Gaussian beams at discrete frequencies of 150, 307, and 600 GHz. At 295 K temperature, the responsivity was investigated using a 12 mm diameter hyper hemispherical Si lens integrated with the BT diode, which on average increased the detected signals by about 80 times. The zero-bias responsivity was almost identical for 307 and 600 GHz frequencies demonstrating the value of $R=72\pm22$ mV/W which was up to 2.6 times larger than that at 150 GHz. The increase of the responsivity by up to 50 times was found with applied moderate voltages, for example ± 1 V, to the BT diodes. At low temperature, the responsivity was found to be up to 20 times higher than that at room temperature mainly due to increased mobility of the 2DEG. Furthermore, at 80 K temperature, the responsivity characteristic exhibited local maxima in the biasing region below ± 1 V demonstrating an optimal region for hot-2DEG operation [3]. Voltage dependent responsivity at 80 K and 295 K temperatures was compared at 150 GHz

and 307 GHz frequencies for the BT diodes mounted in a cryostat without Si lens. The results revealed the responsivity values to be independent on the polarity of bias voltage and on the frequency in sub-THz region.

The authors thank colleagues G.Valušis, D.Seliuta, L.Subačius, V.Kovalevskij (FTMC, Lithuania) P.Prystawko (UNIPRESS, Poland) for fruitful discussions. We also acknowledge the support from the Research Council of Lithuania through the "T-HP" Project (No. 01.2.2-LMT-K-718-03-0096).

References

1. Javadi, E.; But, D.B.; Ikamas, K.; Zdanevičius, J.; Knap, W.; Lisauskas, A. Sensitivity of Field-Effect Transistor-Based Terahertz Detectors. *Sensors* 2021, 21, 2909, doi:10.3390/s21092909.
2. Yang, L.; Yao, W.; Liu, Y.; Wang, L.; Dai, Y.; Liu, H.; Wang, F.; Ren, Y.; Wu, Z.; Liu, Y.; et al. Low Capacitance AlGa_N/Ga_N Based Air-Bridge Structure Planar Schottky Diode with a Half through-Hole. *AIP Adv.* 2020, 10, 045219, doi:10.1063/5.0004470.
3. Choi, J.K.; Mitin, V.; Ramaswamy, R.; Pogrebnyak, V.A.; Pakmehr, M.P.; Muravjov, A.; Shur, M.S.; Gill, J.; Mehdi, I.; Karasik, B.S.; et al. THz Hot-Electron Micro-Bolometer Based on Low-Mobility 2-DEG in Ga_N Heterostructure. *IEEE Sens. J.* 2013, 13, 80–88, doi:10.1109/JSEN.2012.2224334.
4. Jorudas, J.; Malakauskaitė, J.; Subačius, L.; Janonis, V.; Jakštas, V.; Kovalevskij, V.; Kašalynas, I.; Malakauskaite, J.; Subacius, L.; Janonis, V.; et al. Development of the Planar AlGa_N/Ga_N Bow-Tie Diodes for Terahertz Detection. In *Proceedings of the 2019 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz); IEEE, September 2019; Vol. 2019-Septe, pp. 1–2.*
5. Seliuta, D.; Vyšniauskas, J.; Ikamas, K.; Lisauskas, A.; Kašalynas, I.; Reklaitis, A.; Valušis, G. Symmetric Bow-Tie Diode for Terahertz Detection Based on Transverse Hot-Carrier Transport. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2020, 53, 275106, doi:10.1088/1361-6463/ab831d.

DISIPACINIS PARAMETRINIS STIPRINIMAS SUPERGARDELĖSE: SILPNO SIGNALO STIPRINIMO YPATUMAI

Vladislovas Čižas, Dalius Seliuta, Liudvikas Subačius, Kirill Alekseev,
Natalia Alekseeva, Gintaras Valušis

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

Puslaidininkinės supergadelės yra laikomos viena iš tinkamiausių struktūrų aukštadažnio parametrinio stiprinimo procesams tyrinėti [1,2]. Paskutiniu metu tokios struktūros sulaukia ypatingo dėmesio, dėl galimybės jų pagrindu sukurti mažus, galingus ir našius terahercinės spinduliuotės šaltinius.

Parametrinio stiprinimo efektas supergadelėse buvo teoriškai numatytas daugiau nei prieš tris dešimtmečius. Efektas remiasi galimybe pridėjus, nuo supergadelės parametrų priklausantį, išorinį elektrinį lauką, patalpinti struktūrą į neigiamo diferencinio greičio režimą. Buvo parodyta, kad gaunamas stiprinimo efektas pasižymi plačiu dažnių ruožu, nors iki šiol nebuvo jokio eksperimentinio parametrinio stiprinimo supergadelėse įrodymo.

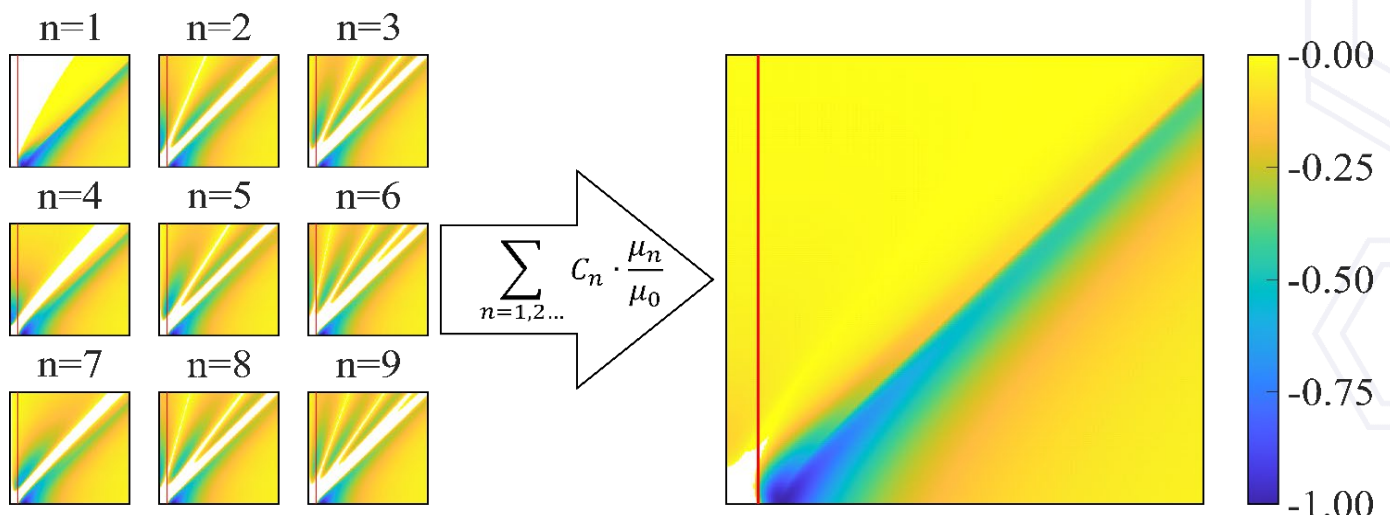
Šio pristatymo metu bus pateikti pirmi disipacinio parametrinio stiprinimo puslaidininkinėse supergadelėse eksperimentinio įrodymo rezultatai, gauti naudojant AC ir DC išorinius elektrinius laukus [3]. Eksperimento metu gautas daugiadažnis spektras priskiriamas

tiek išsigimusiems, tiek neišsigimusiems parametrinio stiprinimo procesams. Siekiant nustatyti sąlygas, kad supergadelėje prasidėtų daugiafotonės generacijos procesai, panaudotas teorinis mažo signalo stiprinimo modelis.

Naudojantis mažo signalo stiprinimo modeliu patvirtinama, kad tokiose supergadelėse vienu metu vyksta daugybė daugiafotonų stiprinimo procesų. Pateikiamos didelio signalo stiprinimo modelio, nusakančio stiprinimo ribos sąlygas, pirminės išvados.

Literatūra

1. V.G. Lyssenko, G. Valušis, F. Löser, T. Hasche, and K. Leo; PRL **79** (1997), pp. 302-304.
- A. Sibille, J.F. Palmier, F. Mollot, H. Wang, and J.C. Esnault; PRB **37** (1989), pp. 6272.
2. V. Čižas, L. Subačius, N.V. Alexeeva, D. Seliuta, T. Hyart, K. Köhler, K.N. Alekseev, G. Valušis; PRL **128** (2022), pp. 236802.



Pav. 1. Pavienių daugiafotonų generacijos procesų superpozicijos algoritmas, kuris buvo atliktas siekiant įrodyti, kad vienu metu supergadelėje vyksta daugybė daugiafotonų stiprinimo/generacijos procesų.

ŽEMATEMPERATŪRINIS MPE InAs FORMAVIMAS IR CHARAKTERIZAVIMAS

Karolis Stašys, Ignas Nevinskas, Andrėjus Geižutis, Jan Devenson

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

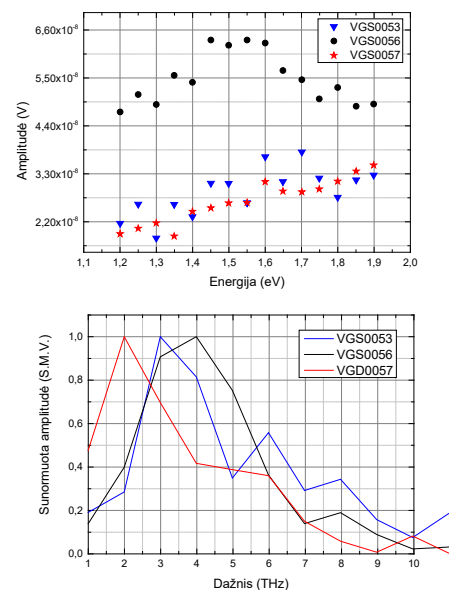
Indžio arsenidas (InAs) dėl savo išskirtinių savybių yra viena iš svarbiausių III-V grupės puslaidininkinių medžiagų turinti ypač platų pritaikymą optoelektronikoje. Pakankamai siauras draustinių energijų tarpas ($\sim 0,354$ eV) leidžia jį taikyti infraraudonosios (IR) spinduliuotės detektoriuose bei emiteriuose, o labai maža elektrono efektinė masė ($0,023 m_0$) leidžia kurti ir efektyvius kvantinius kaskadinius lazerius (QCL) bei taikyti terahercinėse technologijose. Vystant šias technologijas, yra poreikis turėti kuo didesnę krūvininkų tankį InAs kristaluose. Tačiau, taikant įprastus molekulinį pluoštelį epitaksijos (MPE) metodus, šiai dienai galima pasiekti krūvininkų tankį iki 10^{19} cm^{-3} lygio. Viršijus šią ribą, InAs kristalinė kokybė smarkiai krenta, užauginti dariniai tampa polikristaliniai ir nebėra tinkami sudėtingiems optoelektroniniams prietaisams. Ši problema ir yra sprendžiama šiame darbe.

Šio darbo tikslas buvo pasiekti InAs krūvininkų tankį, kuris siektų 10^{19} cm^{-3} , kai InAs savitasis krūvininkų tankis yra $\sim 1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Remiantis M. Shiba darbais [1], buvo iškelta hipotezė, kad į InAs gardelę įterpus daugiau As antisaitų, galima sukurti papildomą kiekį defektų, kurie galėtų sugeneruoti daugiau laisvųjų krūvininkų ir nenukentėtų bendra kristalinė kokybė. Šiam tikslui pasiekti buvo nuspręsta mažinti InAs MPE auginimo temperatūrą. Mažesnė temperatūra sumažina As desorbciją iš kristalinio sluoksnio. Įprasta auginimo temperatūra siekia $400\text{--}500^\circ\text{C}$, mes šiame darbe pasirinkome naudoti $150\text{--}250^\circ\text{C}$. Žematemperatūriniai InAs sluoksniai buvo auginami naudojant laidžius GaSb padėklus. Darinių struktūrą sudarė: GaSb padėklas, GaSb išlyginamasis sluoksnis, AlSb plakiruojantis sluoksnis (krūvininkų atskyrimui) ir žematemperatūrinis InAs sluoksnis. Auginimo temperatūros buvo parinktos $150, 200$ ir 250°C remiantis MPE reaktoriaus nustatymais. Buvo užauginti trys bandiniai (VGS0053, VGS0056 ir VGS0057). Šių bandinių krūvininkų tankis buvo išmatuotas naudojantis Holo matavimais ir pateiktas žemiau esančioje lentelėje:

1 lentelė. Krūvininkų tankis ir judris			
Bandinys	Auginimo temperatūra ($^\circ\text{C}$)	Krūvininkų tipas ir tankis (cm^{-3})	Judris ($\text{m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$)
VGS0053	200	N $8 \cdot 10^{18}$	621
VGS0056	250	N $7,6 \cdot 10^{18}$	805
VGS0057	150	N $1,23 \cdot 10^{18}$	547

Iš lentelės matyti, kad žemėjant MPE auginimo temperatūrai, krūvininkų tankis išauga net 3 eilėmis lyginant su InAs savituoju laidumu. Nors ir neviršija 10^{18} eilės tankio, tačiau pavyko užauginti aukštos kristalinės kokybės n-tipo sluoksnius netaikant legiravimo donorinėmis priemaisiomis (Si arba Te).

Taip pat buvo ištirtos šių bandinių THz spinduliuotės generacijos savybės. Šiame tyrime buvo naudojamas femtosekundinis, kintamo bangos ilgio lazerinis žadinimas ir registruotas THz impulsas. Rezultatai pateikti 1 pav.:



1 pav. Viršuje: THz emisijos impulso amplitudės priklausomybė nuo žadinimo fotono energijos (esant 5 mW intensyvumui). **Apačioje:** THz emisijos spektras.

Matome, kad visi bandiniai gali generuoti THz spinduliuotę. Nors intensyvumas nėra didelis, bet tai galimai lemia N tipo krūvininkų buvimas, kai optimaliausias yra P tipas. Taip pat, yra pasiekiamas platus THz emisijos ruožas.

Nors ir nebuvo pasiektas pageidaujamas krūvininkų tankis, tačiau pademonstruota galimybė padidinti krūvininkų tankį InAs medžiagoje netaikant priemaišinio legiravimo. Tai ypač aktualu norint išvengti amfoterinių Si savybių. Manoma, kad papildomai taikant legiravimą Si arba Te priemaisomis, InAs medžiagos auginimas žemoje temperatūroje leis pasiekti ypač aukštus laisvų krūvininkų tankius išlaikant monokristalinę InAs struktūrą.

Literatūra

1. M. Shiba, R. Ikariyama, M. Takushima, Y. Kajikawa. Journal of Crystal Growth 301-302 (2007) 256-259.

MULTIPLE FANO RESONANCES IN PERIODIC METAMATERIAL CAUSED BY PLASMONIC RESONANCE AND DIFFRACTION

Andrius Kamarauskas, Dalius Seliuta, Gediminas Šlekas, Žilvinas Kancleris

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Physical Technologies,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: andrius.kamarauskas@ftmc.lt

Advances in THz frequency generation [1] pave the way for various electromagnetic wave manipulation techniques. THz sensors [2], filters [3] and polarizers [4] just naming a few. Low loss dielectrics become backbone of any THz device. Combining low loss dielectric with novel technique of copper deposition on polytetrafluoroethylene (PTFE) substrate allowed us to investigate Fano resonance.

Single Fano resonance has been observed in an array of split ring resonators (SRR) on the thin dielectric substrate due to plasmonic and lattice mode interaction [5]. Weak coupling of external electric field with dark mode induces high Q factor resonance. The coupling of the dielectric waveguide modes (DWMs) with the plasmonic mode is responsible for multiple Fano resonance in SRRs on a thick dielectric substrate.

Metamaterial simulations are performed using CST Studio suite by modelling a single cell the sides of which are surrounded by periodic boundary conditions. Plane-wave is excited at the front with an electric field vector orientation depicted in Fig. 1.

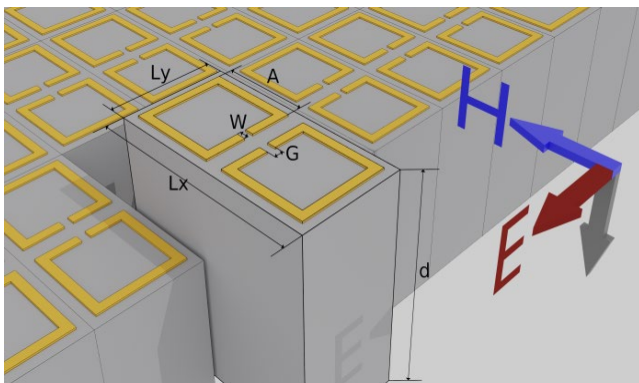


Fig. 1. Schematics of the mirrored array of SRRs and cut out single unit cell. The thickness of the substrate $d = 1200 \mu\text{m}$, its dielectric constant ($\epsilon = 2$), dimensions of resonators $L_x = 1200 \mu\text{m}$, $L_y = 600 \mu\text{m}$, $A = 500 \mu\text{m}$, $W = G = 50 \mu\text{m}$.

Modelling shows that first order diffraction (marked by colors Fig. 2) couples with $n=3$ plasmonic mode. By increasing substrate thickness, this coupling induce one, two, or even three Fano resonances, as shown in Fig. 2. Different colors indicate the coupling of DWMs 0, 1, 2 to $n=3$ plasmonic mode. Using the selective surface activation by laser method [6], the $10 \mu\text{m}$ copper layer is grown on the 1 mm thick PTFE substrate.

Applying standard photolithography technique, the SRRs are etched using a modified RCA solution (30:5:1 $\text{H}_2\text{O}:\text{HCl}:\text{H}_2\text{O}_2$). Measurements are performed using THz spectrometer Toptica Terascan 780. The measurement results, in general, confirm the modeling predictions.

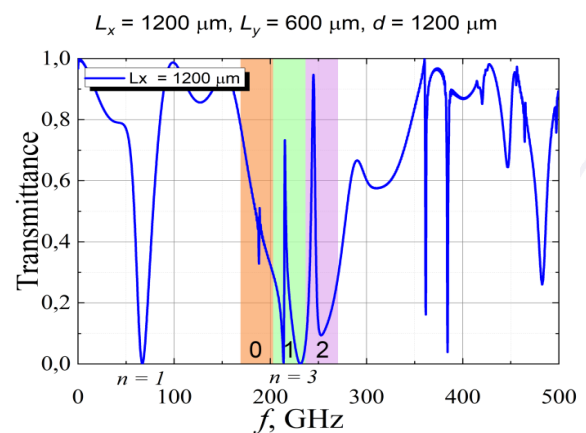


Fig. 2. Transmission spectrum of multiple Fano resonances. Letter n illustrate plasmonic resonance number, numbers in colored sections used for distinguish different waveguide modes. Group of marked resonances belongs to 1st order diffraction.

In this work, we elucidate the reasons for the appearance of multiple Fano resonances in a mirrored array of split ring resonators deposited on a thick dielectric substrate and demonstrate them experimentally.

References

1. K. Fujita, S. Jung, et al., Nanophotonics, Recent progress in terahertz difference-frequency quantum cascade laser sources. Vol. 7, No 11, (2018). DOI: 10.1515/nanoph-2018-0093;
2. W. Fang, Z. Ma, et al., Optics Express, Flexible terahertz metamaterial biosensor for label-free sensing of serum tumor marker modified on a non-metal area. Vol. 30, No 10, pp. 16630-16643 (2022). DOI: 10.1364/OE.454647;
3. H.S. Bark, T. Jeon., Optics Express, Tunable terahertz guided-mode resonance filter with a variable grating period. Vol. 26, No 22, pp. 29353-29362 (2018). DOI: 10.3390/s22145343;
4. K. Meng, S. J. Park, et al., Optics Express, Tunable broadband terahertz polarizer using graphene-metal hybrid metasurface. Vol. 27, No 23, pp. 33768-33778 (2019). DOI: 10.3390/s22145343;
5. D. Seliuta, G. Šlekas, et al., Optics Letters, Fano resonance arising due to direct interaction of plasmonic and lattice modes in a mirrored array of split ring resonators. Vol. 44, No 4, pp. 759-762 (2019). DOI: 10.1364/OL.44.000759;
6. E.M. Khairullina, K. Ratautas, et al., Microchim Acta, Laser-assisted surface activation for fabrication of flexible non-enzymatic Cu-based sensors. 189(7), (2022). DOI: 10.1007/s00604-022-05347-w.

CONTRIBUTION OF SURFACE LATTICE TO THE PROPAGATION LENGTH OF STRONGLY COUPLED TAMM AND HYBRID SURFACE PLASMON POLARITONS

Justina Anulytė*, Ernesta Bužavaitė-Vertelienė, Vilius Vertelis,
Evaldas Stankevičius, Kernius Vilkevičius, Zigmas Balevičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius, Plazmonikos ir nanofotonikos laboratorija
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: justina.anulyte@ftmc.lt

Recently various metallic nanostructures (grating arrays) have been employed in order to minimize losses in the metals. Metallic lattices exhibit narrow plasmonic resonances compared with randomly distributed metal nanoparticles or propagated surface plasmon resonances[1]. Attention to the nanophotonic – plasmonic structures which are able to support extended coherence properties under strong coupling arises from their promising applications to the plasmonic lasing[2] or advanced bio-sensing[3]. The total internal reflection ellipsometry (TIRE) method was used for the excitation and study of strong coupling between Tamm plasmon polariton (TPP) and surface plasmon polariton (SPP) in nanophotonic structures with 1D photonic crystal (PC) and lattice of gold nano-bumps array on the top. The sample used for the hybrid TPP-SPP mode excitation consisted of a 1D PC and thin metal layer of gold nano-bumps (~50 nm) produced by direct laser writing. The PC being used was made of 5 alternating TiO₂ (99.95% purity, Umicore) (~110 nm) and SiO₂ (99.99% purity, Umicore) (~200 nm) bilayers attached through the optical contact to a BK-7 glass substrate by means of ion beam sputtering. The Au (99.99% purity, EM-Tec) film was deposited on PC using magnetron sputtering method and then the gold nano-bumps were produced by using second-harmonic (515 nm) of 300-fs laser pulses generated by Yb:KGW based fs-laser (Pharos, Light Conversion Ltd.). Recent studies have shown that lattice of gold nano-bumps induced the generation of additional Bragg mode, related with lattice period which is not involved in the strong coupling of hybrid TPP-SPP polaritonic mode. The detailed analysis has shown that propagation length of SPP increased, meanwhile the TPP decreased, due to the formation of additional Bragg mode. The optical dispersion and propagation features of plasmons in 1D PC with uniform gold layer and the lattice of gold nano-bumps array were analysed by two coupled oscillator model and wave-vector vs. energy broadening. For the nanostructures with uniform gold layer the evaluated propagation length was in between $\delta SPP \approx 5.56.5 \mu m$ and $\delta TPP \approx 6.59.5 \mu m$ for SPP and

TPP components in the hybrid polaritonic mode, respectively. Meanwhile, the changes induced by periodic gold surface lattice gives a longer propagation length for SPP component $\delta SPP_{lattice} \approx 710.5 \mu m$ and a decreasing length for TPP $\delta TPP_{lattice} \approx 5.58.5 \mu m$. The obtained results demonstrate a novel approach to control and change the propagation length under the strong coupling regime between TPP and SPP components in the hybrid plasmonic mode by using surface lattice arrays. The fabricated nanophotonic-plasmonic structures shows the potential impact of direct laser writing method (DLW) as a cost effective, fast and large area, for creating integrated photonic devices with designed properties, in this case changing the propagation length and coherence properties in the hybrid plasmonic mode. The application of surface lattice resonances together with strong coupling regime leads to decreasing losses, resulting in the increasing propagation length and better coherence properties of such plasmonic excitations, which in turn promises advanced properties for low electrical consumption or threshold less plasmonic based coherent emission nano-sources.

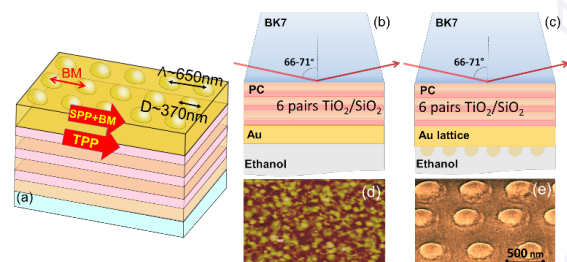


Fig. 1. (a) Structure geometry consisting of gold nanobumps lattice with diameter of ~370nm, a period of ~652nm. The TPP mode is excited in PC/gold layer interface and the hybrid surface plasmon polariton (HSPP) mode is excited in the structure by coupling the SPP mode and the Bragg mode (BM). (b, c) Scheme of excitation configurations for hybrid TPP-SPP mode (b) and SPP-HSPP (c) structures, total internal reflection (TIR) configuration of spectroscopic ellipsometry with a 70° prism coupler was used. The scanning electron microscopy (SEM) micrograph of uniform (50 nm) Au layer (d) and array of nano-bumps lattice on the same thin gold layer (e).

References

1. Auguė B., Barnes W. L., *Opt. Lett.*, **34** (4), 401.(2009).
2. Hakala T. K., Moilanen A. J., Văkeväinen A. I., Guo R., Martikainen J.-P., Daskalakis K. S., Rekola H. T., Julku A., Törmä P., *Nature Phys.*, **14** (7), 739–744, (2018).
3. Paulauskas A., Tumenas S., Selskis A., Tolenis T., Valavicius A., Balevicius Z., *Opt. Express*, **26** (23), (2018).

INVESTIGATION OF ELECTRICAL AND WEARING PROPERTIES OF WOOL FABRIC COATED WITH PEDOT: PSS

Julija Petkevičiūtė; Audronė Sankauskaitė, Aušra Abraitienė

Department of Textile Technology, Center for Physical Sciences and Technology,
Kaunas, Lithuania

Intrinsically conductive polymers (ICPs) such as PANI, PPy, PEDOT:PSS are used to form conductive coatings or electrically conductive tracks, are introduced into textiles by conventional methods and are either fixed with a binder or reacted directly with the functional groups of the fibres. Developing electrically conductive textiles, it is important not to compromise the usual properties of wearing comfort, breathability, flexibility, softness, resistance to repeated washings and mechanical stress. The electrical conductivity of textiles can be provided by the use of natural and chemical fibres with conductive additives of various natures (metals, oxides, carbon, etc.). This study presents the investigation of electrically conductive fabrics with low resistivity using exhaust dyeing method with an aqueous PEDOT: PSS commercial formulation named Clevios F ET and by screen printing method – Clevios S V3. The modification of low - pressure plasma with nitrogen (N_2) gas was used to perform the changes of wool fibre surface morphology. Plasma treatment imparted hydrophilicity, reduced felting, increased adhesion, improved dye ability and ensured that more PEDOT: PSS negatively charged sulfonate ($-SO_3^-$) counter ions would be electrostatically bounded with the cationic protonated amine ($-NH_2$) groups of the wool fiber. In this work we propose to use a novel type of additive such as divinyl sulfone (DVS) crosslinker to improve the properties of PEDOT: PSS film on wool fabric such as water solubility and delamination, resistance to mechanical effects without reducing electrical conductivity. The surface morphology of the plasma modified and unmodified wool fabric was observed with scanning electron microscopy (SEM) (see Fig. 1). PEDOT:PSS formulations dyed, screen printed, dyed and screen printed wool fabric samples were characterized by X-ray photoelectron and FTIR-ATR spectroscopy. The samples color difference measurements showed that more

intense color were received on primary N_2 gas plasma modified in comparison with unmodified. After testing of colour fastness to washing and wet rubbing were received better results after DVS crosslinker compared without DVS. Were also investigated an influence of DVS crosslinker on electrical properties of PEDOT:PSS treated wool fabric. The resistivity measurements of samples showed no significant reduction in conductivity.

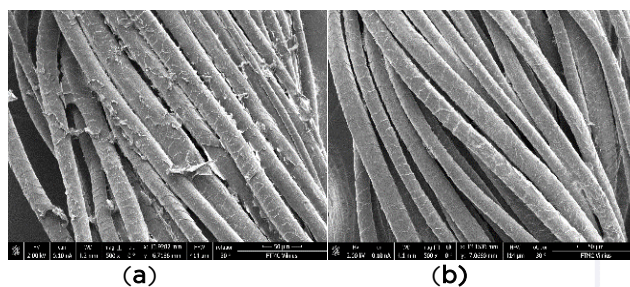


Fig. 1: SEM images of wool fabric surface: Clevios F ET dyed (a), N_2 plasma-treated and Clevios F ET dyed (b); magnification 500 $\times$.

Keywords: conductive textiles, plasma treatment, surface modification, DVS crosslinker, PEDOT: PSS, wool fabric

References

1. Haji, A. (2020) Natural dyeing of wool with henna and yarrow enhanced by plasma treatment and optimized with response surface methodology. *J. Text. Inst.*, 111, 467–475.
2. Udakhe, J.; Honade, S.; Shrivastava, N. (2015) Plasma induced physicochemical changes and reactive dyeing of wool fabrics. *J. Mater.*, 620370.
3. Lund, A., van der Velden, N. M., Persson, N. K., Hamed, M. M., Müller, C. (2018). Electrically conducting fibres for e-textiles: An open playground for conjugated polymers and carbon nanomaterials. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 126, 1–29.

THE OPTOELECTRONIC PROPERTIES AND LAYER MORPHOLOGY OF TRIPLE CATION METAL HALIDE PEROVSKITE SOLAR CELLS

Kazimieras Petrauskas, Steponas Ašmontas, Aurimas Čerškus, Jonas Gradauskas, Asta Grigučevičienė, Remigijus Juškėnas, Konstantinas Leinartas, Andžej Lučun, Algirdas Selskis, Algirdas Sužiedėlis and 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 attract considerable attention due to their remarkable properties revealing potential applications in optoelectronic devices such as solar cells, photodetectors or light emitting diodes. For solar cells, metal halide perovskites are attractive for their unique features such as high value of the absorption coefficient across the entire visible spectrum range. This allows to use a thin perovskite film with inherent high carrier mobility and long carrier diffusion length [1]. Possibility of fine tuning the band gap allows using perovskite layer as a top sub-cell in a tandem SC.

This study is focused mainly on perovskite solar cells with the active layers with the general form of $\text{Cs}_x(\text{MA}_{0.17}\text{FA}_{0.83})(100-x)\text{Pb}(\text{I}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$. Inclusion of cesium makes the triple cation perovskite compositions more stable due to lesser amount of phase impurities and decreased processing sensitivity.

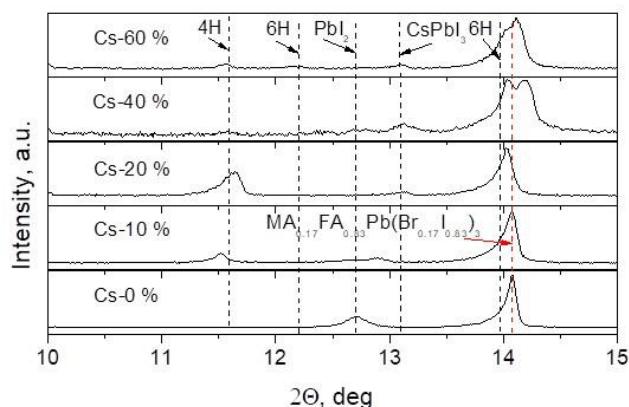


Fig 1. Perovskite layer XRD patterns.

Incorporating small amount ($x = 0.1$) of cesium cations into the perovskite precursor leads to enhanced power conversion efficiency (PCE) of the solar cells resulting mainly from significant rise of the short-current density and the fill factor value. Further increase of Cs concentration ($x > 0.1$) decreases the film's phase purity, carrier lifetime and correspondingly reduces PCE of the solar cell. Higher concentration of Cs ($x \geq 0.2$) causes phase segregation of the perovskite alongside with formation of Cs-rich regions impeding light absorption [2-3].

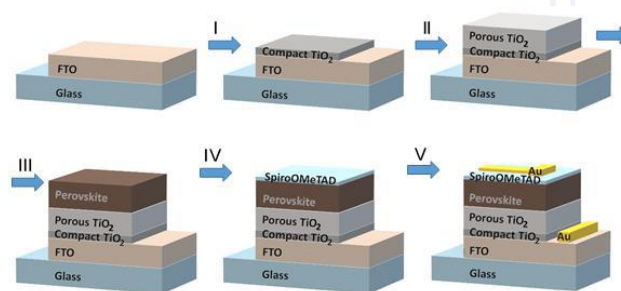


Fig 2. Schematic step-like representation of the perovskite solar cell formation.

In this communication the influence of cesium concentration on the perovskite morphology, layer crystal structure, photoluminescence and optical properties of the triple cation perovskite solar cells will be discussed.

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. Ašmontas, S.; Čerškus, A.; Gradauskas, J.; Grigučevičienė, A.; Leinartas, K.; Lučun, A.; Petrauskas, K.; Selskis, A.; Sužiedėlis, A.; Širmulis, E.; Juškėnas, R.; Cesium-Containing Triple Cation Perovskite Solar Cells. *Coatings* 2021, 11, 279.
3. Ašmontas, S.; Čerškus, A.; Gradauskas, J.; Grigučevičienė, A.; Juškėnas, R.; Leinartas, K.; Lučun, A.; Petrauskas, K.; Selskis, A.; Sužiedėlis, A.; Širmulis, E.; et al. Impact of Cesium Concentration on Optoelectronic Properties of Metal Halide Perovskites. *Materials* 2022, 15, 1936.

APPLICATIONS OF FULL FIELD OPTICAL COHERENCE TOMOGRAPHY

Karolis Adomavičius, Vytautas Jakštas, Ieva Žičkienė, Austėja Trečiokaityė,
Danielis Rutkauskas, Egidijus Aukšorius

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

Optical coherence tomography (OCT) is an interferometric imaging method – widely used for retinal imaging – that can image deep in tissue. Classical OCT systems are based on confocal microscope where image is obtained by scanning retina point-by-point in xy plane by galvo mirrors. Full-field OCT (FF-OCT), shown in Figure 1, uses a camera instead of a single point detector, which eliminates the need to scan sample laterally and achieves higher lateral resolution ($1\ \mu\text{m}$ in 3D)[1]. By eliminating scanning and obtaining the whole 2D image at once, it can help increase the imaging speed and, for example, reduce artifacts produced by involuntarily eye movement. However, in order to obtain full 3D data of a sample, it has to be scanned axially. On the other hand, if Fourier-domain (FD) data acquisition method is used by utilizing a tunable narrowband light source, axial scanning becomes redundant. Furthermore, if the fastest CMOS camera is employed in FD-FF-OCT, it becomes suitable for high-speed eye imaging applications[2].

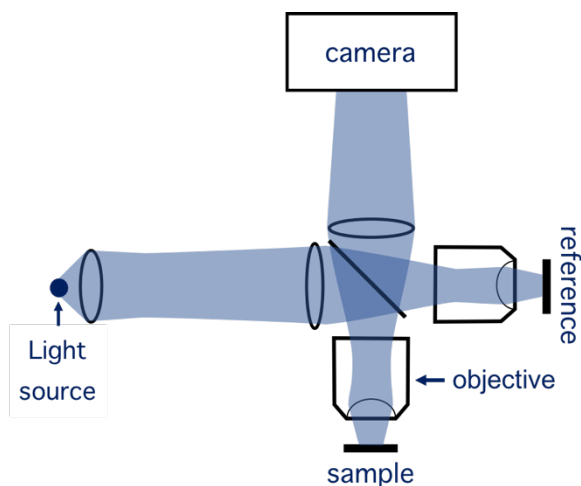


Fig. 1. Basic scheme of FF-OCT setup.

However, crosstalk formation in images has been limiting the technique's performance preventing from seeing choroid in the human retina. A spatially incoherent light source, as produce, for example, by coupling the laser in a multimode fiber [3], can be used to remove crosstalk, as it makes laterally scattered photons that are detected in other pixels average to uniformity.

As well as retinal imaging, FF-OCT is a powerful tool for detecting microcracks, impurities and deformations in optical glasses. Subsurface damage induced during manufacturing processes contributes to reduction in performance of optical components[4]. Full field OCT as non destructive tool could provide higher quality control during manufacturing. We will present various applications of FF-OCT that employed innovative FF-OCT optical schemes.

References

1. Aukšorius, E., et al., Dual-modality fluorescence and full-field optical coherence microscopy for biomedical imaging applications. *Biomedical optics express*, 2012. **3**(3): p. 661-666.
2. Hillmann, D., et al., Aberration-free volumetric high-speed imaging of in vivo retina. *Scientific Reports*, 2016. **6**.
3. Aukšorius, E., et al., Multimode fiber as a tool to reduce crosstalk in Fourier-domain full-field optical coherence tomography. *Optics Letters*, 2022. **47**(3).
4. Frank, S., M. Seiler, and J. Bliedtner, Three-dimensional evaluation of subsurface damage in optical glasses with ground and polished surfaces using FF-OCT. *Applied Optics*, 2021. **60**(8): p. 2118-2126.

MINIMIZED POTENTIOSTATS: A PROMISING SOLUTION FOR ELECTROCHEMICAL SENSING APPLICATIONS

Mohamed Abdelkader, Rasa Pauliukaitė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanoengineering,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, email: mohamed.fawzy@ftmc.lt

An electrochemical potentiostat can monitor the electrochemical response between different electrodes and electrolytes and perform different measurement methods, such as voltammetric [1], pulsed techniques [2], and amperometric [3]. Conventional potentiostats are expensive, and require a high power compared to other sensing modules. Minimized potentiostats offer a promising solution to save space and power and provide a suitable solution for in-field sensing applications and wearables technology.

Palmsens Pico EmStat module [4] is an integrated circuit that can operate on a 5 V battery and functions as a potentiostat with several analogue and digital I/Os peripherals allowing integration with other sensors/devices. In addition, the EmStat can communicate with Arduino and MATLAB, which gives the power for further programming and customized applications. Customized applications; in this work, electrochemical sensing. Sensing applications can benefit from using such a programmable potentiostat with several peripherals by implementing an application-based/customized code or routine of measurements

Figure 1 shows the plain EmStat Pico module and the module's interfacing to communicate with the PC.

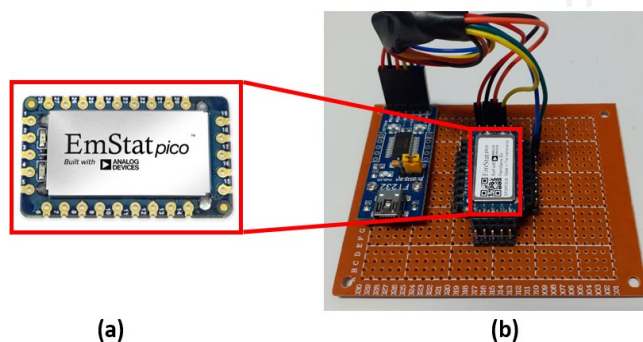


Fig. 1. (a) The plain EmStat Pico module (b) Interfacing of the module.

References

1. S.G. Meirinho, L.G. Dias, A.M. Peres, L.R. Rodrigues, *Biotechnol Adv.* **34** (2016).
2. J. Hoyos-Arbeláez, M. Vázquez, J. Contreras-Calderón, *Food Chem.* **221** (2017).
3. A.M. Baracu, L.A. Dinu Gugoasa, *J Electrochem Soc.* **168** (2021).
4. EmStat Pico, PalmSens.
<https://www.palmsens.com/product/oem-emstat-pico-module/> (accessed October 7, 2022).

EFFECT OF AMMONIUM MOLYBDATE ADDITIVE ON THE MORPHOLOGY AND COMPOSITION OF FORMIC ACID ANODIC ALUMINA

Katsiaryna Charniakova, Arunas Jagminas

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

Valve metal anodizing is a widely applied and convenient process for obtaining ordered oxide nanomaterials with controllable properties. The anodizing conditions, such as anodizing voltage, type of electrolyte, its concentration and temperature, significantly influence the morphology and composition of the obtained coatings and films¹. Usually, anodic treatment of Al in HCOOH solution resulted mainly in pitting-like surface etching followed by forming a thin oxide film². However, it was shown that aluminum anodization in an aqueous solution of formic acid with the additive of sodium vanadate leads to forming of porous alumina films³. So, we aimed to study the effect of ammonium heptamolybdate additive on the morphology and composition of the formic acid anodic alumina.

The aluminum specimens were prepared using high-purity aluminum foil (99.99 wt. %, 100 μm thick, 20 $\times$ 20 mm, AlfaAesar). Then they were pretreated in a hot solution of 1.5 M NaOH for 15 s, neutralized in 1.5 M HNO₃ for 2 min, then carefully rinsed in distilled water and air-dried. The samples were anodized from one side in the aqueous solution of 0.4 M formic acid and 0.03 M (NH₄)₅Mo₆O₂₄ (pH 3.1) in the thermostated (18 °C) two-electrode Teflon electrochemical cell in which the platinum grid was used as a counter electrode at 60–100 V for 60 min. Then aluminum was chemically etched in the solution containing CuCl₂ and HCl to investigate the reverse side (i.e., anodizing front) of the samples. The morphology of the products obtained was investigated by scanning electron microscopy (SEM) using a scanning electron microscope FEI Quatra 200F. The linear sweep voltammetry (LSV) technique was applied to characterize the electrochemical oxidation of aluminum in the aqueous solutions of 0.4 M HCOOH and 0.4 M HCOOH and 0.03 M (NH₄)₅Mo₆O₂₄ in the anodizing voltage (U_a) range of 0–100 V at 18 °C. The applied voltage was increased with a constant rate of 100 mV s⁻¹. The composition of the films was studied by thermogravimetry (TG)/differential thermal analysis (DTA) coupled with mass spectrometry, infrared (IR) and X-ray photoelectron (XP) spectroscopy.

According to SEM, the anodic alumina/carbon composites possess a hierarchical structure with multi-branched pores with a dense, cracked

cover layer on the film surface. On the reverse side, hexagonal-shaped cells with an average diameter of about 180 nm were formed (Fig. 1). Linear sweep voltammetry and current transient curves demonstrated that the anodizing process is non-steady. Al anodizing in formic acid is hardly possible and requires special conditions, so the LSV curve has one linearly increasing region at 25–55 V, corresponding to the beginning of local and pitting corrosion on the Al surface. Nevertheless, if ammonium heptamolybdate is added to the formic acid solution, the situation changes: current overshoot at $U_a = 53\text{--}67$ V is observed. TG/DTA showed that the average carbon content is ca. 5.5 mass.%. According to IR, carbon embedded in the alumina is in the form of CO₂, CO, carboxylate ions, and $\alpha\text{-C:H}$. It was also established that alumina/carbon composites could be formed at voltages below 100 V, which can be critical for practical applications of the process. XPS study of the surface and reverse (i.e., anodizing front) sides of the films proved that carbon is not only on the surface but also homogeneously distributed through the oxide layer.

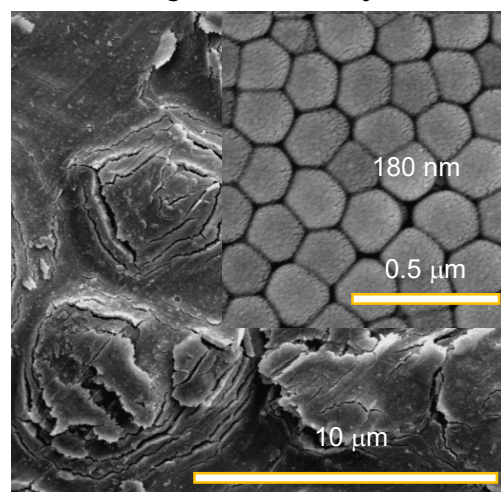


Fig. 1. SEM images of the surface of anodic alumina film formed in the aqueous solution of 0.4 M HCOOH and 0.03 M (NH₄)₆Mo₇O₂₄ at 80 V, 18 °C for 60 min. The inset shows the reverse side SEM view of the anodic film.

References

1. G. D. Sulka, in *Nanostructured Anodic Metal Oxides* (Elsevier, 2020).
2. S. Tajima, *Electrochim. Acta*, **22**, 995 (1977).
3. A. Jagminas, V. Klimas, K. Chernyakova, V. Jasulaitiene, *Materials* **15**, 2700 (2022).

TWO-DIMENSIONAL COMPOSITE BASED ON CHITOSAN-GRAPHENE OXIDE ASSESSMENT OF ANTIMICROBIAL ACTIVITY

Edith Flora Joel, Galina Lujanienė, Lina Grinevičiūtė, Algirdas Selskis,
Sandra Stanionytė, Martynas Skapas, Loreta Leviskaitė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, e-mail: edith.joel@ftmc.lt

Antibacterial properties of stable, uniform, high surface coverage films of chitosan-graphene oxide with embedded, non-leaching bimetallic nanoparticles have been studied. The physical properties of the films and the diffusion kinetics of copper and its oxides as well as platinum particles were analyzed. The results showed that the antibacterial polymer coating of 1.5% bimetallic nanocomposites had acceptable physical properties with a film thickness of around 0.9 nm. The diffusion kinetics of the synthesized copper and its oxides as well as platinum particles in chitosan-graphene oxide membranes follows the Fick's diffusion law. This composite material was characterized by scanning electron microscopy, X-ray diffractometry, energy dispersive X-ray analysis (EDX), atomic force microscopy (AFM), UV visible spectrometer, and Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR). The thin films manufactured showed an inhibition zone of 11 mm on agar plates. Moreover, the addition of bimetallic nanoparticles changed the wettability and stability of water of the thin films. The prepared films offered effective antibacterial activity. The fabricated thin films were tested against *E. coli*, which qualified them for food packaging and biomedical applications.

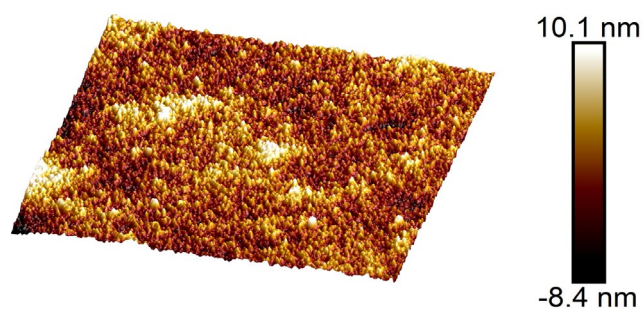


Fig. 1. Film thickness of synthesized bimetallic hybrid membranes measured by Atomic Force Microscope.

In addition, a migration model for nanoparticles is established to explore the migration ratio of nanoparticles for the 95% ethanol food simulant. Moreover, a machine learning approach is proposed to estimate the swelling degree in nanocomposite membranes. The suggested approach can provide insightful information for creating two-dimensional materials with reduced time for time-consuming tests.

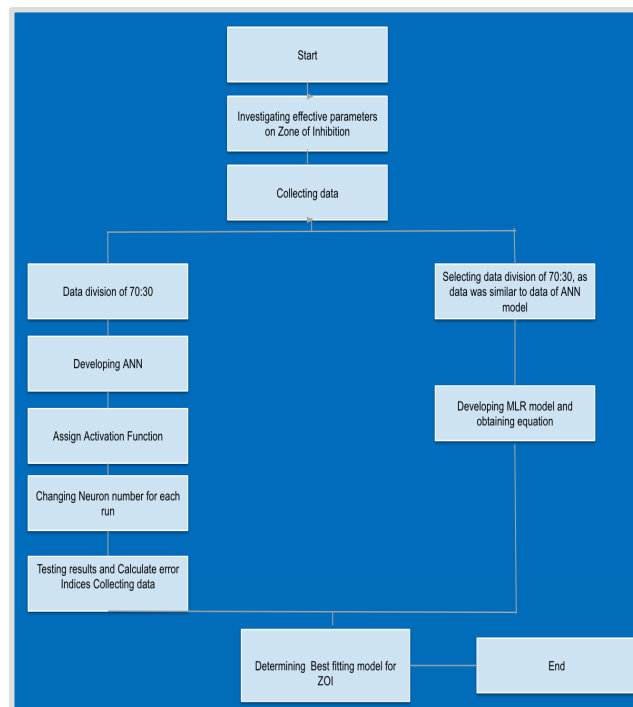


Fig. 2. Flowchart of the comparison of ANN and MLR models for estimate of metal ion permeation and zone of inhibition.

INVESTIGATION OF THE ADSORPTION BEHAVIOUR OF Cs(I) AND Co(II) ON THE MUSCOVITE MICA CLAY/GRAPHENE OXIDE/ γ -Fe₂O₃-Fe₃O₄ COMPOSITE

Raman Novikau¹, Galina Lujanienė¹, Vidas Pakštas², Martynas Talaikis³,
Vitalija Jasulaitienė², Audrius Drabavičius², Arnas Naujokaitis²

¹ Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius,

² Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterisation of Materials Structure,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

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

Nuclear energy is one of the possible sources of green energy. The demand for this type of energy is increasing, as evidenced by the brisk construction of new nuclear power plants. However, this will also increase the amount of nuclear waste, which may increase the release of radionuclides into the environment. In addition, atmospheric nuclear weapons tests and nuclear accidents, such as those at the Chernobyl nuclear power plant and Fukushima Daiichi, are also sources of radionuclide contamination. Radionuclide pollution is one of the negative factors affecting the environment [1]. Clays and their minerals are effective natural adsorbents for radionuclides. Due to their low cost and wide availability, they are a useful basis for the production of composite materials. The combination of clays/minerals with other potential adsorbents (graphene oxide/maghemite magnetite) makes it possible to increase the efficiency of radionuclide removal from the environment due to a synergistic effect. The aim of this study was to investigate the adsorption behaviour and mechanism of caesium and cobalt ions on the muscovite mica clay/graphene oxide/ γ -Fe₂O₃-Fe₃O₄ and to model the adsorption capacity of the composite by an adaptive neuro-fuzzy inference system (ANFIS).

The specifics of the synthesis of the composite, its characterisation, the conditions for conducting batch experiments, the calculations of isotherms, kinetics, thermodynamics of adsorption, and modelling by ANFIS are presented in [2]. The results of the batch experiments showed the dependence of the adsorption behaviour of Cs(I) and Co(II) on the initial concentration, the mass of the adsorbent,

the contact time, the temperature, and the pH. The experimental data are in better agreement with the Freundlich, Langmuir, and pseudo-second-order models. According to the Weber-Morris intraparticle diffusion model, the adsorption of caesium and cobalt is controlled by film and mixed diffusion, respectively. Furthermore, adsorption on the composite was non-spontaneous and spontaneous endothermic for Cs(I) and Co(II), respectively. It was found that the adsorption of ions on the composite was by multilayer and monolayer adsorption and that the type of adsorption was mixed and included both chemical and physical adsorption. Moreover, the results of ATR-FTIR and XPS show the interaction of the ions with a large number of functional groups of the composite. The ANFIS model has proven to be a suitable tool for predicting the adsorption capacity of the composite and 3D surface modelling results indicate a complex and non-linear process of ion adsorption.

References

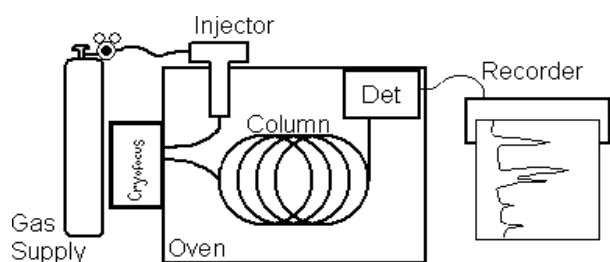
1. IAEA (International Atomic Energy Agency) (2006) Environmental Consequences of the Chernobyl Accident and Their Remediation: Twenty Years of Experience. Report of the Chernobyl Forum Expert Group 'Environment'. International Atomic Energy Agency Vienna, Austria.
2. R. Novikau, G. Lujanienė et al., Adsorption of caesium and cobalt ions on the muscovite mica clay-graphene oxide- γ -Fe₂O₃-Fe₃O₄ composite. Environmental Science and Pollution Research, 1-18 (2022).

ANALIČIŲ FOKUSAVIMO IR KONCENTRAVIMO ANT DUJŲ CHROMATOGRAFINĖS KOLONĖLĖS PRITAIKYMAS MATUOJANT TERPENŲ KONCENTRACIJAS MĖGINIUOSE

Audrius Sadaunykas, Audrius Zolumskis, Evaldas Naujalis

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

Darbo metu buvo tiriamas sukonstruoto dujų chromatografinės sistemos priedo prototipas ir jo pritaikymas terpenų junginių analizei. Dujų chromatografija (GC) plačiai naudojamas įvairių organinių junginių analizei. Didžioji dalis cheminių matavimų laboratorijų kasdien naudoja GC metodą. Nors GC egzistuoja daugiau nei 50 metų, bet vis dar ieškoma būdų patobulinti šį metodą. Vienas iš būdų pagerinti GC charakteristikas yra sukurti papildomus modulius [1, 2]. Mūsų laboratorijos sukonstruotas prietaisas sukurtas remiantis kriofokusavimo technologija [3]. Pritaikydami mūsų sukurtą prototipą, siekėme pagerinti GC sistemos jautrį matuojant terpenų junginius.

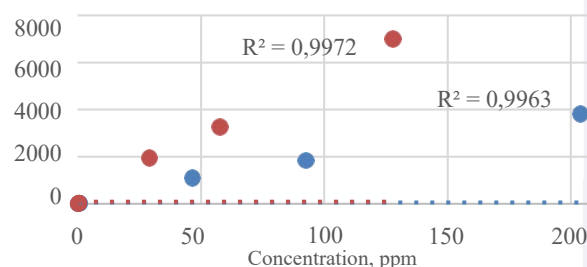


1 pav. Dujų chromatografinės sistemos su kriofokusavimo modulių schema.

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 iki $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ atšaldytą GC kolonėlės dalį, o staiga pakaitinus toliau keliavo išilgai kolonėlės iki detektoriaus.

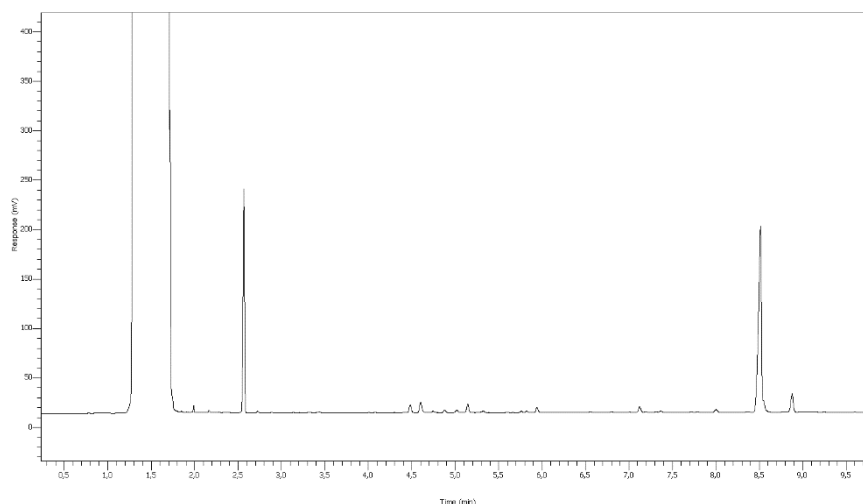
Prototipas pritaikytas terpenų junginių analizei (α -Pinenas, β -Kariofilenas) iš pluoštinių kanapių (lot. *Cannabis Sativa*) augalo. Laboratorijoje sukurtas metodas sėkmingai validuotas. Nustatytos metodo aptikimo (LOD) ir nustatymo (LOQ) ribos: α -Pinenas – LOD 0,35 ir LOQ 1,05 ppb; β -Kariofilenas – LOD 0,23 ir LOQ 0,68 ppb. Santykinis standartinis nuokrypis α -Pinenas – 6,67 %, β -Kariofilenas – 6,82 %. Iš gautų rezultatų galima daryti išvadą, kad metodas tinkamas terpenų junginių kiekio nustatymui pluoštinėse kanapėse.



2 pav. α -Pinenas (mėlyna), β -Kariofileno (raudona) kalibracinės kreivės.

Literatūra:

1. Chin, et al. Analytical Chemistry, 83(17), 6485–6492,
2. R. B. Wilson, et al. Talanta, 97, 9–15.
3. Falaki, Foujan. Gas Chromatography- Derivatization, Sample Preparation, Application. IntechOpen, 2019.



3 pav. α -Pinenas ir β -Kariofileno dujų chromatograma.

ACID SULPHATE SOLUTION ADDITIVES IMPACT ON DEPOSITED COPPER HONEYCOMB-LIKE STRUCTURES

Birutė Serapinienė, Jurga Juodkazytė, Algirdas Selskis,
Remigijus Juškėnas, Rimantas Ramanauskas

Center for Physical Sciences and Technology,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: birute.serapiniene@ftmc.lt

Even though Paris agreement entered in to force, Greenhouse gas emissions during period of 2010-2019 year continued to rise (1). Increasing CO₂ emissions cause global climate problems, such as global weather temperature increase. One of the solutions of this problem could be electrochemical CO₂ reduction. CO₂ reduction depending on reaction conditions gives a variety of products ranging from CO, HCOO⁻, HCHO, CH₄, CH₃OH, C²⁺ hydrocarbons (e.g. C₂H₄, C₂H₆) and oxygenates, to higher hydrocarbons (2). In combination with solar electricity it could work as energy accumulator with zero-carbon emission.

Cu electrode used in CO₂ reduction to C₁-C₃ products is the most important and efficient (3). Simple polycrystalline Cu electrode has rather small electrochemically active real surface wherefore its efficiency is low. Different techniques of deposition and/or etching have been attempted to enlarger electrochemically active real surface area of Cu electrodes. The gas evolved Cu foam deposition from acid sulfate solution (Fig. 1) is one of promising high electrochemically active surface area Cu electrode production method.

The purpose of this research is to find simple, reliable, on-desktop method for measurement of electrochemically active surface area of Cu electrode and to evaluate the influence of acid sulphate solution additives on deposited copper honeycomb-like structures. There are several electrochemically active real surface area evaluation methods. Cu oxidation-reduction method (Cu₂O monolayer formation) and underpotential deposition (UPD) of Pb monolayer were chosen to measure electrochemically active real surface area. To evaluate surface differences electrodes were analyzed with Scanning Electron Microscopy (SEM), while its phase composition and the grain size were evaluated using X-Ray diffraction (XRD).

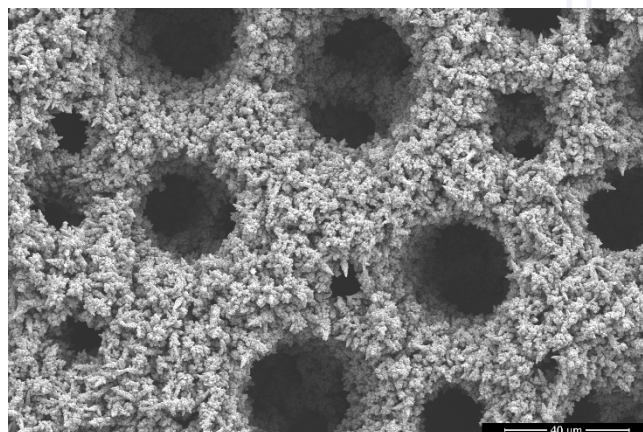


Fig. 1. SEM image of Cu honeycomb-like structure made by electrodeposition (3 A/cm² current density for 20 s) from 0.5 M CuSO₄ + 2.5 M H₂SO₄ electrolyte.

XRD analysis have shown that deposited Cu electrodes consisted of Cu and Cu₂O phases, and their grain size varied around 21 nm and 26 nm. It has shown no changes in size or phase whether additives in acid sulphate solution were used or not. Measured electrochemically active real surface area of Cu electrode deposited from a solution with HCl as additive, has showed 1.7 times greated value in comparison with Cu electrode deposited from solution without additives.

References

1. https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg3/downloads/report/IPCC_AR6_WGIII_SPM.pdf
2. J. Zhao, S. Xue, J. Barber, Y. Zhou, J. Meng, X. Ke. Journal of Materials Chemistry A, 8(9), 4700–4734, (2020).
3. Y. Hori. Modern Aspects of Electrochemistry, 42(3), 89–189, (2008).

CHARACTERISATION AND APPLICATION OF LASER INDUCED GRAPHENE MODIFIED WITH POLYFOLATE FILMS

Vytautas Žutautas, Rasa Pauliukaitė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanoengineering
Savanoriu Ave. 231, LT-02300 Vilnius, email: vytautas.zutautas@ftmc.lt

Some of the chemical processes are pH dependent and because of that pH measurements are important. There are systems where traditional glass electrodes cannot be used and flat, flexible sensors are needed. One method of detecting hydrogen ions is the employment of pH-sensitive conductive polymers [1].

Conductive polymers belong to the classes of polyenes or polyaromatics such as polyacetylene, polyaniline, polypyrrole, and polythiophene. Some of them have unique conductivity mechanisms or electrodes modified with them are stable in the air [2]. These polymers are often used in the development of chemical sensors. An increase in response signal and a decrease in noise levels is one of the advantages of conductive polymer-based sensors [3].

Electrochemical synthesis lets deposit conductive polymer as a film directly on an electrode surface. This lets us control the spatial arrangement of immobilised molecules, formed film thickness and monitor their activity. Conductive polymers often increase the transfer speed of electrodes and their deposition placement can be controlled [3].

The aim of this work is to develop a sensor for pH monitoring that could be used in washing systems in the food industry. For this, we used laser induced graphene (LIG) modified with polyfolate (PFA). Formed sensors were used to detect pH in the pH range from 6.0 to 9.0. Electrodes were characterised electrochemically and microscopically, pH was determined using potentiometry (PA).

LIG electrodes were formed on a polyimide (PI) foil surface using a picosecond laser. Depending on the used irradiation wavelengths, which were 355 nm and 532 nm, different samples were made (LIG355 and LIG532). The exposed working area of the LIG electrodes was $1.0 \times 0.5 \text{ cm}^2$ which was separated using chitosan (Chit) and nail enamel coating on the top. The working area was cleaned electrochemically and folate (FA) was polymerised on top of it [1]. Then, electrodes were dried in the air for 1 day and the obtained sensors were named PFA/LIG355 or PFA/LIG532. In order to increase the stability of such a sensor, before FA polymerisation, LIG

electrodes were coated with Chit solution and dried in air for 1 day, in this case, the sensors were named PFA/Chit/LIG355 or PFA/Chit/LIG532 (Fig. 1).

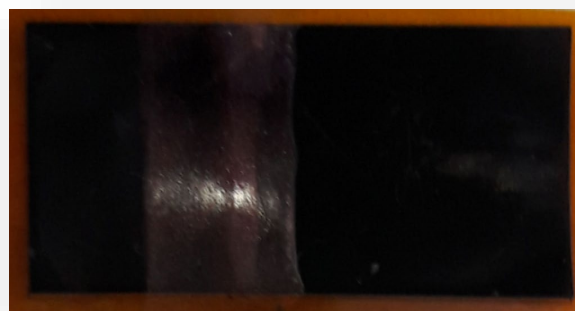


Fig. 1. PFA/Chit/LIG electrode.

The stability of modified LIG electrodes was tested using potentiometry. The results show that additional Chit increases electrode stability. Potentiometric PFA/Chit/LIG355 and PFA/Chit/LIG532 response to pH show that with LIG532 sensor is more sensitive to pH than LIG355. PFA/Chit/LIG532 sensitivity is $\pm 30.32 \pm 0.50 \text{ mV/pH}$, while PFA/Chit/LIG355 sensitivity when increasing pH is $-26.89 \pm 0.97 \text{ mV/pH}$, when decreasing pH is $28.83 \pm 0.65 \text{ mV/pH}$. This shows that PFA/Chit/LIG532 can be used as a sensor.

Acknowledgement. This work was supported by the Lithuanian Research Council the grant No. 01.2.2-LMT-K-718-03-0038

References

1. V. Žutautas, T. Jelinskas, R. Pauliukaite, J. Electroanal. Chem. **921**, 116668 (2022).
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).

EFFECTIVE HYDROGEN EVOLUTION SUPPRESSION IN NA-ION AQUEOUS BATTERIES

Nadežda Traškina, Milda Petrulėvičienė,
Jurgis Pilipavičius, Jurga Juodkazytė, Linas Vilčiauskas

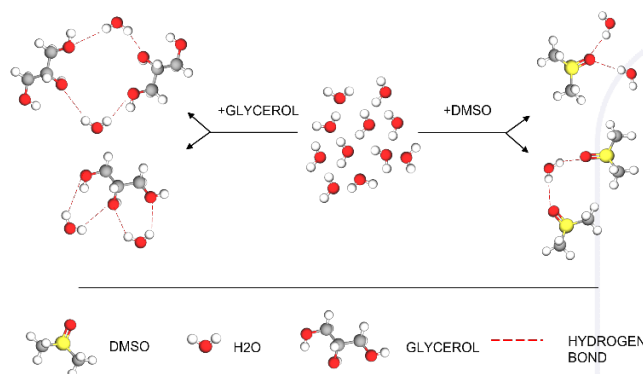
Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: nadezda.traskina@ftmc.lt

Na-ion aqueous batteries, a safer and cheaper alternative to Li-ion batteries, despite their environmental benignity and compatibility with highly ionically conductive electrolytes, suffer from inherently narrow electrochemical stability window (1.23V) limited by both oxygen (OER) and hydrogen (HER) evolution reactions. [1] The latter causes inferior cycling stability which can be attributed to the overlapping of hydrogen/anode material redox potentials.

Several strategies have been established in attempt to suppress the undesirable effects of hydrogen evolution. One of them, increasing pH to shift the HER potential, might have a deteriorating effect on most of anode active materials. [2] Another approach utilizes water-in-salt electrolytes which reduces the overall amount of free water on the electrode. [3] However, there is no reported satisfactory HER inhibition for common non-toxic and cheap salts, which increases the price and compromises stationary application's perspectives. A more appealing and promising way to eliminate the unbounded water is by introducing additional, highly polar, solvents into aqueous electrolytes. DMSO and glycerol have been shown to suppress water decomposition in aqueous batteries due to altering solvation structure (scheme 1). [4]

The aim of this work was to investigate the effect of the hybrid electrolyte with varying aprotic solvent and its mole fraction on HER potentials and cycling stability of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ based anodes. The HER potential of prepared

electrolytes was evaluated by cycling voltammetry and the cycling stability of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ based anodes was investigated by charge/discharge galvanostatic cycling in three-electrode cells where working and counter electrode are separated by a 1M NaNO_3 salt bridge.



Scheme 1. Schematic illustration of water-polar solvent interaction.

References

1. Liu, Z.; Huang, Y et al. Chem. Soc. Rev. 49 (1), 180–232 (2020).
2. Luo, J. Y.; Cui et al. Nat. Chem. 2 (9), 760–765 (2010)
3. Suo, L., Borodin, O., Wang, Y. et al. Adv. Energy Mater. 7, 1701189 (2017)
4. Cao, L.; Li, D.; Hu, E et al. J. Am. Chem. Soc. 142 (51), 21404–21409 (2020).

SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF MIXED-POLYANION CATHODE MATERIALS FOR NA-ION BATTERIES

Gintarė Gečė^{1,2}, Jurgis Pilipavičius¹, Jurga Juodkazytė¹,
Maider Zarrabeitia^{2,3}, Stefano Passerini^{2,3}, Linas Vilčiauskas¹

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

²HelmholtzInstitute Ulm(HIU), Helmholtzstrasse11, D-89081, Ulm, Germany

³Karlsruhe Institute of Technology (KIT), P.O. Box 3640, D-76021, Karlsruhe, Germany
email: gintare.pleckaityte@ftmc.lt

An increasing consumption of fossil fuels, which are still the world's leading energy source, and the emission source of CO₂, have caused multiple environmental severe problems such as pollution and climate change [1]. In order to meet the Paris climate agreement goals of future energy requirements [2], as well as climate neutrality by 2050 [3], the development of renewable energy sources has become more and more urgent. Although the electricity generated by wind turbines, solar panels or hydropower is clean and safe, the supply is an intermittent and requires large-scale storage devices to obtain a balance. Electrochemical energy storage has many desirable features such as pollution-free operation, high round-trip efficiency, a wide range of power and energy, long cycle life and low maintenance, as well as easy integration into the grid [4,5].

Li-ion batteries are more and more widely used as rechargeable power sources, owing to their high energy and power density. However, the high cost of Li and necessary transition metals as well as safety issues related to the use of highly flammable electrolytes have pushed towards the search for alternatives. Na-ion batteries and especially their aqueous variants are attracting particular attention as potential candidates for large-scale energy storage because of the accessible and unlimited Na resources and elimination of certain rare transition metals. Moreover, the aqueous aspect makes them significantly safer, non-flammable, low cost and environmentally friendly in comparison to the current Li-ion technology [6,7].

Compounds with a mixed polyanion framework have recently gained attention as a new class of compounds for material exploration. The potential tunability of the structure by using various combinations of polyanions can potentially lead to a novel cathode. However, the redox reaction in complex structures often involves complex structural evolutions during the electrochemical reaction, which require careful analysis. In this work we synthesized and investigated several polyanionic compounds with different redox couples: Na₇V₄(PO₄)₂(P₂O₇),

Na₄Fe₃(PO₄)₂(P₂O₇), Na₄Mn₃(PO₄)₂(P₂O₇) as electrode materials Na-ion batteries. Different organic electrolytes (1M NaPF₆ in diglyme or EC:DEC) as well as aqueous ones (1M Na₂SO₄, 28m KAc+8m NaAc, 8m NaTFSI etc.) were tested with all these materials.

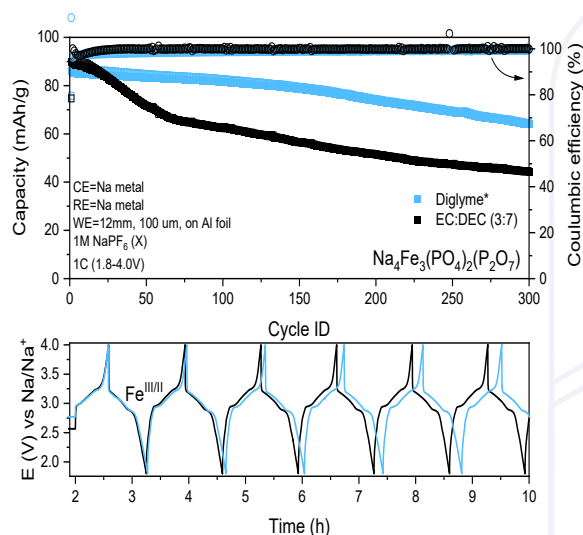


Fig. 1. Galvanostatic cycling of Na₄Fe₃(PO₄)₂(P₂O₇) electrode in different organic electrolytes.

References

1. G.-L. Xu, Adv. Energy Mater., 8 (2018) 1702403.
2. The Paris Agreement. <https://unfccc.int/process-and-meetings/the-paris-agreement/the-paris-agreement>
3. Implementing the SET Plan 2020 report. https://setis.ec.europa.eu/implementing-set-plan-2020-report-2020-11-23_en
4. D. Kundu, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 54 (2015) 3431-3448.
5. J.B. Goodenough, Acc. Chem. Res., 46 (2013) 1053-1061.
6. X. Pu, Small 15, 1805427 (2019).
7. P. K. Nayak, Angew. Chem. Int. Ed. 57, 102 -120 (2018).

Acknowledgements:

This project has received funding from the European Regional Development Fund (Project No. 01.2.2-LMT-K-718-02-0005) under grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT). Part of research was done during fellowship which was funded by Deutschen Bundesstiftung Umwelt.

SEMIEMPIRICAL QM MODEL FOR PREDICTING EXPERIMENTAL pKa VALUES OF PRIMARY SULFONAMIDES

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. Prepare an accurate and very efficient semi-empirical QM model capable of predicting pKa values of primary sulfonamides while using the Protein Ligand Database (PLDB) containing molecular structures and experimental pKa values.
2. Select/create an efficient conformer generation algorithm to generate stable molecular conformers.
3. Optimize selected conformers using DFT and semi empirical GFN2-xTB methods. Analyze nitrogen-sulfur bond length (of sulfonamide group) of optimized structures.
4. Model pKa values against N-S bond length, compare DFT and xTB methods, evaluate model accuracy and efficiency, propose possible errors in experimental data.

Methods:

For this study the PLDB database was selected containing 141 experimental pKa values of drug-like primary sulfonamide compounds. The data was extracted by filtering experiments carried out at 25 °C. The molecular objects were generated using the Rdkit Python package and subjected to 4 different conformer generation algorithms: 1) knowledge based semi-random Rdkit conformer generator, 2) physics based CREST¹ algorithm, 3) in-house semi-physics based Rdkit-DFTB algorithm, 4) Auto3D² algorithm based on Rdkit and machine learning potentials. Rdkit, ASE³ and DFTB+ packages were used for creating the Rdkit-DFTB conformer generation algorithm. An in-house script was used to force hydrogens of sulfonamide group into anti- conformation. GAMESS-US⁴ software package was used for DFT (B3LYP V1R, 6-311g with implicit H₂O solvent) optimization of selected conformers. xTB software package was used for GFN2-xTB⁵ optimization with implicit H₂O solvation of selected conformers.

N-S bond lengths were extracted from optimized structures using an in-house script for recognizing atoms of sulfonamide group in molecules. pKa - N-S bond models were prepared by correlating N-S bond length with experimental pKa values for both DFT and GFN2 optimized structures.

Results and conclusions:

4 conformer generation algorithms were tested in order to select the most accurate and fast option. Auto3D algorithm was identified as the most efficient for this case study. Even though stable conformer quality is very similar to CREST and Rdkit-DFTB, it is much faster than both counterparts. On the other hand, if we were to deal with non-

covalently bound systems CREST would be the only option because it is a completely physics based algorithm and makes use of molecular dynamics. DFT and GFN2 pKa - N-S models yielded R² values of 0.75, 0.74 and AME of 0.30 and 0.31 respectively. The underperformance of semi empirical GFN2 method mostly arises due benzenesulfonamide structures with ortho- substituted halogens (F, Cl, Br). Since, experimental pKa data mostly consisted of primary benzenesulfonamides, non-benzenesulfonamide compounds are predicted with bigger pKa error in both models due to different electronic densities around the N-S bond. In order to accurately predict pKas for non-benzenesulfonamides improvements for the model has to be made by introducing more descriptors. Even though the semi empirical model slightly underperforms compared with the DFT model it is much more efficient so that it is possible to make predictions in a GoogleColab environment on any device with an internet browser.

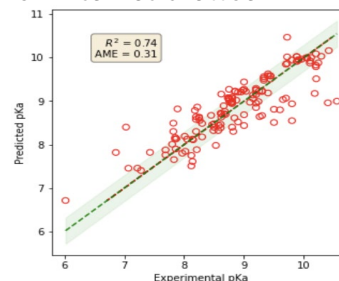


Fig. 1. GFN2 pKa model of PLDB database. Green area denoted for possible 0.3 pKa experimental error.

Since the model uses only one descriptor it is easy to evaluate experimental data while searching for experimental/database errors. One such error was already confirmed by comparing experimental pKa values with the PubChem database for 4-amino-benzene-1-sulfonamide. Experimental pKa value for this compound in the PLDB database was 9.72, whereas the predicted pKa was 10.62 which strongly agrees with PubChem entry (pKa=10.6).

References

1. P. Pracht, F. Bohle, and S. Grimme, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 7169 (2020).
2. Z. Liu, T. Zubatiuk, A. Roitberg, and O. Isayev, J. Chem. Inf. Model. (2022).
3. A. Hjorth Larsen, J. Jørgen Mortensen, J. Blomqvist, I.E. Castelli, and Christensen, J. Phys. Condens. Matter 29, 273002 (2017).
4. G.M.J. Barca, C. Bertoni, L. Carrington, D. Datta, N. De Silva, J.E. Deustua, D.G. Fedorov, and J.R. Gour, J. Chem. Phys. 152, 154102 (2020).
5. C. Bannwarth, S. Ehlert, and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 15, 1652 (2019).

3D CuNi KATALIZATORIAI MODIFIKUOTI Pt NANODALELĖMIS NATRIO BOROHIDRIDO OKSIDACIJAI

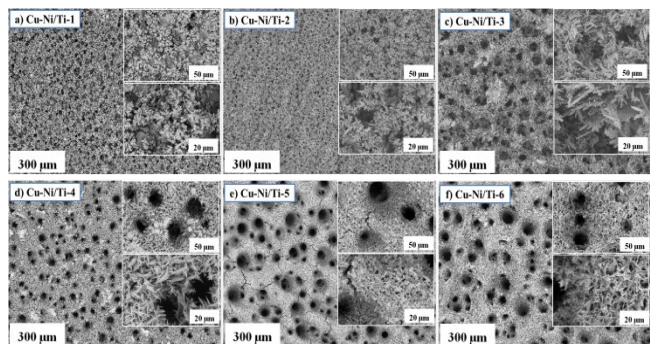
Žana Mickevičienė

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

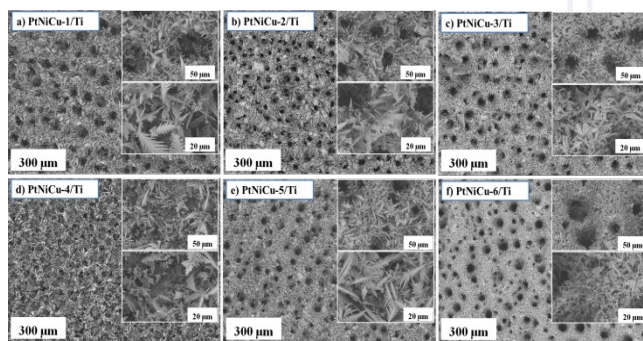
Šiuo metu vienas iš atsinaujinančių energijos šaltinių yra kuro elementai, kur cheminė energija tiesiogiai paverčiama elektros energija. Šiuo metu didelis dėmesys skiriamas naujų efektyvių katalizatorių paieškai arba esamų kuro elementų tobulinimui, kurie leistų padidinti katalizatorių efektyvumą, taip pat sukurti pagrindą naujų technologijų kūrimui. Visi žino, kad tauriųjų metalų katalizatoriai, tokie kaip platina, auksas ir kiti jų lydiniai efektyviai katalizuoja natrio borohidrido oksidaciją. Tačiau tokie katalizatoriai yra labai brangūs, todėl ieškoma alternatyvos.

Darbo tikslas – suformuoti efektyvius ir nebrangius 3D struktūros CuNi/Ti katalizatorius, ir juos papildomai dekoruoti nedideliu platinos nanodalelių kiekiu bei ištirti jų savybes natrio borohidrido oksidacijos reakcijai. CuNi danga buvo gauta taikant elektrocheminio nusodinimo metodą ($i = 1.5 \text{ A cm}^{-2}$, $t = 3,6$ ir 9 min) ant titano (Ti) paviršiaus. Elektrolito tirpalas buvo sudarytas iš 0.5 M Ni^{2+} jonų, o Cu^{2+} jonų koncentracijos svyravo nuo $0,01$ iki $0,02 \text{ M}$. Pt nanodalelės buvo nusodintos ant CuNi/Ti katalizatorių, panardinant CuNi/Ti elektrodus į $1 \text{ mM H}_2\text{PtCl}_6$ 25°C temperatūros tirpalą 1 min.

Paruoštų katalizatorių morfologija ir sudėtis ištirta naudojant skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM) ir indukciškai susietos plazmos optinės emisijos spektroskopiją (ICP-OES).



1 pav. SEM vaizdai 3D Cu-Ni/Ti katalizatorių.



2 pav. SEM vaizdai 3D Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatorių.

Tiriamų CuNi/Ti ir Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatorių elektrokatalizinis aktyvumas natrio borohidrido oksidacijos reakcijai buvo įvertintas, užrašant ciklines voltamperogramas $0,05 \text{ M NaBH}_4 + 1 \text{ M NaOH}$ tirpale, skleidžiant elektrodo potencialą 10 mV s^{-1} greičiu, esant 25°C temperatūrai. CuNi/Ti ir Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatorių aktyvumas taip pat buvo tiriamas tiesioginiame natrio borohidrido-vandenilio peroksido kuro elemente. Suformuoti CuNi/Ti ir Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatoriai buvo naudojami anodo medžiagomis, o Pt elektrodas – katodo. Anolitu pasirinktas $1 \text{ M NaBH}_4 + 4 \text{ M NaOH}$ tirpalas, o katolitu – $5 \text{ M H}_2\text{O}_2 + 1,5 \text{ M HCl}$. Kuro elemento matavimai buvo atlikti esant 25 , 35 , 45 ir 55°C temperatūroms.

Tyrimo metu buvo nustatyta, kad 3D struktūros Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatoriuose Pt įkrova svyravo nuo 6 iki $21 \mu\text{g}_{\text{Pt}}\text{cm}^{-2}$. Naudojant paruoštus Cu-Ni/Ti ir Pt(Cu-Ni)/Ti anodus, galios tankis padidėjo nuo $1,2$ iki $1,7$ karto, keliant temperatūrą nuo 25 iki 55°C . Tiesioginio borohidrido vandenilio peroksido kuro elemento didžiausias galios tankis 239 mW cm^{-2} buvo pasiektas prie 25°C esant srovės tankiui 281 mA cm^{-2} bei $0,85 \text{ V}$ elemento įtampai, naudojant Pt(Cu-Ni)/Ti-3 katalizatorių su Pt įkrova $19 \mu\text{g}_{\text{Pt}}\text{cm}^{-2}$. Tiesioginio borohidrido vandenilio peroksido kuro elemento didžiausias specifinis galios tankis – $27,5 \text{ mW } \mu\text{g}_{\text{Pt}}^{-1}$, pasiektas esant 25°C temperatūrai, naudojant Pt(Cu-Ni)/Ti-4 anodą, kai Pt įkrova buvo $6,35 \mu\text{g}_{\text{Pt}}\text{cm}^{-2}$.

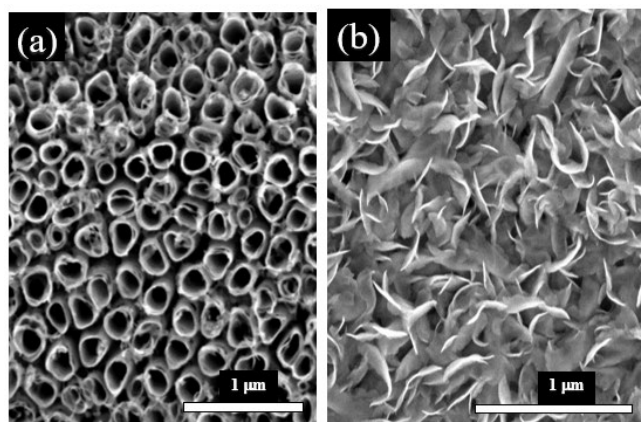
3D struktūros Pt(Cu-Ni)/Ti katalizatoriai yra perspektyvūs ir gali būti naudojami kaip anodo medžiagos tiesioginiams šarminiams borohidrido kuro elementams.

HISTIDINO ĮTAKA MOLIBDENO DISULFIDO ELEKTROKATALIZINIAM AKTYVUMUI VANDENILIO IŠSKYRIMO REAKCIJOJE

Paulius Gaigalas

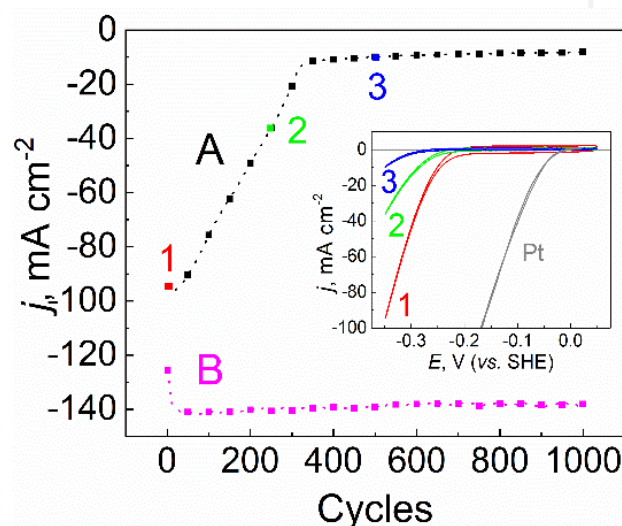
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Elektrocheminės medžiagotyrų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: paulius.gaigalas@ftmc.lt

Vandenilio gavyba pasitelkiant elektrocheminį ar fotocheminį vandens skaldymą pastaruoju metu susilaukia daug dėmesio. Šie metodai yra tvarūs ir gali būti pritaikomi aplinką tausojančios energijos gamybai. Tačiau, vandens skaldymui iš rūgščių ar šarmiųjų tirpalų reikalingas tinkamas katalizatorius. Yra žinoma, jog geriausias vandenilio elektrodukcijos katalizatorius yra platina, tačiau dėl pastarosios kainos bei skurdus išteklių kiekio, norint šį metodą pritaikyti pramonėje, reikalingos alternatyvos platinos katalizatoriams. Viena iš perspektyvių alternatyvų laikomas molibdeno disulfidas (MoS_2) [1]. Tai yra pigi bei netarši medžiaga, tačiau jos termodinamiškai stabiliausia fazė yra puslaidininkinė (2H-MoS_2), o vandenilio jonų adsorbcija vyksta tik ant šios sluoksniuotos medžiagos briaunų. Todėl yra ieškoma būdų padidinti elektrokatalizinį molibdeno disulfido aktyvumą įvedant įvairius priedus, taip siekiant stabilizuoti metalinę (1T-MoS_2) fazę ir padidinti katalitiškai aktyvių vietų skaičių medžiagoje [2]. Šio darbo metu, nanolapelinės molibdeno disulfido dangos buvo formuojamos hidroterminės sintezės būdu ant Ti/TiO_2 padėklų. Taip pat, hidroterminės sintezės metu buvo įterpiamas priedas: DL-histidino amino rūgštis. Dangų morfologija tiek be priedo, tiek sintetinant su DL-histidinu nesikeičia (1 pav.)



1 pav. Ti/TiO_2 pagrindo paviršiaus SEM nuotraukos prieš (a) atliekant hidroterminę sintezę ir po (b) sintezės, naudojant DL-histidiną.

Suformuotų dangų elektrokatalizinės savybės buvo tyrinėtoms pasitelkiant ciklinės voltamperometrijos metodą (2 pav.). Buvo pastebėta, jog MoS_2 dangų elektrokatalizei reikalingas didesnis viršįtampis, lyginant su platinos elektrodais. Sintetinant dangas be priedų, elektrokatalizinis aktyvumas vykstant reakcijai prastėja ir jau po 500 ciklų srovės tankiai yra penkis kartus mažesni, lyginant su pradiniais. Tuo tarpu dangos, formuotos su DL-histidinu pasižymi ne tik didesniais pradiniais srovės tankiais, tačiau ir išlaikė savo elektrokatalizinį aktyvumą nepakitusį viso tyrimo metu.



2 pav. MoS_2 elektrokatalizatorių srovės tankio priklausomybė nuo ciklų skaičiaus: (A) – MoS_2 , (B) – $\text{MoS}_2/\text{DL-his}$. Intarpe pavaizduotos katalizatoriaus be priedo ir platinos CV kreivės.

Literatūra

- Liao L, Zhu J, Bian X, Zhu L, Scanlon MD, Girault HH, Liu B (2013) MoS_2 Formed on Mesoporous Graphene as a Highly Active Catalyst for Hydrogen Evolution. *Adv Func Mater* 23(42):5326-5333. <https://doi.org/10.1002/adfm.201300318>
- Shi S, Gao D, Xia B, Liu P, Xue D (2015) Enhanced hydrogen evolution catalysis in MoS_2 nanosheets by incorporation of a metal phase. *J Mater Chem A* 3:24414-24421. <https://doi.org/10.1039/C5TA08520A>

SKRUZDŽIŲ RŪGŠTIES OKSIDACIJOS TYRIMAS ANT Ni IR Cu KIETŲJŲ PUTŲ

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

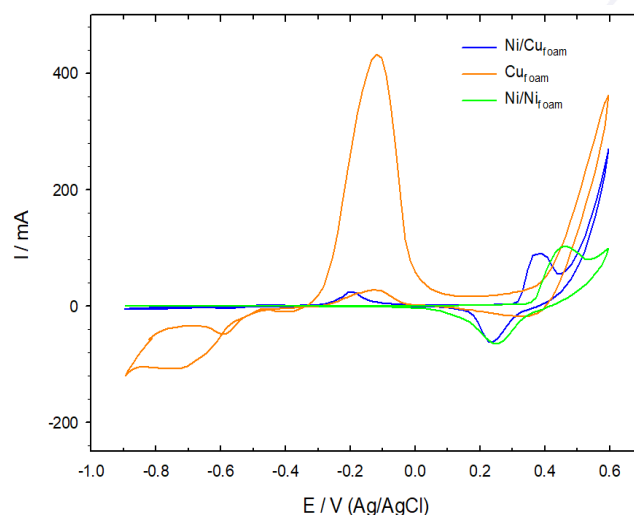
Klimato kaitos iššūkiai, karai ir energetinės krizės skatina vėjo, saulės energetikos technologijų tobulinimą ir vystymą, tačiau tuo pat metu ir kitų alternatyvių energijos šaltinių panaudojimas įgauna daug didesnę prasmę. Kuro elementai yra vienas iš alternatyvių energijos gavimo būdų, kuris cheminę reakcijų energiją verčia į elektros energiją. Labai svarbią rolę kuro elementuose užima kuro oksidacija ir deguonies redukcija, atitinkamai ant anodo ir katodo.

Todėl yra skiriamas didelis dėmesys vystomų kuro elementų anodo ir katodo medžiagų kūrimui ir tobulinimui. Medžiagos naudojamos anodui ar katodui 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.

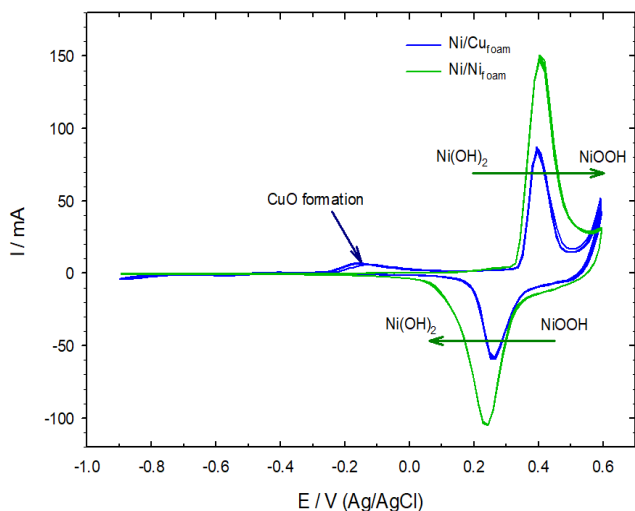
Tyrimo metu buvo atliekamas Ni ir Cu kietųjų putų katalizatorių formavimas, naudojant cheminį medžiagų nusodinimą ant Ni ir Cu kietųjų

putų pagrindų. Ni ir Cu kietosios putos buvo padengiamos Ni sluoksniu, panaudojant cheminį nikeliavimą. Su gautais katalizatoriais buvo atliekami skruzdžių rūgšties oksidacijos elektrocheminiai tyrimai.

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



2 pav. Ni/Cu (mėlyna), Cu (oranžinė), Ni/Ni (žalia) kietųjų putų CV užrašytos 0,5 M FA + 1 M NaOH tirpale, kai sklaidžiamo elektrodo potencialo greitis 50 mV s⁻¹.



1 pav. Ni/Cu (mėlyna) ir Ni/Ni (žalia) kietųjų putų CV užrašytos 1 M NaOH tirpale, kai sklaidžiamo elektrodo potencialo greitis 50 mV s⁻¹.

ELECTROCHEMICAL DEPOSITION AND MODIFICATIONS OF POLYPYRROLE WITH METHYLENE BLUE

Raimonda Bogužaitė¹, Vilma Ratautaitė¹, Miglė Beatričė Mickevičiūtė²,
Arūnas Ramanavičius^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanotechnology,
Sauletekio av. 3, Vilnius LT-10257, Lithuania. E-mail raimonda.boguzaitė@ftmc.lt

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

Electrochromism describes the phenomenon in which the colour of the material depends on the applied potential [1]. In conducting polymers, electrochromism occurs due to changes in the π - π conjugated electronic system and the ability to participate in electrochemical oxidation and reduction. Electrochromic properties are characteristic features not only for non-organic materials but also, for some conducting polymers (e.g., polypyrrole (Ppy) and poly(methylene blue) (PMB)) [2].

Ppy is one of the most analysed conducting polymers used for the development of various types of sensors [3]. The combination of Ppy with MB might be used to create electrochromic coatings with advanced properties [4,5]. Moreover, the conductivity of Ppy can be effectively changed by dopants. [6] Saccharides may be one of those dopants that will have a beneficial effect on surface modification [7].

Cyclic voltammetry, which is easy to apply and convenient to use, was the most applied method for the electrochemical polymerization of PMB. Also, the electrochemical polymerization method meets the requirements of green chemistry [8]. Ppy-PMB layers could be used for optoelectronic applications, as a photosensitizer for medical applications in deep tissue treatment, or in solid-state photo-electrochemical cells [9]. This study aimed to co-deposit the Ppy-PMB layer on the ITO electrode in the presence of three saccharides (lactose, sucrose, and heparin) during a single-step procedure and compare the effect of different saccharides on the electrochromic properties.

The electrochemical deposition of the polypyrrole layer was carried out by cyclic voltammetry from a solution containing 50 mM of pyrrole, 10 mM of methylene blue, and one of the doping materials: lactose, sucrose, and heparin. Surface morphology was analysed by AFM and SEM methods. The saccharides used in this study have a moderate effect on the surface morphology and roughness of Ppy-PMB layers. The Ppy-PMB layers were examined by varying the pH of the BRB solution and the potential.

The (Ppy-PMB)_{Suc} layer had the best conductivity properties and the fastest bleaching and colouration times. The suitability of the Ppy-PMB layer for use as an electro-chromic sensor of xanthine derivatives, such as caffeine, theophylline, and theobromine, was investigated.

References

1. C.G. Granqvist, Oxide electrochromics: an introduction to devices and materials, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 99, 1-13, 2012.
2. A.A. Argun, P.-H. Aubert, B.C. Thompson, I. Schwendeman, C.L. Gaupp, J. Hwang, N.J. Pinto, D.B. Tanner, A.G. MacDiarmid, J.R. Reynolds, Multicolored electrochromism in polymers: structures and devices, Chem. Mater. 16, 4401-4412, 2004.
3. R. Celiesiute, A. Ramanaviciene, M. Gicevicius, A. Ramanavicius, Electrochromic Sensors Based on Conducting Polymers, Metal Oxides, and Coordination Complexes, Critical Reviews in Analytical Chemistry, Vol. 49, Issue 3, 195-208, 2019.
4. P. Moarref, M. Pishvaei, A. Soleimani-Gorgani, F. Najafi, Synthesis of polypyrrole/indium tin oxide nanocomposites via miniemulsion polymerization, Des. Monomers Polym. 19, 138-144, 2016.
5. R. Boguzaitė, V. Ratautaitė, L. Mikoliunaite, V. Pudzaitis, A. Ramanaviciene, A. Ramanavicius, Towards analytical application of electrochromic polypyrrole layers modified by phenothiazine derivatives. J. Electroanal. Chem., 886, 115132, 2021.
6. J.M. Fonner, C.E. Schmidt, P. Ren, A combined molecular dynamics and experimental study of doped polypyrrole. Polymer, 51, 4985-4993, 2010.
7. J. Serra Moreno, S. Panero, S. Materazzi, A. Martinelli, M.G. Sabbieti, D. Agas, G. Materazzi, Polypyrrole-polysaccharide thin films characteristics: Electrosynthesis and biological properties. J. Biomed. Mater. Res. A, 88A, 832-840, 2009.
8. R.M. Ion, F. Scarlat, F. Scarlat, V.I.R. Niculescu, Methylene - Blue modified polypyrrole film electrode for optoelectronic applications, J. Optoelectron. Adv. Mater. 5, 109-115, 2003.
9. V. Ratautaitė, R. Boguzaitė, M.B. Mickeviciute, L. Mikoliunaite, U. Samukaite-Bubniene, A. Ramanavicius, A. Ramanaviciene, Evaluation of Electrochromic Properties of Polypyrrole/ Poly(Methylene Blue) Layer Doped by Polysaccharides. Sensors, 22, 232, 2022.

ANALYSIS OF DOXORUBICIN/GRAPHENE QUANTUM DOT COMPLEX FORMATION USING BLACK SILICON-BASED SERS SUBSTRATE

Lena Golubewa

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

Doxorubicin (DOX) is one of the chemotherapeutic agents used in the treatment of cancer. Its disadvantage is poor selectivity for target cells and uncontrolled distribution throughout the body, which causes serious side effects. In this regard, the development of non-toxic carriers of doxorubicin for targeted delivery of the drug to the tumor tissue is an actual task. The carrier should have high tissue permeability, loading capacity and be able to release the drug in controllable way. Ideally, the carrier should be a fluorescent particle allowing image-guided drug delivery to the target tissue. Boron nitride quantum dots (BNQDs) have been already demonstrated to act as such a fluorescent shuttle for DOX molecules. However, BNQDs are not that efficient because of their UV-blue luminescence overlapping significantly with tissue autofluorescence.

Green fluorescent graphene quantum dots (GQDs) are likely to become carriers appropriate for image-guided DOX delivery to the target tissue: (i) GQDs are flakes of a few layers of graphene suitable for π -stacking mechanism of complex formation with large variety of analytes likely including DOX; (ii) GQDs are biocompatible, non-cytogenic or cytotoxic; (iii) five nm sized GQDs exhibit bright green fluorescence [1].

To produce reliable protocol for application of GQDs as secure and firm carrier for DOX, investigation of DOX-GQD complexes formation was performed. Suspension of DOX and GQDs of different concentrations (10^{-6} - 10^{-4} M and 25-50 $\mu\text{g/mL}$, respectively) were analyzed using steady-state and time-resolved fluorescence spectroscopies. Concentration and time-dependent decrease in characteristic lifetimes was demonstrated. To reveal the mechanism of DOX-GQD complexes formation, photoluminescence excitation/emission (PLE) data maps of DOX-GQD complexes of different concentrations and at various time points were obtained and obvious differences between the PLE characteristics of the complexes and those of the GQDs and DOX were shown.

The concentrations of DOX and GQDs are in the ranges of 10^{-6} - 10^{-5} M and 25-50 $\mu\text{g/mL}$, respectively, which makes conventional Raman spectroscopy approach inappropriate. In the present study we applied black silicon sputtered with gold (bSi/Au) as a substrate for surface enhanced Raman spectroscopic (SERS) investigation of DOX, GQDs and DOX-GQDs complexes. BSi is a specifically etched silicon wafer with high curvature cone-like structures of micrometers height, which increase absorbance and suppress reflectivity. After being sputtered with gold, these structures serve as active sites for electromagnetic field enhancement (hot spots) and induce Raman signal enhancement up to 10^8 times (for the bSi/Au used in this study [2]). Unlike Raman spectroscopy which failed in

getting any valuable spectra of low-concentration solutions, SERS spectra were obtained for all investigated complexes and complex-forming agents.

SERS spectra allowed revealing the complex structure of functionalized GQD, i.e., green fluorescent GQDs (900712, Sigma Aldrich) strongly passivated with oxygen-containing groups, which are involved in additional DOX molecule orientation on the graphene island. Based on the band shifts in the spectra, as well as on the change in the relative intensity of the doxorubicin and GQD bands, the main functional groups engaged in the formation of the complex were identified.

The obtained data were proved by further DFT calculations, which were carried out both for individual compounds and for their conjugates in vacuum and in an aqueous medium, imitating the cytoplasm of living cells. SERS spectral data on high enrichment of GQDs with oxygen-containing groups became the basis for GQD model modification. Calculations were performed for GQD, consisting of 114 carbon atoms, and containing 10 hydroxyl groups (GQD_C114H20(OH)10). A comparative analysis of the electronic structure of DOX and the GQD-DOX complex revealed the decrease in the $\Delta E = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}$ difference between the energies of the lowest non-occupied and highest occupied molecular orbitals, allowing to assume the formation of a stable complexes. Moreover, the dipole moment of GQD obtained after geometry optimization significantly increased when complex with DOX is formed.

To summarize, in the present study concentration and time-dependency of DOX-GQD complexes formation was demonstrated. SERS spectroscopic analysis allowed to reveal the main functional groups and GQD structures responsible for the stable complexation of DOX molecules with GQDs and provided sufficient data on the functionalized GQD structure, which were further used for DFT simulations of DOX-GQD complexes. The obtained results will be used to develop methods of controllable release of doxorubicin in the target tissue.

References

1. Golubewa, L. et al. Nanotechnology **33**, 15 (2022)
2. Golubewa, L. et al. ACS Appl. Mater. Interfaces **12**, 50971-50984 (2020).

EVALUATION OF STEM CELLS BY SCANNING ELECTROCHEMICAL MICROSCOPY

Kasparas Kižys, Inga Morkvėnaitė-Vilkončienė

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

Cardiomyopathies are a heterogeneous group of myocardial diseases associated with electrical or mechanical disorders of cells that cause inappropriate functioning of the left atrium¹. Various forms of cardiomyopathies are recorded, while dilated cardiomyopathy (DCM) is considered to be the most ubiquitous and common form of cardiomyopathy in the world defined by the dilation and contractile dysfunction of left atrium leading to heart failure and requirement of heart transplantation². DCM can be induced by many prolonged external and internal influences such as diabetes, toxins, alcohol intake, stress, chemotherapeutic agents and others^{3,4}. Treatment of DCM is difficult regarding the complexity of disease including multiple mutations, effect of pathological modulators debilitating molecular mechanisms performing heart tissue contraction and proper cell functioning^{4,5}. Therefore, a search for new methods investigating intracellular changes of dilated myocardium MSC is of particular importance with the purpose to improve heart tissue regeneration.

Scanning electrochemical microscopy (SECM) is a versatile tool for studying and visualization of surfaces electrochemical activity, by using small Ultramicroelectrode (UME) as a probe with resolution range from micro to nano⁶. Even though in the beginning it was mainly used to research corrosion processes, today SECM is widely applied to study biological samples as it is non-invasive, capable of measuring in natural growth environment *in vitro*⁷, capable to provide insight about reaction kinetics which are occurring locally, map diffusion gradient around the sample⁸. Because of these inherent characteristics SECM can be used to study cells and their physiological state.

During the study of human heart atrium-derived mesenchymal stem cells (MSC) the cellular redox state was researched using feedback mode of scanning electrochemical microscopy while utilizing ferrocene monocarboxylic acid (FcCOOH) as a redox mediator. The mesenchymal stem cells (MSCs) were isolated from human healthy and dilated heart myocardium of left atriums. Cellular redox state of MSC were evaluated by measuring efflux of glutathione where it is reduced by $[\text{FcCOOH}]^+$.

Measurements were performed by probe approaching the surface of immobilized MSC.

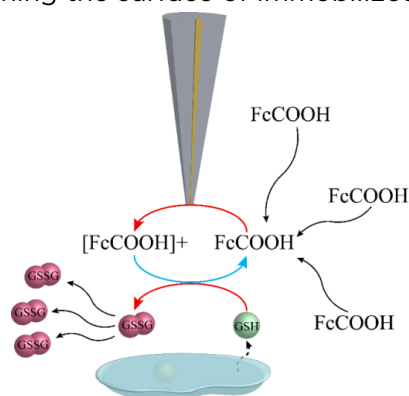


Fig. 1. Schematic representation of experiment in feedback mode.

References

1. Maron, B. J. *et al.* Contemporary Definitions and Classification of the Cardiomyopathies. *Circulation* **113**, 1807-1816 (2006).
2. Cooper, L. T. Myocarditis. *N. Engl. J. Med.* **360**, 1526-1538 (2009).
3. Islam, A., Abraham, P., Hapner, C. D., Deuster, P. A. & Chen, Y. Tissue-specific upregulation of HSP72 in mice following short-term administration of alcohol. *Cell Stress Chaperones* **18**, 215-22 (2013).
4. Maisch, B., Noutsias, M., Ruppert, V., Richter, A. & Pankuweit, S. Cardiomyopathies: Classification, Diagnosis, and Treatment. *Heart Fail. Clin.* **8**, 53-78 (2012).
5. Dadson, K., Hauck, L. & Billia, F. Molecular mechanisms in cardiomyopathy. *Clin. Sci.* **131**, 1375-1392 (2017).
6. Lazenby, R. A. & White, R. J. Advances and perspectives in chemical imaging in cellular environments using electrochemical methods. *Chemosensors* **6**, (2018).
7. Morkvenaite-Vilkonciene, I., Ramanaviciene, A. & Ramanavicius, A. 9,10-Phenanthrene-quinone as a redox mediator for the imaging of yeast cells by scanning electrochemical microscopy. *Sensors Actuators, B Chem.* **228**, 200-206 (2016).
8. Morkvenaite-Vilkonciene, I., Ramanaviciene, A., Genys, P. & Ramanavicius, A. Evaluation of Enzymatic Kinetics of GOx-based Electrodes by Scanning Electrochemical Microscopy at Redox Competition Mode. *Electroanalysis* **29**, 1532-1542 (2017).

EMULSIFYING PROPERTIES OF PEF-TREATED BSA/STARCH CONJUGATES

Ahmed Taha*, Federico Casanova**, Povilas Šimonis*, 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

Pulsed electric field (PEF), as an emerging eco-friendly technology, has been used in the food industry for the inactivation of enzymes and microorganisms¹. During PEF treatment, pulses of high voltage electric field for a short time (from nanoseconds to milliseconds) were applied to the material between two electrodes². PEF technology offers several advantages over traditional pasteurization methods in the food industry, such as shelf-life extension, nutrient retention, quality preservation, and cost-effectiveness³. Besides, PEF was utilized to change the structural and techno-functional properties of food proteins. In this study, PEF treatment (at electric field strengths from 3.5–8.1 kV/cm, pulse duration (τ) = 50 μ s) employed to facilitate the glycation between BSA and soluble potato starch. The physicochemical and emulsifying properties of the BSA/starch conjugates were investigated (Fig. 1).

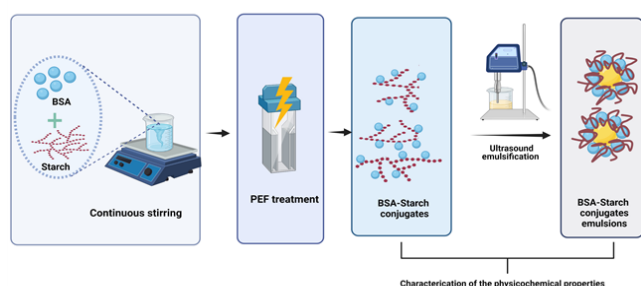


Fig. 1. Summary of study design and steps.

Electroporation at 3.5–5.7 kV/cm decreased fluorescence emission intensity of BSA/soluble starch conjugates (Fig. 2). Furthermore, PEF-treated (3.5–5.7 kV/cm) BSA/soluble starch conjugates had better emulsifying properties (lower droplet size of emulsions) and protein solubility compared to native BSA and untreated BSA/soluble starch mixtures (Fig. 3).

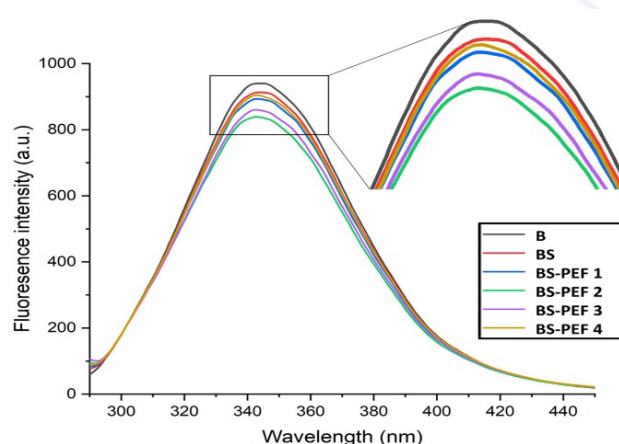


Fig. 2. Fluorescence spectra of BSA and BSA/starch conjugates. B; native BSA, BS; BSA/starch mixture without PEF, BS-PEF 1– 4; PEF treated conjugates at 3.5, 4.5, 5.7 and 8.1kV/cm, respectively.

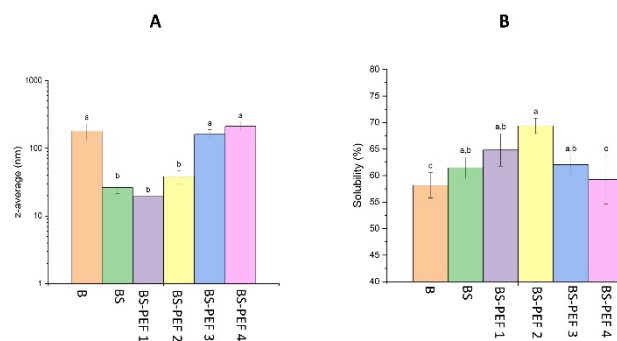


Fig. 3. A) Particle size (z-average), B) Protein solubility of BSA and BSA/Starch conjugates with and without PEF treatment.

In conclusion, it is recommended to apply low-moderate PEF treatment to improve the emulsifying properties of BSA/starch complexes. These findings could promote the application of PEF technology in the food and pharmaceutical sectors.

References

1. Jaeger, H., Meneses, N. & Knorr, D. Innovative Food Science and Emerging Technologies 10, 470–480 (2009).
2. Taha, A. et al. Foods 11, 1556 (2022).
3. Arshad, R.N. et al. Trends Food Sci Technol 104, 1–13 (2020).

HUMAN UROTENSIN II: SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTROSCOPY OF POTENTIALLY INDUCED CHANGES

Aliona Klimovich¹, Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė², Hamza Rehman³,
Polina Kuzhir³, Ieva Matulaitienė¹

¹ State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
email: aliona.klimovich@ftmc.lt

² Institute of Chemical Physics, Vilnius University, Saulėtekio av. 9, III bld., LT-10222 Vilnius, Lithuania

³ Institute of Photonics, University of Eastern Finland, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu, Finland

Raman spectroscopy as well as surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) are highly specific methods of investigation and characterization of organic molecules as nucleic acids, proteins and lipids. This technique can be used in situ in conjunction with electrochemistry to provide information on bonding, intra- and extramolecular interactions. Urotensin-II (U-II), a cyclic peptide with 11 amino acid residues, was first discovered in 1982 (Goby fish) and in the human body characterized as the most potential vasoconstrictor [1].

In this Study the Human U-II (hU-II) was investigated on black silicon-based substrates (bSi/Au), which possess exceptional SERS characteristics and were previously described [2]. The figure 1 shows the SERS spectra of hU-II on bSi/Au in potential range from -0.8V to 0.0V. We noticed that the electrode potential had no effect on certain vibrational bands at 756, 1003, 1029 and 1075 cm^{-1} (assigned to phenylalanine ring vibrations). When the potential changes from -0.8V to 0.0V, the intensity of the bands at 1227, 1358, 1537 cm^{-1} (related to pyrrole ring) increase, while the intensity of other bands related to pyrrole at 1263, 1421 cm^{-1} decrease.

The changes in the spectra occurs as a result of the reorientation of the peptide relative to the bSi/Au surface and adsorption hU-II on gold surface through phenylalanine aromatic ring.

References:

1. R. Ames, *et al.*, Nature, **401**, 282 (1990).
2. L. Golubewa, *et al.*, ACS Appl. Mat. Interfaces, **12**, 50971 (2020).

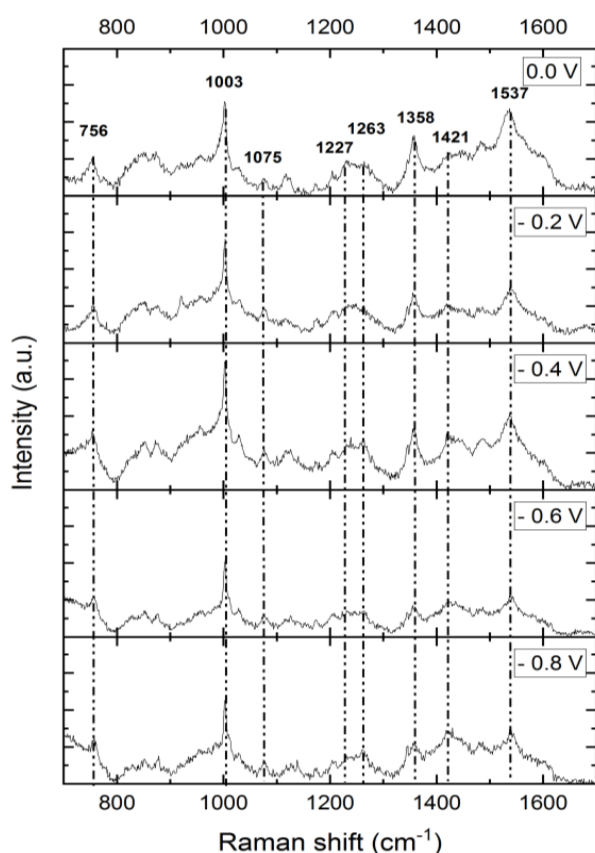


Fig.1. SERS spectra of hU-II adsorbed on a bSi/Au at different electrode potentials. Measurement conditions: 0.1 M Na₂SO₄ solution containing 0.01 M phosphate buffer (pH 7.0) and 10⁻⁵ M of hU-II; excitation wavelength 785 nm; laser power at the sample 50 mW; integration time, 500 s.

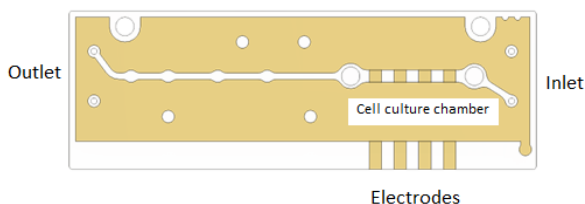
MIKROTĖKMĖS CHIPO, SKIRTO LĄSTELIŲ ELEKTROPORACIJAI, GAMYBOS TECHNOLOGIJA

Neringa Bakutė, Paulina Kizinievič, Elinga Bražionytė, Arūnas Stirke

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

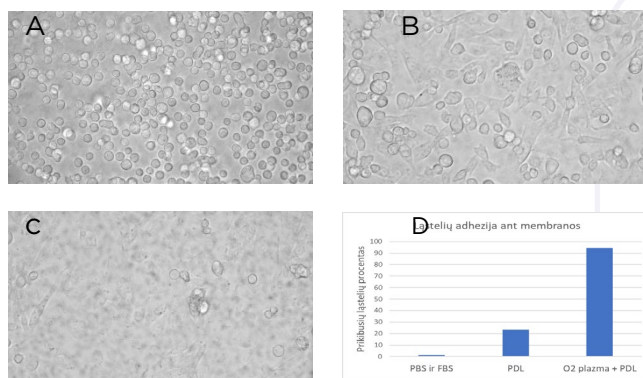
Mikrotėkmės technologija apibūdinama kaip inžinerinis manipuliavimas skysčiais nuo nano iki mikro skalės. Ji įgauna vis daugiau potencialo biologijos mokslų srityje, nes leidžia atlikti didelės apimties ir labai specifinę analizę biologijoje, medicinoje ir chemijoje. Naudojant mikrofluidinį prietaisą tapo įmanoma visą laboratoriją sujungti į vieną paprastą mikro dydžio sistemą, sunaudojant tik nedidelį kiekį reagentų ir vietos. Mikrotėkmės prietaisas dar vadinamas "laboratorijos ant lusto" technologija [1]. Pereinant nuo makrolygio prie mikrolygio, galima beprecedentė procesų kontrolė, vykstančių skirtingoje plotmėje laiko ir erdvės atžvilgiu, ko neįmanoma užfiksuoti įprastinėse Petri lėkštelėse ir šulinėlių plokštelėse [2]. Nepaisant to, nėra vieno standartinio mikrotėkmės chipo, kurį būtų galima naudoti visoms skirtingoms tyrimų sritims – kiekvienai jų reikia tam tikros geometrijos, įleidimo ir išleidimo angos, kanalo gylio ir kitų parametrų, kad būtų galima tiksliai reguliuoti reikiamą funkciją. Todėl mikrotėkmės chipai dažniausiai yra gaminami pagal konkrečius reikalavimus ir poreikius.

Mūsų tikslas yra pagaminti nepertraukiamo srauto mikrotėkmės chipą eksperimentams su adheziniams arba suspensiniams žinduolių ląstelėmis, skirtą ląstelių elektroporacijai. Visi manipuliavimo ląstelėmis veiksmai atliekami ląstelių kultivavimo kameroje. Polikarbonatinė membrana padalija kanalą į du lygiagrečius mikrokanalus. Polikarbonatinė membrana veikia kaip ląstelių adhezijos paviršius, tuo pačiu ir kaip barjeras tarp dviejų mikrokanalų. Ląstelių kultūros kameroje yra integruoti elektrodai, skirti elektroporacijai. 1 paveiksle pavaizduota mikrotėkmės chipo schema ir gautas chipas (1 pav.).



1 pav. Mikrotėkmės chipas – schema ir realus chipas.

Kadangi kanalų perskyrimui ir ląstelių adhezijai naudojame pokarbonatinę membraną, buvo atlikti eksperimentai ląstelių adhezijos sąlygų parinkimui. Tikrinta ląstelių adhezija po membranos inkubacijos su PBS, FBS, poly-D-lizinu (PDL) ir deguonies plazma kartu su PDL. Apie 95 procentai prikibusių ląstelių gauta polikarbonatinę membraną paveikus deguonies plazma ir padengus PDL (3 pav.), šios sąlygos traktuojamos kaip optimaliausios.



3 pav. Ląstelių linija CHO-K1 buvo pasėta ant polikarbonato membranos, apdorotos (A) PBS arba FBS, (B) poli-D-lizinu (PDL), (C) deguonies plazma kartu su poli-D-lizinu. (D) Ląstelių adhezijos priklausomybė nuo membranos apdorojimo. Duomenys ir nuotraukos surinkti po 24 val. trukusios ląstelių inkubacijos ant membranos.

Apibendrinant galima teigti, kad sukūrėme technologiją, skirtą gaminti nepertraukiamo srauto mikrofluidinį lustą, skirtą žinduolių ląstelėms manipuluoti ir elektroporuoti. Mikrochipui gaminti pasirinkome polikarbonato membraną ir parinkome optimalias sąlygas ląstelių adhezijai ant polikarbonato membranos. Sekančiuose etapuose sukurtas mikrotėkmės chipas bus naudojamas žinduolių ląstelių elektroporacijos poveikiui tirti esant nepertraukiamam srautui.

Literatūra

- [1] Tabeling P. *Oxford University Press* (2005)
- [2] Edmond W. K. Young and David J. Beebe. *J Chem Soc Rev.*; 39(3): 1036-1048 (2010)

AUKŠTOS KLAMPOS TYRIMAMS SKIRTAS RAUDONAI FLUORESCUOJANTIS BODIPY MIKROKLAMPOS JUTIKLIS

Karolina Maleckaitė¹, Jelena Dodonova-Vaitkūnienė²,
Stepas Toliautas³, Rugilė Žilėnaitė¹, Sigitas Tumkevičius², Aurimas Vyšniauskas¹

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

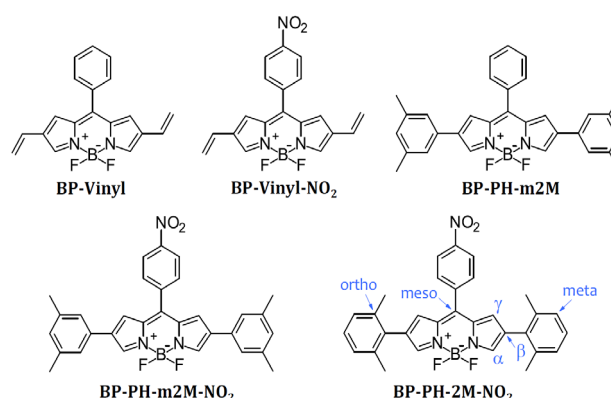
² Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas,
Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

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

Mikroskopinė klampa (mikroklampa) - parametras, kuris gali suteikti informacijos apie ląstelės viduje vykstančius procesus, pavyzdžiui, molekulių difuziją ir ląstelių žūtį. Mikroklamos pokytis ląstelėse taip pat gali indikuoti Alzheimerio ligą, kepenų susirgimus ir kitus sveikatos sutrikimus [1].

Vienas iš paprasčiausių mikroklamos stebėjimo ląstelėse būdų yra fluorescuojančių molekulių rotorių panaudojimas. Jų veikimo principas paremtas fluorescencijos ir vidujmolekulinės rotacijos konkurencija: kuo greitesnė rotacija, tuo greitesnė nespindulinė relaksacija [2]. Paprastai tariant, klampesnėje terpėje išauga fluorescencijos intensyvumas [1]. Fluorescencijos gyvavimo trukmę paremti molekuliniai rotorai yra vienas iš taikymuose naudojamų rotorių tipų [3]. Įterpus šio tipo molekules į bandinį ir žadinant jas lazeriu, galime pasitelkti laike koreliuotą fluorescencijos mikroskopiją (angl. *Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy, FLIM*) ir stebėti fluorescencijos gesimą viso vaizdinamo bandinio plote. Naudodami mikroklampai jautrų fluoroforą, ilgesnę fluorescencijos kinetiką stebėsime labiau klampioje terpėje. Boro dipyrometeno (BODIPY) grupę paremtos molekulės yra dažnai sutinkamos mikroklamos tyrimuose. BODIPY paremti rotorai yra lengvai modifikuojami, netoksiški ląstelėms ir pasižymi monoeksponentine fluorescencijos gesimo kinetika, o tai leidžia supaprastinti rezultatų analizę. Tačiau dauguma BODIPY mikroklamos jutiklių yra žaliai fluorescuojantys. Tai yra didelis trūkumas norint atlikti vaizdinimą ląstelėse, kur ilgabangė fluorescencija yra privalumas, nes leidžia išvengti ląstelėje esančių organelių autofluorescencijos [4] ir patenka į giliųjų audinių vaizdinimo langą (650-1350 nm) [5].

Šiame tyrime pristatomas naujas raudonai fluorescuojantis mikroklamos jutiklis BP-Vinyl-NO₂, kuris pasižymi ypač plačiu klamos jautrumo diapazonu [6]. Darbe nagrinėjami β-dipakeisti BODIPY junginiai su fenilgrupių ir vinilgrupių pakaitais, bei įvertinama mezo-fenil pozicijoje esanti nitrogrupės įtaka. Metodika sudaryta iš teorinės ir eksperimentinės dalių.



1 pav. Šiame darbe pristatomų BODIPY junginių molekulinės struktūros: BP-Vinyl, BP-Vinyl-NO₂, BP-PH-m2M, BP-PH-m2M-NO₂ and BP-PH-2M-NO₂. Mėlynai pažymėtos molekulės pakaitų pozicijos.

Pirmiausia, atlikti teoriniai modeliavimai naudojant tankio funkcionalo teoriją (angl. *Density Functional Theory, DFT*). Vėliau, eksperimentinėje dalyje atlikta sugerties spektroskopija, nuostovioji ir laike koreliuota fluorescencijos spektroskopija, išmatuoti kvantiniai našumai. Gauti rezultatai leido įvertinti pakaitų įtaką molekulių jautrumui aplinkos klampai, temperatūrai ir poliškumui.

Literatūra

- [1] M. A. Haidekker, M. Nipper, A. Mustafic, D. Lichlyter, M. Dakanali and E. A. Theodorakis, Springer Series on Fluorescence, 2010, 267-308.
- [2] M. K. Kuimova, Phys. Chem. Chem. Phys., 2012, 14, 12671.
- [3] A. Vyšniauskas and M. K. Kuimova, International Reviews in Physical Chemistry, 2018, 37, 259-285.
- [4] Y. W. Jun, H. R. Kim, Y. J. Reo, M. Dai and K. H. Ahn, Chem. Sci., 2017, 8, 7696-7704.
- [5] R. Weissleder, Nat Biotechnol., 2001, 19, 316-317.
- [6] K. Maleckaitė, J. Dodonova-Vaitkūnienė, R. Žilėnaitė, S. Tumkevičius and A. Vyšniauskas, Methods Appl. Fluoresc., 2022, 10, 034008.

SARS-CoV-2 NUCLEOCAPSID PROTEIN IMMUNE COMPLEX INVESTIGATION BY COMBINED ACOUSTIC AND OPTICAL METHODS

Vincentas Mačiulis^{1,2}, Ieva Plikusienė^{1,2}, Silvija Juciutė², Arūnas Ramanavičius^{1,2}, Zigmantas Balevičius³, Rimantas Slibinskas⁴, Indre Kučinskaitė-Kodžė⁴, Martynas Simanavičius⁴, Saulius Balevičius⁵, Almira Ramanavičienė²

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanotechnology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: vincentas.maciulis@ftmc.lt

²NanoTechnas – Center of Nanotechnology and Materials Science, Faculty of Chemistry and Geosciences,
Vilnius University, Naugarduko str. 24, 03225 Vilnius

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

⁴Institute of Biotechnology, Life Sciences Center, Vilnius University
Saulėtekio av. 7, LT-10257 Vilnius

⁵Center for Physical Sciences and Technology, Department of Functional Materials and Electronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

SARS-CoV-2 virus and its' comprising proteins are of keen interest to the scientific community. Nucleocapsid protein (SCoV2-N) is widely used alongside the spike protein in COVID-19 rapid detection kits. The nucleocapsid proteins (SCoV2-N) are the earliest detectable diagnostic markers for COVID-19 infection, also a high count of anti-SCoV2-N can result in an increased risk of hospitalization and admission to intensive care on a subsequent infection of COVID-19 [1]. The investigation of SCoV2-N and its' interaction with anti-SCoV2-N require highly sensitive systems that can be used for real-time analysis.

To achieve high precision and accuracy, label-free, non-contact methods need to be applied. This work combines two highly sensitive methods, that are widely applied when examining reactions at the solid-liquid interface. One is the optical method of spectroscopic ellipsometry, it is a highly sensitive, non-destructive measurement method. It measures parameters; Ψ - light wave amplitude, and Δ - light wave phase shift. These parameters allow for the determination of layer thickness and refractive index of formed protein monolayers, these are then used for the evaluation of dry protein mass density (evaluation that calculates only the immobilized protein mass) [2]. Second method is quartz crystal microbalance with dissipation, which is a acoustic measurement method that measures; Δf - frequency change, and Δd - energy dissipation of a quartz crystal sensor. When the sensor is modified, has proteins immobilized or is affected in a way that adds material on the surface of the sensor - sensor's frequency lowers to compensate for the increased mass, this can be utilized to evaluate the wet surface mass density (evaluation that includes the material and surrounding liquid mass on the sensor), a change in energy dissipation can give information on the

immobilized protein viscoelastic properties [3]. Both methods are good tools for biomolecule interaction analysis. A combined spectroscopic ellipsometry and quartz crystal with dissipation measurement method, allows the evaluation of hydration, dielectric and viscoelastic properties [4].

In this work, real time interaction of SCoV2-N and anti-SCoV2-N was recorded using spectroscopic ellipsometry and quartz crystal microbalance. Formed protein layers were analyzed, providing information on antibody flexibility and spatial arrangement in SCoV2-N/anti-SCoV2-N immune complex.

References

- [1] M. Batra *et al.*, "Role of IgG against N-protein of SARS-CoV2 in COVID19 clinical outcomes," *Sci. Rep.*, vol. 11, no. 1, pp. 1–9, 2021, doi: 10.1038/s41598-021-83108-0.
- [2] I. Baleviciute, Z. Balevicius, A. Makaraviciute, A. Ramanaviciene, and A. Ramanavicius, "Study of antibody/antigen binding kinetics by total internal reflection ellipsometry," *Biosens. Bioelectron.*, vol. 39, no. 1, pp. 170–176, Jan. 2013, doi: 10.1016/j.bios.2012.07.017.
- [3] S. B. Nielsen and D. E. Otzen, "Quartz Crystal Microbalances as Tools for Probing Protein-Membrane Interactions," *Methods Mol. Biol.*, vol. 2003, pp. 31–52, 2019, doi: 10.1007/978-1-4939-9512-7_2.
- [4] M. Koenig *et al.*, "Combined QCM-D/GE as a tool to characterize stimuli-responsive swelling of and protein adsorption on polymer brushes grafted onto 3D-nanostructures," *Anal. Bioanal. Chem.*, vol. 406, no. 28, pp. 7233–7242, 2014, doi: 10.1007/s00216-014-8154-4.

Aerolio juodosios anglies šaltinių kilmės nustatymas ir aerolio dalelių optinės savybės 2021-2022 m.

Agnė Minderytė, Lina Davulienė, Vadimas Dudoitis, Iwona Stachlewska, Steigvilė Byčėnienė

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

Juodoji anglis (angl., *black carbon* (BC)), susidaranti nepilno degimo sąlygomis degant bet kokius organinius medžiagų, pasižymi stipriausia šviesos sugertimi UV – IR bangų ruože [1] ir yra susijusi tiek su oro tarša, tiek su klimato kaita. Augantis iškastinio kuro ir biomasės kaip kietojo kuro naudojimas lemia didesnę BC, vieno stipriausių šiltnamio efektą skatinančių komponentų, koncentraciją aplinkos ore [2]. BC taršos šaltinių kilmės nustatymas yra kritiškai svarbus siekiant parengti išmetimų į aplinkos orą mažinimo planus, norint gerinti oro kokybę ir kontroliuoti poveikį visuomenės sveikatai bei atmosferos šiluminei pusiausvyrai. Taršos šaltinių kilmės indėlio įvertinimas leidžia nustatyti įvestų oro kokybės gerinimo priemonių veiksmingumą, kadangi yra svarbu žinoti ne tik bendrą aerolio juodosios anglies masės koncentracijos pokytį, tačiau ir suprasti skirtingos kilmės taršos šaltinių mažinimo efektyvumą.

Šio tyrimo metu buvo atlikti 13 mėn. (2021 m. birželio – 2022 m. birželio mėn.) tęstiniai BC masės koncentracijos matavimai foninį miesto taršos lygį atspindinčioje aplinkoje (Vilnius Air matavimų stotyje, FTMC). Nenutrūkstanti ilgalaikiai matavimai gali suteikti žinių apie BC masės koncentracijos dinamiką bei leidžia detalai ištirti taršos šaltinių indėlio kitimą įvairiais laikiniais skyros skerspjūviais skirtingų sezonų metu.

Atlikto tyrimo tikslas yra įvertinti aerolio juodosios anglies masės koncentracijos dinamiką ir taršos šaltinių kilmės indėlio pasiskirstymą bei nustatyti, kaip kinta aerolio dalelių optinės savybės vyraujant skirtingos kilmės taršos šaltiniams 2021 m. birželio – 2022 m. birželio mėn.

BC masės koncentracijos matavimui buvo naudojamas Aetalometras (AE33 Magee Scientific). Taršos šaltinių kilmės atskyrimas (angl., *source apportionment*) yra pagrįstas

skirtinga bangos ilgių sugertimi, kurią apibūdina sugerties Angstreimo eksponentė (AAE). BC šaltinių kilmės atskyrimui buvo pasirinktas „Aetalometro modelis“ [3], kuris naudojant Aetalometru išmatuotą šviesos silpumą ir AAE vertes, taršos šaltinius gali atskirti į du: iškastinio kuro deginimą (BC_{FF}) ir biomasės deginimą (BC_{BB}).

Aerolio dalelių šviesos sklaida buvo matuota 3 bangos ilgių integruojančiu Nefelometru. Remiantis šių dviejų prietaisų matuojamais parametrais, galima daugiau sužinoti apie aerolio dalelių charakteristikas (dydį, poveikį atmosferos šiluminei pusiausvyrai) vyraujant skirtingiems taršos šaltiniams.

Ilgalaikiai 24/7 valandiniai matavimai yra pirmasis tokio tipo darbas Lietuvoje, kuriame buvo surinkta 315400 rodmenų, jų pagrindu buvo gautos vidutinės BC valandos koncentracijos panaudotos apskaičiuojant vidutinį valandos, dienos, mėnesio, sezoninį ir metinį koncentracijų lygį miesto foninėje aplinkoje. BC masės koncentracijos valandinė eiga 2021 m. birželio 1 d. – 2022 m. gegužės 31 d. pateikta 1 paveiksle. Nustatyta, kad vidutinės BC masės koncentracijos skirtingais metų laikais kito nuo $0,55 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ vasarą iki $1,14 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ žiemą. Aukštas procentinis BC_{BB} indėlis vasaros laiku užregistruojamas dėl sumažėjusių transporto išmetimų į aplinkos orą, nors absoliučios BC_{BB} ir BC_{FF} vertės yra žemiausios lyginant su kitais sezonais. Vasaros sezonas pasižymi žemiausia absoliučia BC masės koncentracija, dėl ženklių sumažėjusių transporto išmetimų į aplinkos orą vasarą lyginant su kitais metų laikais.

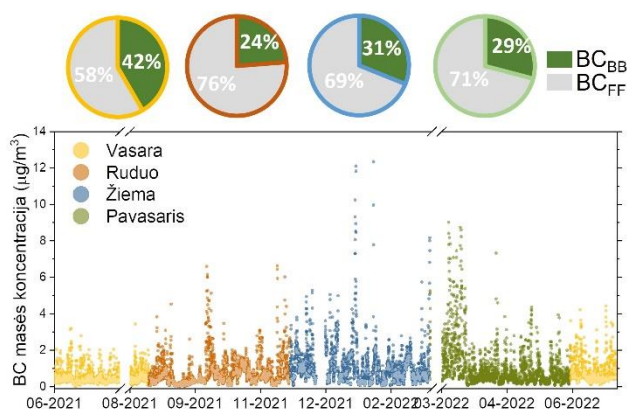
Šio tyrimo rezultatai praturtins žinias apie BC dinamiką bei taršos šaltinių kilmės indėlio kitimą bei poveikį aerolio juodosios anglies optinėms savybėms metų eigoje. Be to, šie rezultatai turi didelį poveikį visuomenei, nes yra tiesiogiai susiję su oro kokybe bei klimato kaita.

Literatūra

1. C. Wu, D. Wu, and J. Z. Yu, *Atmos. Chem. Phys.*, **18**, 1, (2018).
2. K. P. Wyche et al. *Atmos. Environ.*, **243**, 9, (2020).
3. J. Sandradewi, A. S. H. Prévôt, E. Weingartner, R. Schmidhauser, M. Gysel, and U. Baltensperger, *Atmos. Environ.*, **42**, 1, (2008).

Padėka

Finansavimas gautas iš bendro Lietuvos ir Lenkijos mokslinių tyrimų projekto DAINA-2 dotacijos „Biomasės degimo metu išmesto į aplinkos orą teršalų tolimosios pernašos svarba vietinio smogo susidarymui miesto aplinkoje“, remiamo Lenkijos nacionalinio mokslo centro (Narodowe Centrum Nauki) (projekto Nr. 2020/38/L/ST10/00480) ir Lietuvos mokslo tarybos (projekto Nr. S-LL-21-7).



1 pav. Vidutinės valandinės BC masės koncentracijos laikinė eiga 2021 m. birželio mėn. – 2022 m. birželio mėn.

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF MICROPLASTIC IN AQUEOUS ENVIRONMENT

Sonata Pleskytė*, Ieva Uogintė

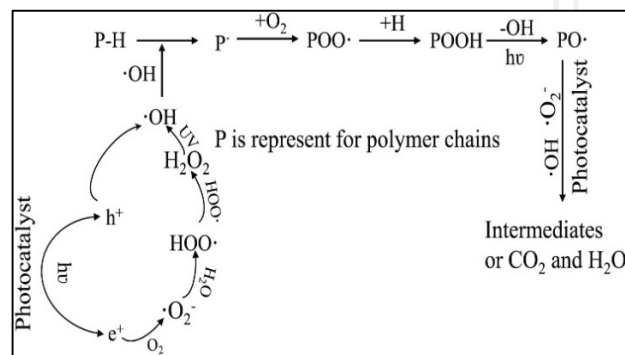
Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: sonata.pleskyte@ftmc.lt

Microplastics (MPs) pollution has become one of the most threatening environmental concerns today. MPs persist in the aquatic and terrestrial environments as well as in the atmosphere. The major part of microplastics contaminants are found in the marine environment and might cause adverse effects on organisms. Furthermore, microplastics easily enter the human body via the food chain due to their small size. Numerous studies have shown that MPs can seriously impair organism growth and reproduction and even cause death. Rapid expansion of plastic pollution requires new technologies and mechanisms for the degradation of plastics, especially microplastics.

Current microplastics degradation methods can be divided into photothermal degradation, ozone-induced degradation, catalytic degradation, and biodegradation methods [1]. Nonetheless, finding efficient methods for MPs fragmentation remains a huge challenge.

Photocatalytic degradation is considered one of the most promising methods for microplastics degradation. Solar or ultraviolet light (UV) radiation, as well as a combination of UV radiation and photocatalysts, are the most studied advanced oxidation processes. Photocatalytic degradation with UV radiation is widely applied for the decomposition of polymers. Photocatalytic degradation leads to photooxidative degradation which results in breaking polymers' bounds, producing free radicals, and reducing the molecular weight. The main mechanism of photocatalytic degradation is presented in fig. 1. UV light may change surface morphology, mechanical properties, density, and crystallinity [2]. Different reaction result occurs due to time intervals, UV rays wavelengths, MPs type, and additional substances. UV radiation and catalyst-based technologies have a high potential for microplastics removal and even widespread use. However, further research is necessary to make this technology applicable in water source cleaning and other environmental fields.

The principal aim of this study was to determine the optimal microplastics degradation conditions. In this research work, graphene oxide-based nanocomposites were synthesized and characterized by using XRD, EDX, and TEM techniques. Nanocomposites were used as catalysts in UV



1 pav. Microplastics photodegradation mechanisms [2].

light irradiated photodegradation process. Three main factors affecting the photocatalytic degradation of microplastics were analyzed and fully described:

- irradiation time;
- microplastic to catalyst ratio;
- aqueous environment pH.

UV light irradiation combined with nanotechnology is a promising energy and environmental protection technique.

Acknowledgment:

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. L. Zhenyan, T. Jin, T. Zou, L. Xu, B. Xi, J. He, L. Xiong, C. Tang, J. Peng, Y. Zhou, J. Fei. 2022. Current progress on plastic/microplastic degradation: Fact influences and mechanism, *Environmental Pollution*, 304 (July): 119159. DOI: 10.1016/j.envpol.2022.119159.
2. H. Du, Y. Xie, J. Wang. 2021. Microplastic degradation methods and corresponding degradation mechanism: Research status and future perspectives, *Journal of Hazardous Materials*, 418 (April): 126377. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2021.126377.

EVALUATION OF WORK-RELATED PERSONAL EXPOSURE TO AEROSOL PARTICLES

Kamilė Kandrotaitė^{1,2}, Lina Davulienė¹, Abdullah Khan¹, Sergej Šemčiuk¹, Agnė Minderytė¹, Mehri Davtala¹,
Vadimas Dudoitis¹, Ieva Uogintė¹, Martynas Skapas¹ and Steigvilė Byčėnienė¹

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

²Faculty of Physics, Vilnius University, Universiteto Str. 3, LT-01513 Vilnius
email: kamile.kandrotaitė@ftmc.lt

The studies of particulate matter (PM) in urban environment have become of increasing importance due to its adverse effects on human health and its radiative forcing role in climate change.

Personal exposure to PM during daily commuting between home and office (later referred to as sites FTMC1 and FTMC2) was assessed in the city of Vilnius. Driving routes were recorded on 17 and 18 March 2022, between 7:00 and 20:00 local time (LT), with a selection of points representing the employee's daily route through different environments. The fixed site and indoor measurements in the office room were performed at the FTMC1 site using aerodynamic particle sizer (APS, TSI 3321). The field experiment was performed with environmental monitoring sensor URAD Monitor A3, version 9, SC MAGNASCI SRL, Dumbravita, Romania. A general model for assessing the deposition dose DD of aerosol particle in the human respiratory tract was calculated:

$$DD = DF \times MV \times \sum_i (PM_i \times \Delta t_i) \quad (1)$$

where MV is the minute ventilation or airflow in the lung (m^3/min), PM_i is the particulate matter concentration during time step i , and Δt_i is the duration of time step i (min). The multiple path particle dosimetry model was applied to evaluate the deposition fraction DF during different time periods when the field experiments were carried out. Urban air pollution varies widely both spatially and temporally, and commuter exposure can vary substantially depending on the daily distance travelled between home and work. $PM_{2.5}$ concentrations measured on the road can exceed background levels by many times. Of the two analysed routes, the time of the day when drivers and passengers could be exposed to the maximum PM concentrations was the morning hours. Urban background $PM_{2.5}$ concentrations ranges from 5 to $10 \mu g/m^3$ during the morning and evening commutes (Figure 1).

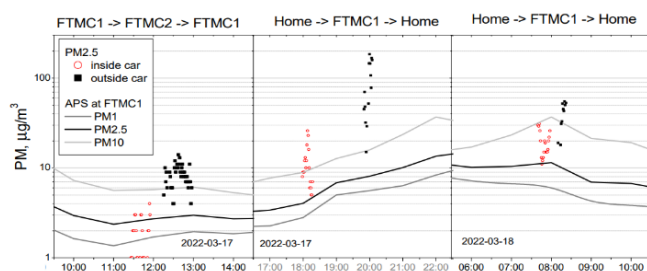


Figure 1. Timing of field experiments and $PM_{2.5}$ mass concentrations measured during each route inside (red circle) and outside (black rectangle) the vehicle, and mass concentration of PM_1 (grey line), $PM_{2.5}$ (black line), and PM_{10} (light grey line) at the urban background site located at FTMC1.

$PM_{2.5}$ concentrations at the road are above the 24 h limit value (WHO) during these measurement sessions. Compared to the PM mass concentration at the urban background station, the mean $PM_{2.5}$ concentration at the road reaches values of 4 to 10 times higher, and inside the vehicle it reaches values 2–3 times higher. Office PM concentrations are below the urban background concentration and the WHO limits for $PM_{2.5}$.

Due to its high toxicity, the smallest PM fraction, PM_1 , attracts the most attention and is an important subject of study. The PM_1 dominates in both environments, i.e., in the on-road vehicle and in the modern office, but mass concentrations differ significantly due to differences in infiltration. The minute deposition dose (MDD) for the driver is about 14 times higher for PM_1 (and PM_{10}) during the rush hour than in the office when the urban background concentration of $PM_{2.5}$ is up to $10 \mu g/m^3$ (Figure 2). During the low urban background concentration period, the in-vehicle PM concentration is underestimated, due to the limitations of the mobile measurement device used. During the workday, when driving takes less than 10% of the time considered (commuting plus working), PM_1 exposure during driving comprises about 80% of the PM_1 exposure caused by PM_1 concentration in the office.

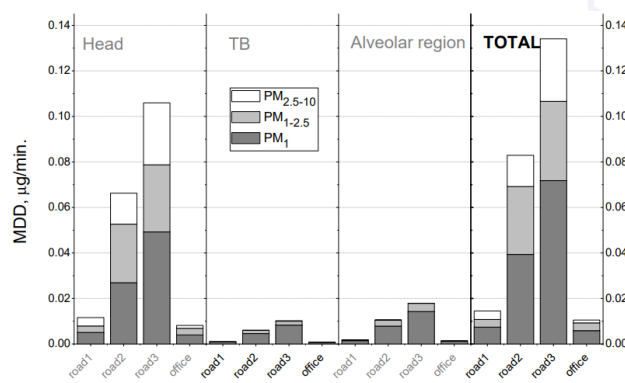


Figure 2. Contributions of PM fractions (PM_1 , $PM_{1-2.5}$, and $PM_{2.5-10}$) to total deposition dose calculated with the MPPD model for different routes (corresponds to cases presented in Figure 1) and for the modern office.

Acknowledgement

This research was funded by a grant (No. S-MIP-20-28) from the Research Council of Lithuania.

MAGNETITO DEKORAVIMAS AUKSO IR SIDABRO NANODALELĖMIS

Gytautė Sirgėdaitė¹, Lina Mikoliūnaitė^{1,2}

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

²Vilniaus Universitetas, Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Chemijos institutas,
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

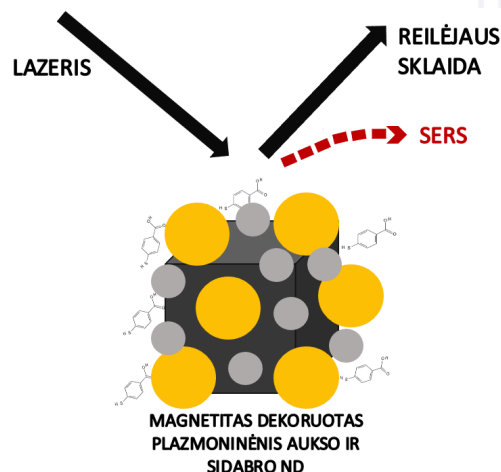
Paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos spektroskopija (SERS) – metodas, kuris naudoja plazmonų sukeltą Ramano signalo stiprinimą, siekiant aptikti įvairias molekules ir junginius, pavyzdžiui, baltymus ir kitas biomolekules [1]. Magnetinių ir tauriųjų metalų nanokompozitų naudojimas Ramano sklaidoje sustiprina analitės signalą tiek plazmoniniu efektu, tiek ir koncentruojant daleles magnetu.

Derinant magnetines Fe_3O_4 ir Au ar Ag nanodaleles sujungiami du skirtingi medžiagų mokslo pasauliai – magnetizmas ir fotonika nanomastelyje [1].

Dėl unikalų savybių ir plataus pritaikymo nanostruktūros, turinčios magnetinių ir plazmoninių savybių, pastarajame dešimtmetyje tapo aktualia mokslinių tyrimų tema. Šios struktūros susidaro dėl stiprios tauriųjų metalų ir magnetito tarpusavio sąveikos. Magneto-plazmoninės struktūros gali būti pritaikomos katalizės reakcijose, antibakteriniuose tyrimuose, biologinių medžiagų atskyrimui, o taip pat jos pasižymi puikiu SERS jautrumu [2].

Magneto-plazmoninės nanostruktūros gali būti gaunamos įvairiais būdais. Įprastai magnetinė medžiaga – geležis, geležies oksidas ar nikelis, yra kompozito šerdyje, o paviršius padengiamas plazmonine medžiaga, tačiau ir atvirkščias variantas (plazmoninė nanodalelė padengta geležies oksido sluoksniu) buvo pritaikytas SERS matavimams [3–5]. Ant magnetinės šerdies suformuotas plazmoninis sluoksnis gali būti tolygus, sudarytas iš mažesnių nanodalelių ar užaugintas iš netolygių, spygliuotų struktūrų [3, 6–7].

Šiame tyrime buvo susintetintos kubinės formos magnetinės Fe_3O_4 nanodalelės, kurių dydis ~50 nm ir pasižymėjo neigiamu zeta potencialu. Toliau buvo sintetinės skirtingų dydžių bei neigiamo zeta potencialo plazmoninės aukso ir sidabro nanodalelės (ND). Gautos sidabro ND ~13 nm, o aukso ND ~40 nm dydžio. Kad pagerinti



1 pav. SERS mechanizmas.

sąveiką tarp magnetinių geležies oksido dalelių ir plazmoninių aukso bei sidabro nanodalelių, susintetintų magnetinių nanodalelių paviršius buvo modifikuotas polietileniminu (PEI). Modifikavus magnetines daleles PEI, jų zeta potencialas tapo teigiamas. Fe_3O_4 nanodalelės toliau dekoruojamos aukso ir sidabro koloidais, naudojant skirtingas koloidų koncentracijas, skirtingą seką bei jų mišinius. Gauti nanokompozitai (1 pav.) buvo charakterizuojami rentgeno spindulių difrakcijos, UV-Vis ir Ramano spektroskopijos metodais. SERS stiprinimas, naudojant gautus nanokompozitus, buvo išbandytas kaip analizė pasirenkant merkaptobenzoinę rūgštį (MBA).

Literatūra

1. C. de Julián Fernández ir F. Pineider, Materials Science, 308, 107–136 (2021).
2. T.T. Nguyen, F. Mammeri, S. Ammar, Nanomaterials, 8 (3), 149 (2018).
3. M. Abbas, S. R. Torati, C. G. Kim, Nanoscale, 7, 12192–12204 (2015).
4. Z. Kanwal, M. A. Raza, S. Riaz, S. Manzoor, A. Tayyeb, I. Sajid, S. Naseem, R Soc Open Sci., 6 (5), 182135 (2019).
5. A. Michałowska, M. Żygieło, A. Kudelski, Appl. Surf. Sci., 562 (8), 250220 (2021).
6. S. S. Chen, H. Xu, H. J. Xu, G. J. Yu, X. L. Gong, Q. L. Fang, K. C. F. Leung, S. H. Xuan, Q. R. Xiong, Dalton Transactions, 44, 9140–9148 (2015).
7. P. Quaresma, I. Osório, G. Dória, P. A. Carvalho, A. Pereira, J. Langer, J. P. Araújo, I. Pastoriza-Santos, L. M. Liz-Marzán, R. Franco, P. v. Baptista, E. Pereira, RSC Adv., 4, 3659–3667 (2014).

THREE-DIMENSIONAL Au(NiMo)/Ti CATALYSTS FOR EFFICIENT HYDROGEN EVOLUTION REACTION

Sukomol Barua, Aldona Balčiūnaitė, Jūrate Vaičiūnienė,
Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus

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

In this study, gold-nickel-molybdenum 'Au(NiMo)' coatings have been studied as catalysts for hydrogen evolution reaction (HER). The catalysts have been deposited on a titanium surface using electroplating and galvanic displacement techniques. The electrocatalytic performance of those fabricated catalysts was investigated for HER by using Linear Sweep Voltammetry at different temperatures ranging from 25 up to 75 °C. Scanning electron microscopy and Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectroscopy were used for the characterization of catalysts morphology and composition. Moreover, the stability of prepared catalysts was evaluated by Chronoamperometric measurements. It was found that the Au(NiMo)/Ti-3 and NiMo/Ti-3 catalysts with the highest metal loadings demonstrate the lowest overpotential of 252 mV and 288 mV respectively for HER to reach the benchmark current density of 10 mA·cm⁻². The current densities for HER increase 1.1-2.7 times with an increase in temperature from 25 °C to 75 °C using the prepared 3D binary or ternary catalysts. The highest mass electrocatalytic activity of 1.53 mA·μg⁻¹ for HER has been achieved on the Au(NiMo)/Ti-1 coating with a metal loading of 23.9 μg_{metal}·cm⁻² at 25 °C.

Table 1. Composition of the electrochemical bath.

Catalysts	Concentration in mol·dm ⁻³	
	Ni ²⁺	Mo ⁶⁺
NiMo/Ti-1	0.1	0.03
NiMo/Ti-2	0.2	0.03
NiMo/Ti-3	1.0	0.03

Table 2. The metal loading in the catalysts as determined by ICP-OES analysis.

Catalyst	Ni loading (μg _{Ni} ·cm ⁻²)	Mo loadings (μg _{Mo} ·cm ⁻²)	Au loadings (μg _{Au} ·cm ⁻²)	Total metal loading (μg _{metal} ·cm ⁻²)
NiMo/Ti-1	23.43	4.9		28.3
NiMo/Ti-2	29.6	5.3		34.9
NiMo/Ti-3	99.5	6.7		106.2
Au(NiMo)/Ti-1	18.3	4.4	1.2	23.9
Au(NiMo)/Ti-2	25.4	4.6	1.7	31.7
Au(NiMo)/Ti-3	81.4	6.0	5.2	92.6

OSMOSINIO ŠOKO POVEIKIS ELEKTROPORUOTOMS *SACCHAROMYCES CEREVISIAE* LĄSTELĖMS

Greta Gančytė, Povilas Šimonis, Arūnas Stirke

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

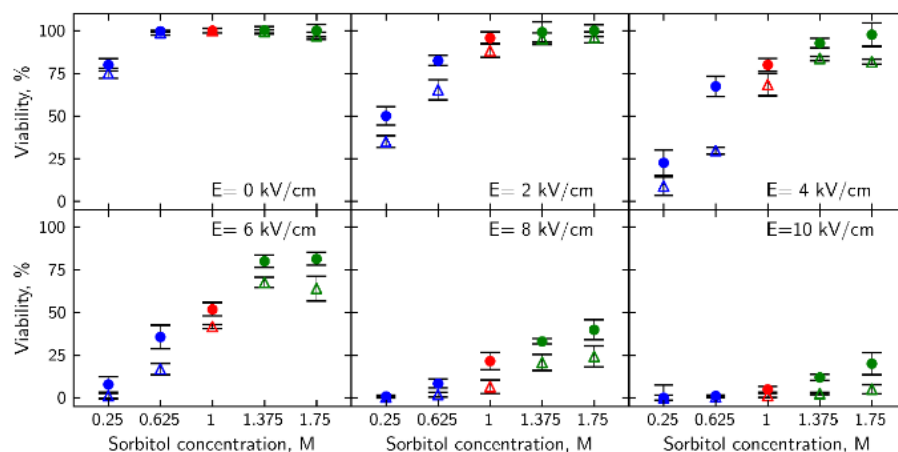
Saccharomyces cerevisiae yra vienaląsčiai eukariotiniai grybai [1]. Natūralioje mielių ląstelių aplinkoje osmosinis slėgis nebūna pastovus, ląstelės patiriančios osmotinį stresą, patiria tūrio ir formos pokyčius. Tūriui ir formai po osmosinio streso grąžinti mielės yra prisitaikiusios naudoti HOG (*angl.* high osmolarity glycerol) signalinį kelią [2]. Vienas iš abiotinių poveikių, susijusių su viduląstelių junginių praradimu ar užląstelinį medžiagų patekimu į ląstelę yra impulsinis elektrinis laukas (IEL) – fizikinis metodas, kurio metu ląstelės yra veikiamos trumpais įvairaus stiprio elektrinio lauko impulsais siekiant suformuoti poras membranoje ir padidinti jos pralaidumą. Šis reiškinys vadinamas elektroporacija [3]. Šiame darbe buvo tiriama staiga osmosinio slėgio pokyčio po IEL įtaka mielių ląstelių gyvybingumui, dydžiui, pralaidumui ir atsistatymui. Darbas atliktas su Y00000 (WT) ir Y02724 (Δhog) kamienais.

Buvo parodyta, kad ląstelių gyvybingumas priklauso nuo IEL poveikio ir mažėja stiprėjant elektriniam laukui. Pralaidumas ir ląstelių dydis po 2-10 kV/cm IEL poveikio didėja. Mielių inkubacija hiperosmosinėse sąlygose (1.75 M sorbitolio tirpale) po impulso poveikio padidina WT mielių gyvybingumą vidutiniškai 20,4 %, o Δhog ląstelių gyvybingumą vidutiniškai 33,2 %; WT mielių pralaidumą vidutiniškai 25 %, o Δhog ląstelių pralaidumą vidutiniškai 29.5 %. Ląstelių spindulys taip pat buvo sumažėjęs. Taip pat, membranos

atsistatymo laikas buvo sumažintas nuo 1 min iki 30 s WT mielėms ir 40 s Δhog Priešingą poveikį turėjo inkubacija hipoosmosinėse (0,25 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. 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 parodyta kad dalyvauja mielių ląstelių atsistatymo po IEL poveikio procese, nes ląstelės turinčios išveiklintą HOG geną yra jautresnės IEL poveikiui.

Literatūra:

1. M. Parapouli, A. Vasileiadis, A.-S. Afendra, 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. Ramana-vicius, S. Balevicius, "The link between yeast cell wall porosity and plasma membrane permeability after PEF treatment." Scientific reports vol. 9,1 14731, (2019).



1 pav. Laukinio tipo (WT) ir Δhog mielių ląstelių gyvybingumo priklausomybė nuo osmosinio šoko po skirtingo stiprio elektrinio lauko poveikio. Spalvomis atskirtas osmosinio šoko tipas: žalia spalva hipoosmosinis, raudona spalva be osmosinio šoko, mėlyna spalva hiperosmosinis; apskritimais pažymėtas WT gyvybingumas, trikampaiais - Δhog .

MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER-BASED BIOSENSORS FOR CANCER BIOMARKERS DETECTION

Greta Pilvenytė¹, Raimonda Bogužaitė¹, Vilma Ratautaitė^{1,2}, Arūnas Ramanavičius^{1,2}

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanotechnology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: greta.pilvenyte@ftmc.lt

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

Since cancer is a leading cause of human deaths worldwide accounting for nearly 10 million deaths in 2020 [1], biosensors could be used to detect these disorders using biomarkers at an early stage of pathogenesis. Thus, rapid and targeted treatment could increase patient survival. Biomarkers – biological molecules present in the blood, other body fluids or tissues that are a sign of a normal or abnormal process, condition or disease – are necessary for the rational development of medical technologies.

Electrochemical biosensors as devices designed of a transducer and recognition element to determine the presence of an analyte are applied in the detection of many biomarkers in complex biological fluids such as blood, saliva, urine, etc. [2]. Biosensors are used to solve some of the challenging medical tasks, such as designing sensors for drug monitoring or disease detection [3]. Numerous traditional immunoanalytical methods provide precise measurements of different analytes, however, most of these methods, including the enzyme-linked immunosorbent assay, depend on the use of expensive immune chemicals and/or lengthy analyte determination methodologies, as well as high-end tools, and are required to be operated by a specialist.

Molecularly imprinted polymers (MIPs) provide a wide range of possibilities for the development of biosensors including low-cost, easy preparation, advanced storage stability, quick read-out time, good specificity, and the possibility of clinical or point-of-care testing. Conducting polymers such as polypyrrole, poly(3,4-ethylenedioxythiophene), polytoluidine blue, etc. can be used in MIP-based biosensors to achieve higher sensitivity, short response time, and room temperature operations.

In this presentation reviewed MIP-based electrochemical biosensors can be used to detect various cancer biomarkers such as cancer antigen 15-3 (CA15-3) [4], human epidermal growth factor receptor 2 (HER-2) [5] and prostate-specific antigen (PSA) [6] (Fig.1). It could be a potential alternative to expensive and time-consuming laboratory tests.

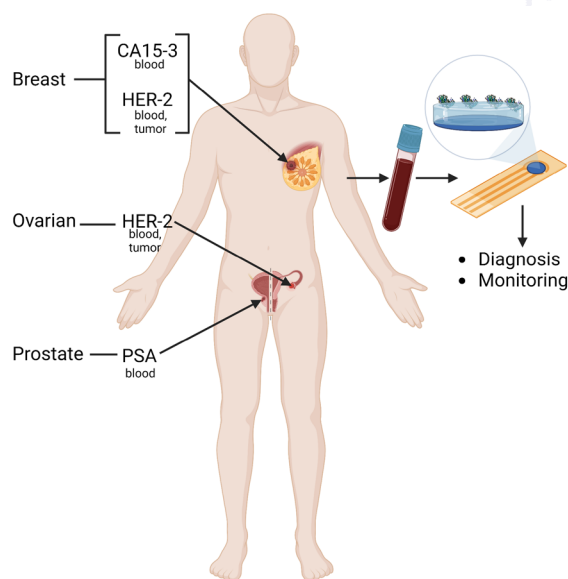


Fig. 1. Breast (CA15-3, HER-2), ovarian (HER-2) and prostate (PSA) cancer biomarkers for which electrochemical MIP-based biosensors are reviewed.

References

1. J. Ferlay, M. Colombet, I. Soerjomataram, D. M. Parkin, M. Piñeros, A. Znaor, F. Bray. Cancer statistics for the year 2020: An overview. *Int J Cancer*, 149:778-789 (2021).
2. S. Ramanavicius, Urte Samukaite-Bubniene, Vilma Ratautaitė, Mikhael Bechelany, Arunas Ramanavicius. Electrochemical molecularly imprinted polymer based sensors for pharmaceutical and biomedical applications (review). *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 215, 114739 (2022).
3. S. Ramanavicius, A. Jagminas, A. Ramanavicius. Advances in Molecularly Imprinted Polymers Based Affinity Sensors (Review). *Polymers* 13, 974 (2021).
4. J.A. Ribeiro, C.M. Pereira, A.F. Silva, M.G.F. Sales, Disposable electrochemical detection of breast cancer tumour marker CA 15-3 using poly(Toluidine Blue) as imprinted polymer receptor, *Biosensors and Bioelectronics*, 109, 246-254 (2018).
5. A.A. Lahcen, S. Rauf, A. Aljedaibi, J.I. de Oliveira Filho, T. Beduk, V. Mani, H.N. Alshareef, K.N. Salama, Laser-scribed graphene sensor based on gold nanostructures and molecularly imprinted polymers: Application for Her-2 cancer biomarker detection, *Sens. Actuat. B-Chem.*, 347, 130556 (2021).
6. Z. Yazdani, H. Yadegari, H. Heli, A molecularly imprinted electrochemical nanobiosensor for prostate specific antigen determination, *Analytical biochemistry*, 566, 116-125 (2019).

PLONŲ SLUOKSNIŲ FORMAVIMAS ANT 3D MIKROSTRUKTŪRŲ PAVIRŠIŲ NAUDOJANT ATOMINIŲ SLUOKSNIŲ NUSODINIMO TECHNOLOGIJĄ

Darija Astrauskytė¹, Karolis Galvanauskas², Darius Gailevičius², Mantas Drzdys¹,
Ramutis Drzdys¹, Mangirdas Malinauskas², Lina Grinevičiūtė¹

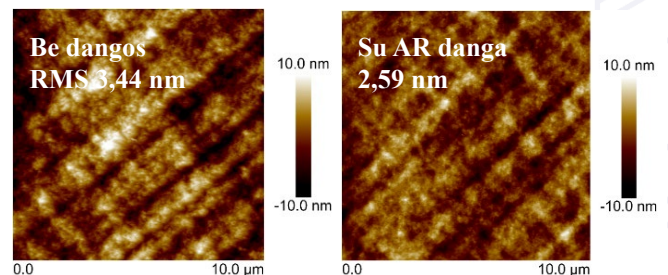
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: darija.astrauskyte@ftmc.lt

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

Tobulėjant mikrooptinių komponentų gamybos technologijoms yra keliami vis aukštesni reikalavimai optinėms dangoms [1, 2]. Vienas iš jų yra galimybė suformuoti optinę dangą ant itin sudėtingos formos mikrostruktūrų paviršių, kuriuos galima pagaminti netiesinės lazerinės 3D nanolitografijos būdu [3]. Tačiau tokiu atveju efektyvus pritaikymas įprastai optinių dangų formavimui naudojamų fizinio garų nusodinimo metodų yra komplikotas. Galima alternatyva yra atominių sluoksnių nusodinimo technologija (ALD – angl. k. *atomic layer deposition*), leidžianti suformuoti dangą ant 3D formos pagrindų. Šios technologijos principas yra atomo storio sluoksnio suformavimas vieno ALD ciklo metu vykstant pirmtakų reakcijoms su paviršiumi [4].

Šiame darbe buvo tiriama plonų sluoksnių, suformuotų naudojant ALD technologiją, įtaka mikrostruktūroms. Mikrodariniai buvo pagaminti iš hibridinio organinio–neorganinio polimero SZ2080™ tiesioginio lazerinio rašymo metodu [5]. Ant mikrostruktūrų buvo nusodinti ploni, maždaug 300 nm storio, aliuminio ir titano oksidų sluoksniai bei skaidrinanti (AR – angl. k. *anti-reflective*) danga, susidedanti iš TiO₂ ir Al₂O₃ sluoksnių, kurių storiai 28,8 nm ir 130 nm, atitinkamai. Siekiant išvengti temperatūrai jautraus hibridinio polimero modifikacijų, sluoksniai buvo nusodinami 60 °C temperatūroje. TiO₂ ir Al₂O₃ sluoksnių sintezei buvo naudojami tetrakisdimetilaminotitano ir trimetilaliuminio pirmtakai, atitinkamai. Oksidavimui buvo naudojama deguonies plazma. Mikrolęšių geometrijos pokyčiams įvertinti buvo naudojama optinė profilometrija. Mikrostruktūrų paviršiaus morfologija buvo nustatyta naudojant atominių jėgų mikroskopiją (AFM – angl. k. *atomic force microscopy*). Be to, siekiant nustatyti sluoksnių

optines charakteristikas visos dangos buvo nusodintos ant kvarcinių pagrindų. Plonų sluoksnių lūžio rodikliai ir nuostolių koeficientai buvo apskaičiuoti naudojant pralaidumo spektrus. Lęšio židinio nuotolis yra vienas iš svarbiausių parametru, todėl šio darbo metu buvo tiriama optinių dangų įtaka mikrolęšių geometrijai. Pirmoje lentelėje yra pateikti Al₂O₃ ir TiO₂ sluoksnių bei AR dangos sukelti mikrolęšių židinio nuotolio pokyčiai (Δf). Kaip matome, mikrolęšių židinio nuotolis padidėja ant jų nusodinus TiO₂ sluoksnį arba skaidrinančią dangą. Al₂O₃ sluoksnio nusodinimas sukelia priešingą efektą – mikrolęšių židinio nuotolis sumažėja. Taip pat atlikus AFM matavimus buvo pastebėta, jog po kiekvienos iš dangų suformavimo mikrostruktūrų paviršiaus šiurkštumas sumažėja (1 pav.)



1 pav. Mikrostruktūrų paviršiaus morfologija prieš AR dangos nusodinimą ir po to.

Šie rezultatai yra reikšmingi, nes parodo, jog skirtingos dangos nevienodai keičia mikrodarinių geometriją. Naudojant tokias dangas praktikoje, yra svarbu atsižvelgti į dangų sukeltas deformacijas ir mikrooptinių elementų gamybos etape įvesti reikalingas geometrijos korekcijas, priklausomai nuo to, kokią dangą yra planuojama ant mikrolęšių nusodinti.

Literatūra

1. D. Gonzalez-Hernandez et al., Photonics 8(12), 577 (2021).
2. S. Ristok et al., Opt. Mater. Express 12(5), 2063 (2022).
3. D.-G. Hernandez et al. Adv. Opt. Mater. in press (2022).
4. M. Ritala et al., RCS, 9-11 (2009).
5. A. Ovsianikov et al., ACS Nano 2.11 (2008).

1 lentelė. Mikrolęšių židinio nuotolio pokyčiai.

Danga	Dangos storis, nm	Δf , %
TiO ₂	301	7
Al ₂ O ₃	302	-8
AR danga	153,8	2,5

SPUTTERED SILVER FILM GROWTH INVESTIGATION

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

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technology
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

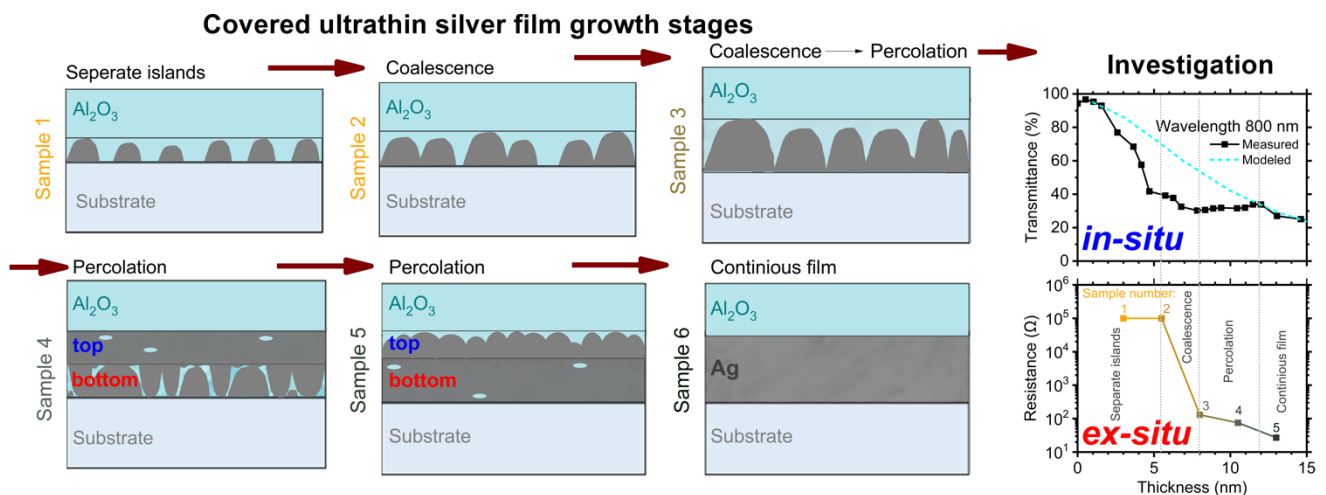


Fig. 1. Schematic of the coating model. Sample 1 – initial seeds; Samples 2 and 3 merging of seeds into bigger particles. Sample 4 – initial percolation as formation of a denser top sub-layer; Sample 5 – percolation proceeds as densification of the bottom sub-layer. The bilayer describing silver film 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.

ALD PROCESŲ STEBĖJIMAS IR OPTIMIZAVIMAS NAUDOJANT OPTINĖS EMISIJOS SPEKTROSKOPIJĄ

Mantas Drazdys¹, Darija Astrauskytė¹, Ramutis Drazdys¹, Martynas Audronis²

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

²Nova Fabrica Ltd., Laisvės g. 44, LT-30106 Ignalina

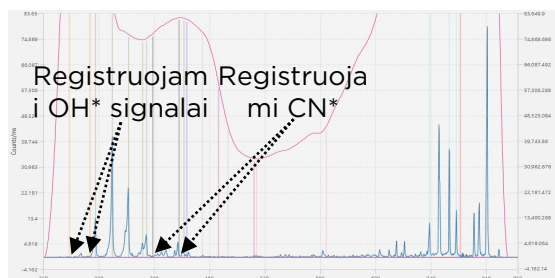
Fizinio garų nusodinimo (PVD – angl. k. *physical vapor deposition*) technologijos buvo ir yra vienas pagrindinių įrankių, labai reikalingų optinių komponentų, naudojamų lazeriuose ir lazerinėse sistemose gamybai. Tačiau tobulėjant lazerinėms technologijoms atsiranda poreikis tokių komponentų, kurių gamyba PVD technologijomis, dėl technologinių suvaržymų, neužtikrina reikalaujamų dangos charakteristikų viso dengiamo komponento paviršiuje. Tai dažniausiai yra sudėtingos formos pagrindai, tokie 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 dielektrinius sluoksnius ALD metodu, padėklai cikliškai paveikiami dujiniais pirmtakais. Toks cikliškas procesas užtikrina, jog pirmtakų reakcijos nevyksta dujų fazėje, todėl reakcijos vyksta tik ant paviršių. Šios paviršinės reakcijos leidžia kontroliuoti nusodinamos plėvelės storį angstromo tikslumu [1].

Siekiant geriau suprasti ALD metu vykstančius procesus bei reakcijos mechanizmus nuolat ieškoma naujų būdų kaip juos stebėti. Vienas iš tokių metodų yra optinės emisijos spektroskopija (OES). OES metu registruojama elektroniskai sužadintų liekamųjų dujų optinė emisija. Tačiau, šiuo metu plačiausiai naudojama OES – ALD konfigūracija leidžia stebėti tik plazminio ALD plazmos veikimo žingsnį, todėl negaunama informacijos apie pirmtakų impulsų bei reaktoriaus prasiurbimų metu vykstančius procesus [2].

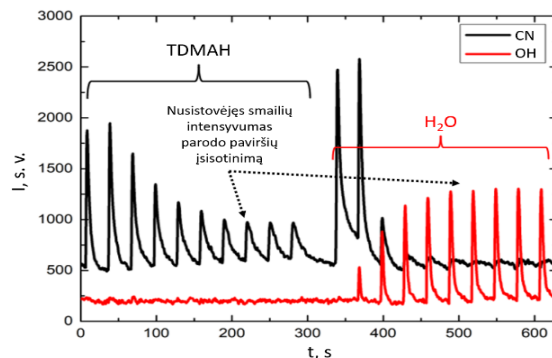
Šiame darbe ALD proceso stebėjimui ir optimizavimui buvo naudojama asmeninės-plazmos optinės emisijos spektroskopija (SPEOS – angl. k. *self-plasma optical emission spectroscopy*). Buvo analizuojami hafnio ir titano oksidų nusodinimai, naudojant metalorganinius pirmtakus ir vandenį. Nusodinimai buvo atliekami 150°C naudojant N₂ kaip nešančiąsias bei prasiurbimo dujas. ALD ciklas susidėjo iš keturių dalių: 1) metalorganinio pirmtako impulsas, 2) prasiurbimas, 3) vandens impulsas, 4) prasiurbimas. Atsižvelgiant į SPEOS rezultatus ir siekiant rasti optimalią vertę, prasiurbimo trukmės buvo keičiamos 2 -120 s ribose.

Nusodinimų metu naudojant SPOES buvo registruojami du signalai (1 pav.). Registruojamas CN* signalas parodo, jog reaktoriuje yra nesureagavusio pirmtako ir / arba reakcijos produkto. OH* signalas parodo, kad reaktoriuje yra vandens. Nusodinimų metu, greta SPOES buvo naudojamos kvarcinio kristalo mikrosvarstyklės (QCM – angl. k. *quartz crystal microbalance*) sluoksnių augimo stebėjimui.



1 pav. Standartinis spektras užregistruotas nusodinimo metu naudojant SPOES.

Atvaizdavus šių signalų intensyvumo priklausomybę nuo laiko (2 pav.), SPOES metodas leido tiksliau įvertinti paviršių įsisotinimo pirmtakais tendencijas. Taip pat, priešingai nei QCM, SPOES leido stebėti pirmtakų pertekliaus bei reakcijos produkto pašalinimo iš reaktoriaus laiką. Optimizavus HfO₂ nusodinimo procesą SPOES metodu buvo pasiektas 1,9% sluoksnio storio tolygumas reaktoriaus plote.



2 pav. CN* ir OH* signalų priklausomybė nuo laiko daugiapulsinio HfO₂ nusodinimo metu, naudojant TDMAH ir vandenį.

Literatūra

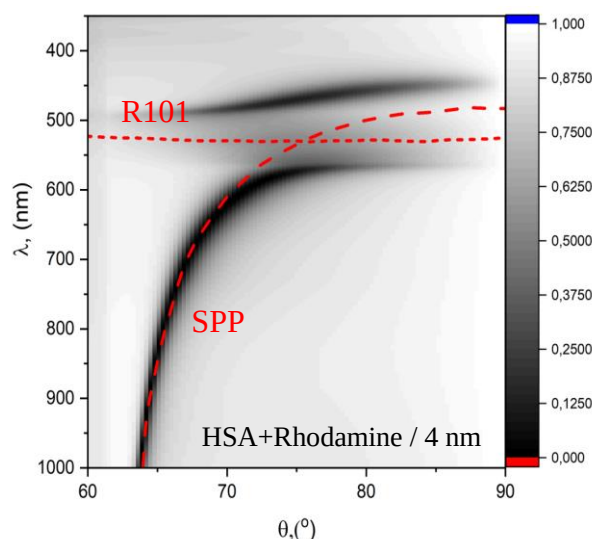
1. S. M. George, Chem. Rev. **110**, 111-131 (2010).
2. A. J. M. Mackus, S. B. S. Heil, E. Langereis, H. C. M. Knoop, M. C. M. van de Sanden, W. M. M. Kessels, J. Vac. Sci. Technol. A, **28**, 77 (2010).

Modelling of strong coupling between surface plasmon polaritons and protein-dye complex exciton of HSA antibody labeled with Rhodamine101 dye

Povilas Jurkšaitis¹, Zigmas Balevičius¹

¹Plasmonics and Nanophotonics Lab., Department of Laser Technologies, Center for Physical Sciences and Technology,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: povilas.jurksaitis@ftmc.lt

Strong coupling regime has gained a lot of attention in these past several years. Coupling between different optical and material excitations, opens new possibilities for chemical reaction rate[1], advanced biosensors[2,3], plasmonic nanolasers[4], quantum information processing[5]. The fundamental problem of dye exciton is attributed to photobleaching, however latest experiments[6] on the polymeric layers with organic dyes and metal nanostructures have shown that this phenomenon could be minimized with the help of strong coupling effect. Light – matter strong coupling occurs when two interacting oscillators exchange their energy faster than the dissipation rate of the system. Such newly formed system introduces new eigenstates and the energy gap between new states is known as Rabi energy. Modelling of strong coupling regime between the surface plasmons polaritons induced in Ag/Au films and excitons in protein-dye complex of HSA (Human Serum Albumin) antibody labelled with Rhodamine101 has been performed. The model consists of 45 nm Au/Ag layer and HSA antibody labelled with Rhodamine101 dye on top of BK7 glass prism (Kretschmann configuration). Thickness of HSA + Rhodamine101 was varied between 4 – 16 nm (which is typical dimensions of the HSA protein) in order to evaluate the coupling strength dependence on the thickness of labelled antibody. The obtained dispersion relation have shown the anti-crossing effect at 531 nm wavelength compared with single dispersion lines (Fig.1)



1 Fig. Surface plasmon polariton and labelled antibody exciton dispersion relations for coupled

(dark lines) and uncoupled system (red lines).

Total internal reflection configuration has been used to determine optical response of modelled system. Difference between incident and refracted light were evaluated by changes in polarization for s- and p- polarized light. Modelled absorption spectra showed clear indications of Rabi splitting for p-polarized light at anti-crossing point, suggesting the system is in strong coupling regime. Calculations for different angles of incidence showed altered dispersion relations for coupled light-matter interaction as compared to uncoupled. Bending of dispersion curves implies that plasmo-exciton system is in strong coupling and formed new polaritonic mode. Modelling of such systems showed potential possibilities of achieving strong coupling between plasmonic excitations in metals and labelled antibodies. Furthermore coupling strength can be altered using different thickness of labelled antibodies allowing for better control and minimization of photobleaching effect. Such advanced biosensing combines label free and labelled optical methods in one hybrid application which allows to control the chemical reactions rate in photosensitive molecules through the strength of strong coupling regime. Different modelled protein-dye film thicknesses have shown that by manipulating the structure and number of the protein-dye complexes in the vicinity of the plasmon mode volume the properties of coupled states can be controlled by the strength of strong coupling.

Literatūra / References

- [1] J. Flick, N. Rivera, and P. Narang, *Nanophotonics* **7**, 1479 (2018).
- [2] A. Lishchuk, C. Vasilev, M. P. Johnson, C. N. Hunter, P. Törmä, and G. J. Leggett, *Faraday Discuss.* **216**, 57 (2019).
- [3] E. Buzavaite-Verteliene, I. Plikusiene, T. Tolenis, A. Valavicius, J. Anulyte, A. Ramanavicius, and Z. Balevicius, *Opt. Express* **28**, 29033 (2020).
- [4] P. Berini and I. De Leon, *Nat. Photonics* **6**, 16 (2012).
- [5] K. Hennessy, A. Badolato, M. Winger, D. Gerace, M. Atatüre, S. Gulde, S. Fält, E. L. Hu, and A. Imamoglu, *Nature* **445**, 896 (2007).
- [6] B. Munkhbat, M. Wersäll, D. G. Baranov, T. J. Antosiewicz, and T. Shegai, *Sci. Adv.* **4**, eaas9552 (2018).

GRAPHENE TRANSFER USING A LAMINATOR FOR REMOTE EPITAXY OF NITRIDES

Dominykas Augulis¹, Kazimieras Badokas¹, Arūnas Kadys¹, Ilja Ignatjev^{1,2},
Jūras Mickevičius¹ and Tadas Malinauskas¹

¹Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Vilnius LT-10257, Lithuania
augulis.dominykas@gmail.com

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

Remote epitaxy is an arising single-crystalline and free-standing thin film growth technique. This growth method adds advantages to regular epitaxy. The remote epitaxy uses two-dimensional (2D) material as an interlayer between the substrate and epilayer. Van der Waals (vdW) materials like graphene must be used as an interlayer. Thus, only weak vdW forces between the growing epilayer and substrate are dominant [1]. Such a weak interaction allows grown film exfoliation [2]. Furthermore, it neglects regular heteroepitaxy difficulties - thermal expansion and lattices constant matching conditions between epilayer and substrate. This improvement gives the upper hand in the wider selection of cost-effective growth substrates. Recently, remote epitaxy was proposed as a new thin film transfer, flexible membrane fabrication method. The huge advantage is that substrate below 2D material interacts with the layers growing during the epitaxy and enables high-quality growth through interlayer [1].

In the remote epitaxy process, the vdW material growth or transfer on a bulk substrate plays an important role because it defines the bonding forces of an epilayer. Through defects of vdW material, ionic or covalent bonds can form. These bonds complicate layer release and induce strain. In this work, we tested and optimized graphene transfer using a laminator. The laminator transfer method promises one of the most cost-effective ways to transfer graphene. It utilizes the commercially available and dissolvable in-water polyvinyl alcohol polymer foil as a carrier substrate for graphene and commercial hot-roll office laminator. The cleaning procedure of carrier foil after the transfer was optimized as the plastic residue was seen with an optical microscope. Several other graphene transfer methods also were performed in comparison. The quality of transferred graphene was investigated with Raman spectroscopy (Fig. 1) and scanning electron microscopy. Afterward, samples with graphene were used in the epitaxial growth of gallium nitride (GaN).

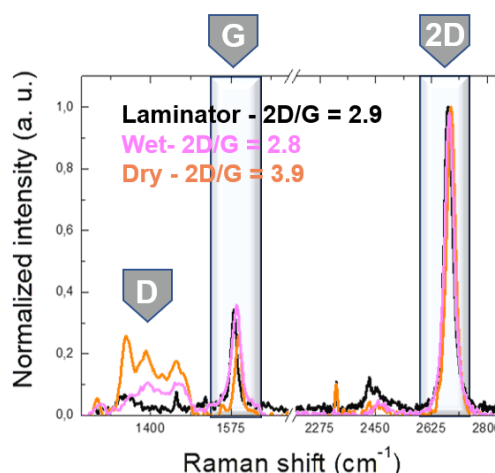


Fig. 1. Raman spectra of graphene after wet, dry and using laminator transfer.

Metalorganic vapor-phase epitaxy of GaN was performed on graphene/GaN/sapphire substrates. GaN below the graphene modulated GaN epilayer crystal orientation - provided remote effect. The difficult part is preventing graphene degradation and etching during high-temperature GaN growth. Graphene can be damaged due to the decomposition of substrate or aggressive carrier gases [3]. A two-step growth method with low-temperature island growth and high-temperature coalescence was used to prevent damage. We managed to grow as good quality GaN on graphene transferred using a laminator as grown directly on sapphire. GaN epilayer quality was evaluated by x-ray diffraction.

References

1. H. Kim et al., Remote epitaxy, *Nature Reviews Methods Primers*, 2, 40 (2022).
2. K. Badokas et al., MOVPE Growth of GaN via Graphene Layers on GaN/Sapphire Templates, *Nanomaterials*, 12, 785, (2022).
3. Y. Qu et al., Long-Range Orbital Hybridization in Remote Epitaxy: The Nucleation Mechanism of GaN on Different Substrates via Single-Layer Graphene, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 14(1), pp. 2263-2274, (2022)

SCALING OF EMPIRICAL COMPARTMENTAL DISTRIBUTIONS

Justas Kvedaravičius¹, Aleksejus Kononovicius²

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania
Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius, email.: justas.kvedaravicius@ff.stud.vu.lt

²Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius.

Sociophysics is a physical approach to modeling social phenomena. Yet at times there is a lack of comparison between theoretical models and empirical (observed) data [1, 2]. To enable comparison some authors explicitly include space (geography) in their models [1, 3].

This research analyzes changes in empirical compartmental distributions and spin-lattice systems by rescaling the data. Here we consider empirical data from United Kingdom 2011 census. Further comparison is done against Ising and noisy voter models.

Firstly, a randomized spatial model is proposed to assess the nature of observed distributions of empirical compartments (distinct territorial units). Model takes empirical compartments from the finest scale and combines them randomly to replicate compartments of a coarser scale. Some diversity measures (e.g., standard deviation) are chosen for which relative changes in their values are calculated. It is shown that results produced by the proposed model follow the inverse square root law. However relative changes in the diversity measures for the empirical data differ from the theory thus suggesting existence of spatial structures.

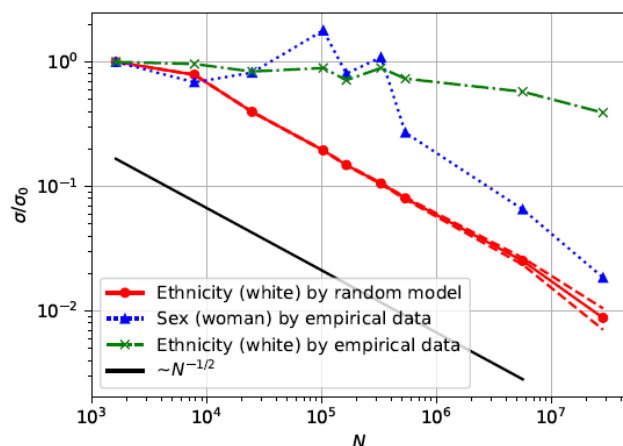


Figure 1. Relative changes of the standard deviation of chosen demographic indicators. Horizontal axis entails mean population in a compartment for the chosen scale.

Other considered diversity measures exhibit different power laws. For example, relative changes in Theil index (which is a case of generalized entropy) follow inverse linear law.

Building on the qualitative description of spatial structures a new measure is introduced for quantitative description. A numerical diversity index (I) is developed to describe certain configurations of spin-lattice models. These states are

namely ferromagnetic, anti-ferromagnetic or random configuration. The latter is an instance of already proposed random model and is an intermediate between the other two.

Diversity index values are calculated for spin models at thermal equilibrium. Metropolis and Kawasaki dynamics are employed for simulation of Ising model as well as noisy voter model. Index values were evaluated for the empirical data to ascertain the demographics exhibiting recognizable spatial structures.

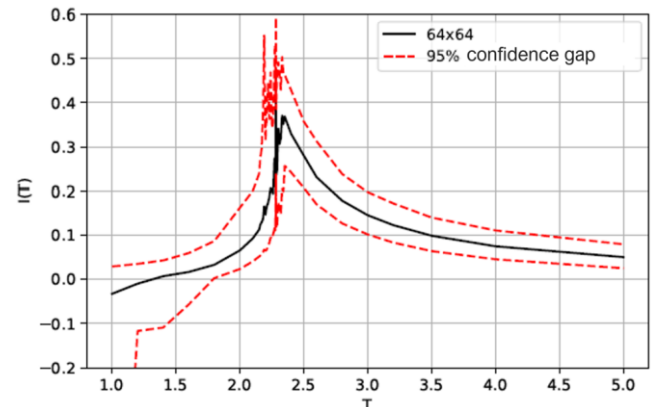


Figure 2. Diversity index values for Metropolis dynamics at equilibrium. Solid line shows index median value, dashed line shows 95% confidence gap. Critical temperature point is approximately at 2.269.

Proposed index I excelled at capturing spatial structure for Metropolis dynamics at critical temperature. However, it failed to capture polarization at low temperature values. Noisy voter model showed logarithmic dependence for values of index in terms of noise probability. For Kawasaki dynamics proposed index obtained biggest values at phase coexistence state. Results produced by Kawasaki dynamics were by far more comparable to the values for empirical data thus indicating better fit to model demographic phenomenon.

References

1. J. Fernandez-Gracia, K. Suchecki, J. J. Ramasco, M. Miguel, V. Eguiluz, *Is the voter model a model for voters?*, Physical Review Letters 112, 158701 (2014).
2. A. F. Peralta, J. Kertész, G. Iñiguez, *Opinion dynamics in social networks: From models to data.*, 2022.
3. A. Kononovicius, *Compartmental voter model*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2019, 103402 (2019).

PAVIENIAIS FEMTOSEKUNDINIO LAZERIO IMPULSAIS SUFORMUOTI PERIODINIAI AUKSO MIKROGUMBELIAI, ŽADINANTYS HIBRIDINĘ PLAZMONINĘ MODĄ

Kernius Vilkevičius, Evaldas Stankevičius

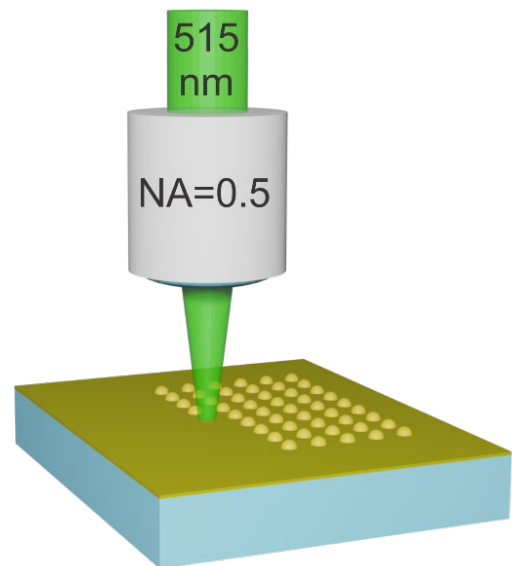
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: kernius.vilkevicius@ftmc.lt

Tauriųjų metalų mikro- ir nanodariniai plačiai tyrinėjami dėl jų sąveikos su šviesa ir plazmoninių savybių atsiradimo. Paveikus pavienes nanodaleles elektromagnetine spinduliuote, sužadunami laisvųjų elektronų svyravimai – lokalizuoti paviršiniai plazmonai (LPP). Suformavus tokių darinių periodinę gardelę, nuo jos difragavusi spinduliuotė sąveikauja su atskiruose dariniuose pasireiškiančiais LPP ir sužadina hibridinius plazmonus, pasižymintčius paviršiniu gardelės rezonansu (PGR) [1]. Šis hibridinis rezonansas yra itin siauras, didelio kokybės faktoriaus bei pasižymi dispersinėmis savybėmis.

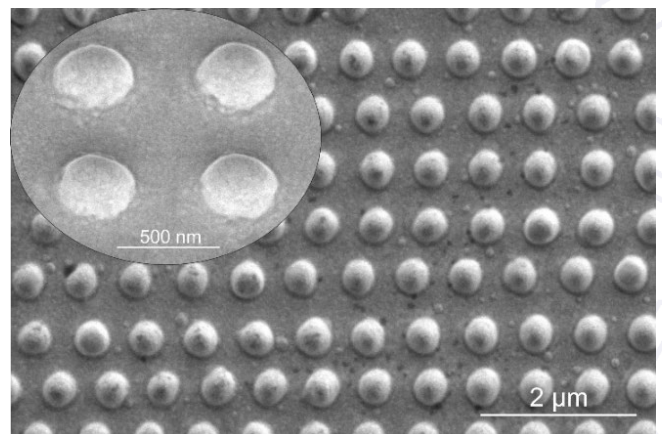
Dažnai periodinės darinių gardelės formuojamos elektronų pluošto arba koloidine litografija, tačiau šie metodai yra arba brangūs ir reikalaujantys daug laiko sąnaudų, arba jais sudėtinga pasiekti vienodų darinių formaciją. Alternatyvus metodas periodinėms gardelės suformuoti yra tiesioginis lazerinis rašymas (TLR), kai metalo paviršius tiesiogiai paveikiamas sufokusuotu lazerio pluoštu [2]. Naudojant vieną lazerio impulsą, suformuojami auksiniai mikrodariniai, kurių morfologija stipriai priklauso nuo impulso energijos [3]. Naudojant nedideles energijas, modifikavus sluoksnį susiformuoja nedideli gumbeliai.

Tyrimo metu buvo tiriamas aukso mikrogumbelių formavimasis bei plazmoninių savybių priklausomybė nuo formavimo periodo. Dariniai buvo gaminami TLR metodu, naudojant aštriai sufokusuotą 515 nm bangos ilgio lazerinę spinduliuotę (1 pav.), keičiant gardelės periodą. Plazmoninių savybių nustatymui buvo matuojami atspindžio spektrai.

Nustatyta, jog gardelės sužadina hibridinį rezonansą, kuris pasižymi siaurais spektrais tiek *s*-, tiek *p*-polarizacijoje, kuriose rezonansų vietos spektre skiriasi (2 pav.). Rezonansinis bangos ilgis gali būti keičiamas tiek keičiant spinduliuotės kritimo į gardelę kampą, tiek masyvo periodą. Suformuotos gardelės rezonansinis bangos ilgis gali būti apskaičiuojamas ir teoriškai, pasinaudojant vienmatės difrakcinės gardelės formule. Mikrodarinių masyvai, žadinantys hibridines plazmonines modas, gali būti naudojami bežymeniuose biologiniuose jutikliuose, pritaikomi netiesinėje optikoje bei lazeriavimui [4].



1 pav. Aukso mikrodarinių formavimas TLR metodu, naudojant 515 nm bangos ilgį.



2 pav. Aukso mikrogumbelių masyvas.

Literatūra

1. V.G. Kravets, A. V. Kabashin, W. L. Barnes, A. N. Grigorenko, Chem. Rev. **118**, 5912-5951 (2018).
2. E. Stankevičius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, Z. Balevičius. Adv. Opt. Mater. **9**, 2100027 (2021).
3. D. Pavlov, S. Syubaev, A. Kuchmizhak, S. Gurbatov, O. Vitrik, E. Modin, S. Kudryashov, X. Wang, S. Juodkazis, M. Lapine, Appl. Surf. Sci. **469**, 514-520 (2019).
4. A.D. Utyushev, V. I. Zakomirnyi, I. L. Rasskazov, Rev. Phys. **6**, 100051 (2021).

TIESIOGINIS LAZERINIS RAŠYMAS DIDELIO MASTELIO SIDABRO MIKRO-GUMBELIŲ MASYVO FORMAVIMUI

Rodrigas Liudvinavičius, Evaldas Stankevičius

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

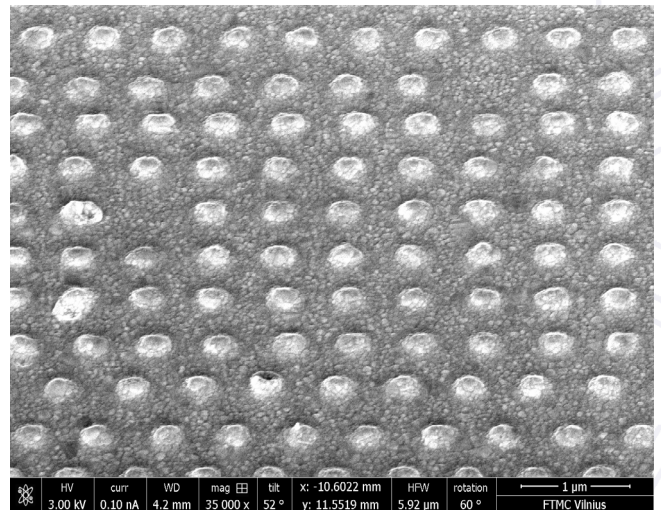
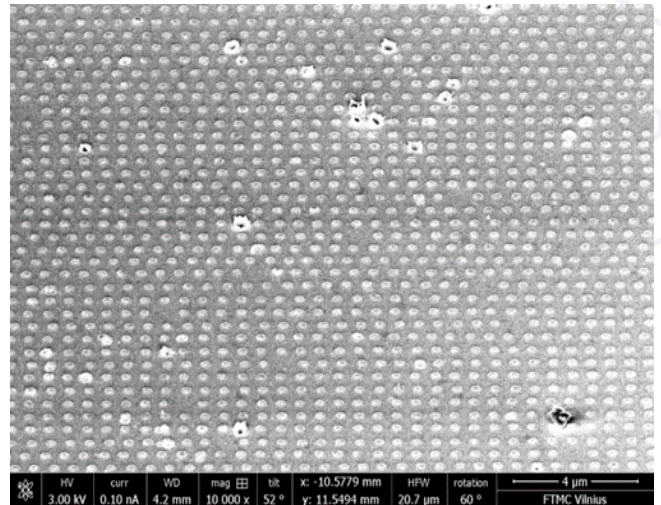
Metalo nanodalelės plačiai pritaikomos dėl jų sąveikos su šviesa, vadinama plazmonika, kuri kelia didžiulį susidomėjimą daugelyje tyrimų sričių, kadangi naujausi optiniai prietaisai yra paremti šia sąveika paviršiaus plazmonų polaritonais (SPP). SPP yra kolektyviniai krūvio svyravimai, susieti su išoriniu elektromagnetiniu lauku ir sklindantys išilgai metalo ir dielektriko sandūros [1]. Tačiau norint sėkmingai pritaikyti šio sąveikos ir metodo privalumus, nauji tyrimai yra būtini, ypač su tokia medžiaga kaip sidabras. Šiame tyrime SPP efektas pasiekiamas naudojant difrakcijos reiškinį [2], kai periodiškai išdėstytos metalo nanodalelės veikia kaip difrakcinė gardelė, kurioje krintanti spinduliuotė sužadina plazmonų rezonansus. Plazmonų sužadinimo atveju, juos žadinantys fotonai sugeriami ir pasireiškia konkretaus bangos ilgio ar tam tikro spinduliuotės kritimo kampo sugertis. Toks difrakcinės gardelės panaudojimas yra pagrįstas teorija, jog SPP bangos plokščiame nestruktūrizuotame paviršiuje negali būti sužadintos tiesiogiai kritusia šviesa dėl impulso skirtumų – laisvo fotono impulso dydis mažesnis nei paviršiaus plazmonų polaritono.

Tyrimo metu ant plono 50 nm storio sidabro sluoksnio tiesioginio lazerinio rašymo būdu, naudojant 1,1 nJ lazerio impulsus, buvo suformuotos sidabro mikrogumbelių gardelės. Gautos gardelės buvo ištirtos naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM) ir spektrofotometrą.

Išanalizavus rezultatus buvo pastebėta, jog paviršiaus plazmonų rezonansas (SPR) priklauso nuo gardelių periodo, šviesos poliarizacijos, šviesos kritimo kampo ir bandinio pasukimo kampo. Geriausi rezultatai (giliausios ir siauriausios smailės) buvo gauti matuojant darinius su lygiagrečiai orientuotomis skenavimo linijomis bei naudojant s-polarizaciją. Tokie eksperimentiniai pastebėjimai gerai sutampa su teoriniais įvertinimais. Gumbelių periodiškumas pademonstravo stiprią priklausomybę, kadangi naudojant mažesnę periodą buvo pasiektos siauresnės ir gilesnės SPP smailės.

Žinant jog sidabras oksiduojanti medžiaga, buvo atliktas papildomas oksidacijos įtakos rezultatams tyrimas. Matavimai buvo pakartoti po mėnesio. Buvo nustatyta, jog rezonanso gylis sumažėjo

beveik du kartus. Dėl šios priežasties, buvo pasiūlytas oksidacijos poveikio eliminavimo būdas.



1 pav. Sidabro mikrogumbelių masyvo plonoje sidabro dangoje (50 nm) SEM mikrografija. Nuotraukos atliktos esant 52° bandinio pasukimo kampui. Kiekvienas mikrogumbelis buvo pagamintas naudojant pavienį 1,1 nJ energijos lazerinį impulsą.

Literatūra

1. S. T. Koev, A. Agrawal, H. J. Lezec, V. A. Aksyuk, An Efficient Large-Area Grating Coupler for Surface Plasmon Polaritons, *Plasmonics*, 7, 269-277, 2012.
2. V. G. Kravets, F. Schedin, A. N. Grigorenko, Extremely Narrow Plasmon Resonances Based on Diffraction Coupling of Localized Plasmons in Arrays of Metallic Nanoparticles, *Phys. Rev. Lett.* 101, 087403, 2008.

MECHANICAL PROPERTIES OF SELECTIVE LASER SINTERED ALLOYS FOR AEROSPACE APPLICATIONS

Karolis Stravinskas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technologies
Savanoriu av. 231, LT-02300 Vilnius, email: karolis.stravinskas@ftmc.lt

Selective Laser Solidification (SLS) is one of the most rapidly advancing manufacturing technologies based on the added production of layer forming techniques. The use of metal particles in the 3D printing process makes it possible to produce parts with mechanical properties superior to those of traditional industrial products. Alloys made from titanium-based powders are widely used in aerospace applications due to their lightness, corrosion resistance and mechanical properties, but the cost of these powders is considerably higher than that of iron or aluminium-based powders[1]. It is therefore necessary to investigate which manufacturers' powders are of the best quality and worthy of use in production. In this work, two grades (G23 and G5) and four manufacturers of Ti-6Al-4V powders have been investigated for their chemical composition, morphology and particle size distribution. 3D printing using SLS technology was carried out and the characteristics of the alloys were evaluated. Based on the results obtained, the most suitable powders for SLS printing were selected.

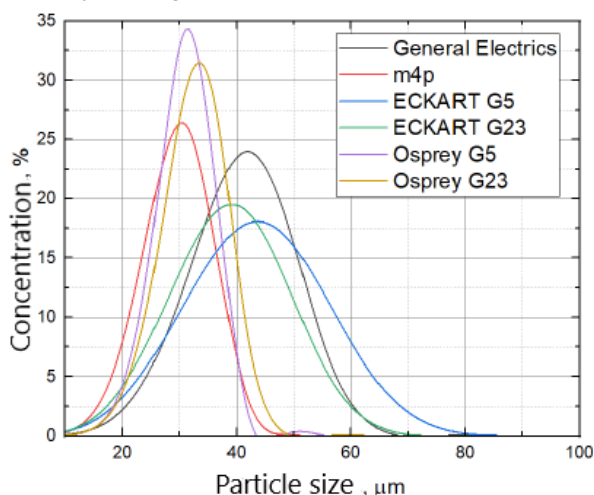


Fig. 1. Particle size distribution of titanium powder.

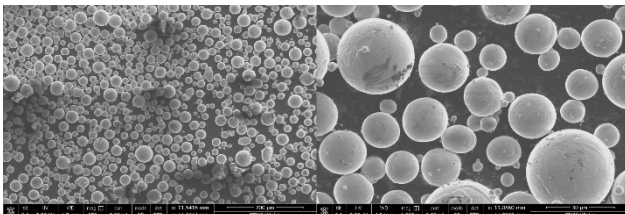


Fig. 2. Particle size distribution of titanium powder.

Table 1. Mechanical properties of alloys.

Material	Yield strength, MPa	Ultimate tensile strength, MPa	Young's modulus, GPa	Elongation at break, %	Relative change in cross-section, %
GE (G23)	999.5±5.3	1034±4.7	120.3±2.1	29.6±2.2	10.3±0.8
m4p (G23)	1033.0±10.3	1170±10.8	103.0±1.1	32.7±3.2	7.3±0.7
ECKART (G5)	1019.8±6.8	1047.3±5.0	121.3±3.0	32.9±2.4	6.7±0.3
ECKART (G23)	976.0±2.2	1017.8±2.1	119.0±0.7	27.0±5.3	10.7±0.4
Osprey (G5)	1052.3±0.2	1082.2±10.7	120.7±0.6	29.2±5.7	10.9±0.8
Osprey (G23)	1042.0±8.5	1075.1±7.8	119.5±1.0	24.7±8.6	9.2±1.6

m4p (G23) titanium powder has the best morphology of the test substances. m4p and Osprey (G5 and G23) powders stands out with low polydispersity. The minimum particle size at the D90 limit was the m4p manufacturer's powder. Thus, of all the manufacturers studied, the most suitable powder for 3D printing is m4p, as the smaller metal powder particles ensure more uniform alloy formation during printing, lower porosity, and surface roughness.

After evaluation of the ultimate tensile strength and modulus of elasticity of titanium alloys produced by 3D printing, the strongest alloy was made of m4p (G23) powder with the lowest vanadium concentration (3.75%) of all tested powders. Meanwhile, the weakest alloy was made from ECKART (G23) powder with the highest vanadium concentration (4.25%). The highest value of the modulus of elasticity (121.3 GPa) belonged to the ECKART (G5) alloy, which had the largest relative elongation (32.88%) and the smallest relative change in cross-sectional area (6.68%).

References

1. Y.R. Choi, S.D. Sun, Q. Liu, M. Brandt, M. Qian, Influence of deposition strategy on the microstructure and fatigue properties of laser metal deposited Ti-6Al-4V powder on Ti-6Al-4V substrate, Int J Fatigue. 130 (2020).

BISMUTO KVANTINIŲ TAŠKŲ FORMAVIMAS SEGREGACIJOS METODU

Arnas Pukinskas^{1,2}, Nerijus Jurkūnas³, Silvija Keraitytė¹, Algirdas Jasinskas^{1,4},
Andrea Zelioli¹, Bronislovas Čechavičius¹, Arnas Naujokaitis¹, Martynas Skapas¹,
Monika Jokubauskaitė¹, Evelina Dudutienė¹ ir Renata Butkutė^{1,5}

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

²Optogama, Mokslininkų g. 6B, Vilnius

³Optonas, Savanorių pr. 235, Vilnius

⁴Light Conversion, Keramikų g. 2B, Vilnius

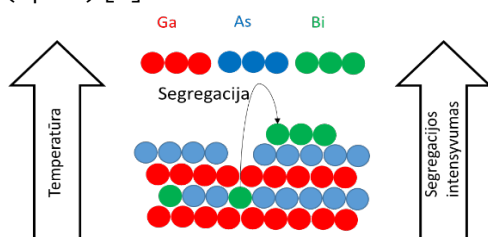
⁵Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, Vilnius

Pastaruosius kelis dešimtmečius mokslininkai tiria aktyviosios terpės miniaturizaciją, kurdami tokias struktūras kaip kvantiniai taškai, kvantinės duobės, kvantinės vielutės ir kt. Tokiu atveju įvairūs technologiniai protokolai, kaip skirtinga kvantinių duobių forma, atomų difuzijai skirtos pauzės auginimo metu, *ex-situ* ar *in-situ* atkaitinimai, leidžia koreguoti prietaisų parametrus.

Šiems tikslams pritaikyti labai patraukli yra AIII-BV-Bi junginių grupė, dar vadinama bismidais. Bismidai yra aktualūs dėl savo unikalios savybės – draustinių energijų tarpo valdymo As pakeičiant Bi atomais. Tačiau bismidų auginimas vis dar kelia įvairių iššūkių. Arseno ir galio santykis artimas 1 ir žema auginimo temperatūra (375°C – 425°C) lemia bismuto segregaciją į paviršių, taip išdardant struktūrą bei nepasižymint didelio intensyvumo liuminescencinėmis savybėmis.

Iki šiol paprastai buvo auginami ir tiriami stori bismidų sluoksniai ir standartinių kvantinių duobių dariniai. Tačiau mūsų grupės ankstesni tyrimai parodė, kad galima turėti ir kitokį kvantinių duobių dizainą [1]. Tai leido išgauti didesnę optinių savybių atkartinamumą struktūrose bei išskirti optinius ir auginimo parametrus darančius didžiausią įtaką atkartinamumui.

Apie bismuto kvantinius taškus pateiktų darbų dar nėra, nors tai būtų patraukliausia ir intensyviausia struktūra lazeriniams prietaisams. Dažniausiai kvantiniai taškai yra auginami Stranski-Krastanov (S-K) auginimo metodu. Bi atomų taško ir GaAs gardelės neatitikimas yra per didelis kvantinių taškų auginimui šiuo metodu. Taigi šiame darbe yra naudojamas segregacijos metodas, kuomet atkaitinant struktūrą Ga-Bi cheminis ryšys nutrūksta ir Bi segreguoja suformuodamas kvantinį tašką (1 pav.) [2].

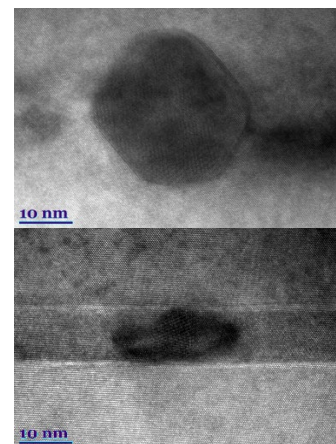


1 pav. Segregacijos proceso modelis, augant temperatūrai didėja segregacijos intensyvumas.

Ankstesni tyrimai parodė, kad taikant *ex-situ* atkaitinimą Bi nanodalelės buvo sėkmingai suformuotos ir pasižymėjo liuminescencija 1000 nm – 1300 nm bangų ruože [3]. Kvantinių duobių lazeriai pademonstravo lazeriavimą 1000 nm – 1200 nm bangų ruože, kas atitinka pirmą ir antrą telekomunikacijų langus.

Segregacijos metodu suformuotų kvantinių taškų dydis priklauso nuo kvantinės duobės pločio, tačiau dažnu atveju susiformavusių taškų diametras viršija kvantinės duobės plotį. Kadangi mūsų atveju naudingi kvantiniai taškai yra tik tie kurių diametras yra mažesnis negu 16 nm [3], AIAs tuneliniai barjerai yra pasitelkiami į pagalbą siekiant kontroliuoti norimą kvantinių taškų diametrą. Tai leidžia pasiekti trečią telekomunikacijų langą, kuris atitinka 1,5 μm bangos ilgį.

Šiame darbe Bi kvantiniai taškai buvo suformuoti pasitelkiant segregacijos metodą MBE reaktoriuje, *in-situ* atkaitinant GaAsBi kvantines duobes 600-750°C temperatūroje. HR-TEM ir PL matavimai buvo naudojami charakterizuoti užaugintas struktūras. HR-TEM rezultatai parodė, kad AIAs tuneliniai barjerai sėkmingai sulaiko Bi kvantinius taškus GaAsBi kvantinės duobės plotyje (2 pav.).



2 pav. GaAsBi kvantinės duobės su Bi kvantinais taškais skerspjūvio HR-TEM paveikslas.

Literatūra

1. S. Pūkienė et al., Nanotechnology 30, 455001, (2019);
2. Wang, L. et al. Crystals, 7(3), 63. (2017);
3. R. Butkutė et al., Nanoscale research letters 12 (1), 436, 3 (2017).

COMPARISON OF SINGLE- AND TWO-SUBSTRATE-TEMPERATURE GROWN GaAsBi/GaAs MULTI-QUANTUM WELLS

M. Jokubauskaitė, E. Dudutienė, B. Čechavičius,
A. Jasinskas, A. Zelioli, S. Stanionytė, M. Skapas, A. Naujokaitis, R. Butkutė

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

Only a few percent of bismuth is enough to incorporate in GaAs lattice to significantly reduce the energy band gap of the material. Together with properties like increased spin-orbit split-off energy and band gap which is less sensitive to temperature GaAsBi/GaAs multiple quantum wells (MQWs) makes a great candidate as an active media for optoelectronic devices operating at near-infrared range. However, from the technological point of view it is hard to grow high quality GaAsBi/GaAs quantum structures using conventional single-substrate-temperature (SST) technique due to large size of Bi atoms and consequent surface-segregation. Two-substrate-temperature (TST) method suggested by Patil *et al.* [1] was demonstrated to be an efficient way to reduce the segregation of Bi atoms and therefore improve the quality of layers and interfaces. Patil *et al.* [2015] also declared increased photoluminescence (PL) intensity when using TST method. This could be associated with thermal annealing of MQWs during the growth process, since the quantum well layer is grown at low temperature, but for the deposition of the barrier layer temperature is increased.

In this work GaAsBi/GaAs MQWs grown by molecular beam epitaxy (MBE) using SST and TST techniques were compared. Growth protocols for investigated structures are shown in Fig. 1. In SST method GaAs buffer was grown at 600°C and the following periods of GaAs:Be barriers and GaAsBi QWs were deposited at 370°C. Whereas TST method required to alternate growth temperature between 450°C and 370°C for the deposition of barrier and QW layers, respectively. Although higher PL intensities were expected for structures grown using TST, results were comparable between structures obtained by both techniques (Fig. 2). X-ray diffraction (XRD) and scanning transmission electron microscopy (STEM) proved higher structural quality of MQWs grown using SST. Meanwhile, quantum structures obtained by TST showed lower carrier localization and higher emission efficiency. Higher optical quality of GaAsBi/GaAs MQWs grown using TST could be associated with the annealing of the uncovered quantum well layer during the growth step where the temperature is raised for the upcoming

barrier layer. Due to higher temperature of the substrate Bi atoms segregated to the surface of the layer could evaporate, while atoms in the lattice might migrate to their assigned points reducing the amount of point defects. This leads to the sharper interfaces between layers of the quantum structure and lower localization.

	SST	TST
10 nm GaAs:Be	450 °C	450 °C
11 nm GaAsBi QW	370 °C	370 °C
10 nm GaAs:Be	450 °C	450 °C
130 nm GaAs buffer	600 °C	600 °C
S.I. GaAs substrate		

Fig. 1 Growth protocols of structures grown by SST and TST.

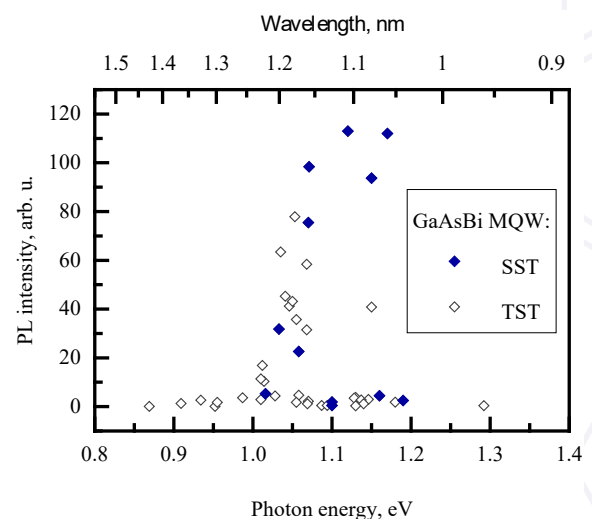


Fig. 2 Comparison of PL intensity and photon energy of GaAsBi/GaAs MQWs grown by SST and TST techniques.

References

1. P.K. Patil, F. Ishikawa, S. Shimomura, *Journal of Alloys and Compounds* **725** (2017) pp. 694-699;
2. P. Patil, T. Tatebe, Y. Nabara, K. Higaki, N. Nishii, S. Tanaka, F. Ishikawa, S. Shimomura, *Journal of Surface Science and Nanotechnology* **13** (2015) pp. 469-473.

Acknowledgement

This work was supported by Research Council of Lithuania under the grant No. P-MIP-22-309 (LMTLT).

BIMETALIŲ Au-Ag NANODALELIŲ GENERAVIMAS IŠ PLONŲ DANGŲ ANT STIKLO PADĖKLO NAUDOJANT NANOSEKUNDINĮ LAZERĮ

Vita Petrikaitė, Evaldas Stankevičius

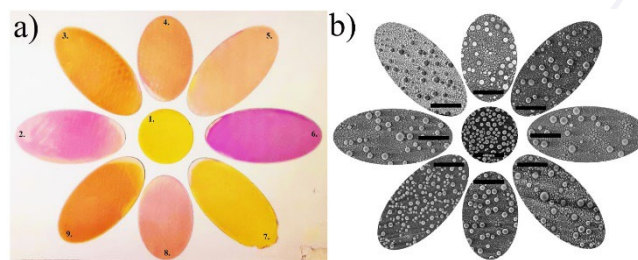
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: vita.petrikaite@ftmc.lt

Tauriųjų metalų aukso ir sidabro nanodalelės pasižymi dideliu ploto ir tūrio santykiu, elektriniu laidumu, cheminiu stabilumu, katalizinėmis funkcijomis ir geru biologiniu suderinamumu [1, 2]. Dėl šių savybių plačiai naudojamos įvairiose technologijose: katalizatoriuose, SERS ir optinių bei elektroninių prietaisų komponentuose, kurių savybės priklauso nuo lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso (LPPR) [2]. LPPR – tai dažnis, pasireiškiantis dėl laidžių elektronų virpesių, kurie sukuriama dėl sąveikos su elektromagnetine banga [3]. Vizualus LPP rezonanso indikatorius yra ryški nanodalelių spalva, nebūdinga makro-medžiagai ir atomams. Aukso ir sidabro nanodalelių sugertis ir sklaida vyksta skirtingose matomo elektromagnetinio spektro srityse. Norint pasiekti tarpinį rezonansinio bangos ilgio diapazoną pasitelkiamos hibridinės aukso-sidabro nanodalelės, kuriomis galima reguliuoti optines ir elektronines savybes plačiame diapazone, keičiant santykį tarp jas sudarančių metalų [4]. Taip pat dviejų metalų suliejimas į vieną medžiagą gali sudaryti sinergetinį efektą, dėl kurio sumažėja lydymosi temperatūra, padidėja biologinis suderinamumas ir išlaikomas stabilumas [5].

Nanodalelių morfologija, stabilumas ir fizikinės bei cheminės savybės priklauso nuo sintezės metodo. Pagrindinė problema, su kuria susiduriama, yra tolygus ir pasikartojantis nanodalelių nusodinimas ant padėklo. Šią problemą padeda išspręsti šiame darbe pristatomas termiškas lazerio ir plonų metalinių dangų naudojimas. Šio metodo privalumai – tikslumas, lengva lazerio parametrų kontrolė, mažas poveikis aplinkinėms sritims ir pačiam paviršiui. Naudojant šį metodą nanodalelės gali būti tiesiogiai ir gana tolygiai nusodinamos ant įvairių substratų ir gali būti lengvai atkartojamos.

Šiame darbe nanodalelės buvo generuojamos iš plonų 1–4 nm aukso ir sidabro sluoksnių padengtų vienas ant kito, sudarant plonas hibridines 3–5 nm dangas, kurios paveikiamos nanosekundiniu impulsų lazeriu (1 pav.). Įvairaus

santykio, storio ir eiliškumo (Au-Ag ir Ag-Au) dangos pasižymi individualia morfologija dėl sąveikos su tarpusavio ir stiklo pagrindu. Todėl svarbus generuojamų nanodalelių morfologijos ir plazmoninių savybių tyrimas. Taip pat yra lyginamas ir analizuojamas skirtingų metalų santykio skirtumas tarp sferinių nanodalelių dydžio, dispersijos ir optinių savybių. Gauti rezultatai lyginami su monometalinių aukso ir sidabro nanodalelių charakteristikomis.



1 pav. Monometalinės ir hibridinės nanodalelės, generuotos ant stiklo padėklo. a) Skaitmeninė nuotrauka skirtingo santykio Au-Ag ir Ag-Au dangų po ns-lazerio veikos b) Nanodalelių SEM nuotraukos.

Literatūra

1. Yeh, Y.C., B. Creran, and V.M. Rotello, Gold nanoparticles: preparation, properties, and applications in bionanotechnology. *Nanoscale*, 2012. **4**(6): p. 1871-80.
2. Stankevičius, E., et al., Engineering electrochemical sensors using nanosecond laser treatment of thin gold film on ITO glass. *Electrochim. Acta*, 2019. **297**: p. 511-522.
3. Petryayeva, E. and U.J. Krull, Localized surface plasmon resonance: Nanostructures, bioassays and biosensing—A review. *Anal. Chim. Acta*, 2011. **706**(1): p. 8-24.
4. Raveendran, P., J. Fu, and S.L. Wallen, A simple and “green” method for the synthesis of Au, Ag, and Au-Ag alloy nanoparticles. *Green Chem.*, 2006. **8**(1): p. 34-38.
5. Hlinka, J. and Z. Weltsch, Relation between the wetting property and electrical conduction of silver-gold (Ag-Au) alloys. *Period. Polytech. Transp. Eng.*, 2013. **41**(2): p. 95-98.

PERSONAL EXPOSURE AND DEPOSITION OF BLACK CARBON ON HUMAN LUNGS

¹Abdullah Khan, ¹Lina Davulienė, ¹Sergej Šemčuk, ¹Kamilė Kandrotaitė, ¹Agnė Minderytė, ¹Mehri Davtalab, ¹Ieva Uogintė, ¹Martynas Skapas, ¹Vadimas Dudoitis, ¹Julija Pauraitė, ¹Inga Garbarienė, ¹Steigvilė Byčėnienė

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

Black carbon (BC) levels for urban areas are not available from the standard air quality monitoring networks in many countries, as BC is not currently regulated by the EU Air Quality Directive [1]. The urban environment is very complex due to the different emission sources and their emission activities, therefore, a combination of mobile and stationary measurements allows a better understanding of the dynamics of BC, which spatial variation is greater than that of $PM_{2.5}$ – EU ambient air quality regulated standard. In this study, real-world measurements and work-related personal exposure and deposition dose of BC were investigated in the office and everyday commuting routes. The study was conducted in Vilnius, Lithuania, in the spring (March 2022). Mobile measurements on the street showed that BC concentrations were higher at peak hours, reaching up to $7.14 \mu g/m^3$ at hotspots. Hourly mean BC mass concentrations varied from 0.30 to $9.01 \mu g/m^3$, with traffic-related black carbon (BC_{tr}) accounting for 66% of the total BC mass concentration depicted in (Fig. 1).

The MPPD model results showed that the minute deposition dose of BC (MDD_{BC}) during the working day (including commuting and office hours) was highest in the morning rush hour, $0.031 \mu g/min$, and in the evening, $0.015 \mu g/min$, demonstrating the influence of traffic exhaust on aerosol particles, especially for fine particles mode. Significant differences were observed between the office and in-vehicle MDD_{BC} . The MDD_{BC} of $0.005 \mu g/min$ in the office microenvironment was almost six times lower than for drivers during the morning rush hours. Deposition dose showed that the daily in-vehicle BC exposure during commuting could account for one-third of the work-related exposure among office workers, depending on the time spent driving to work. Almost half of the inhaled BC particles are deposited in the lowest part of the respiratory system, the alveolar region (Fig. 2).

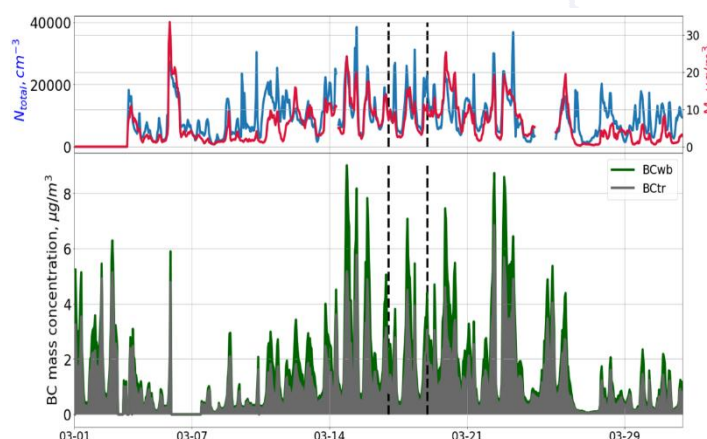


Fig. 1 Time series of total particle number and mass concentrations of 10–430 nm aerosol particles from SMPS measurements at the urban background site, and source apportioned BC_{tr} and BC_{wb} mass concentrations (stacked: BC from traffic (BC_{tr}) and wood burning (BC_{wb})) one-hour averages in March 2022. The black dashed lines represent the period of the street-level BC pollution assessment experiment.

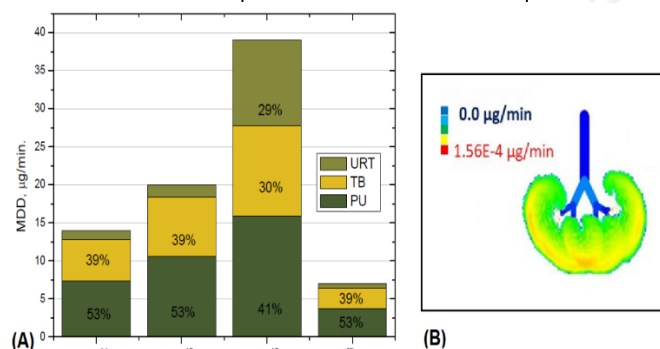


Fig. 2 MPPD model application: (A) minute deposition dose of BC for different routes in Vilnius and the office, (B) human respiratory tract - visualization of deposited mass of BC ($1 \mu m$ diameter) on the route from home to office (FTMC1) on 18/03/2022.

References

1. Languille, B., et al., *Personal Exposure to Black Carbon, Particulate Matter and Nitrogen Dioxide in the Paris Region Measured by Portable Sensors Worn by Volunteers*. *Toxics*, 2022. **10**(1).

PLONŲ SLUOKSNIŲ CINKO OKSIDO DANGŲ FORMAVIMAS IŠSUKIMO (SPIN-COATING) METODU

Deividas Vainauskas, Vidas Pakštas, Arnas Naujokaitis, Rokas Kondrotas

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

Cinko oksidas (ZnO) yra puikus II-VI tipo plačiatarpis puslaidininkis, pasižymintis n-tipo laidumu, didele eksitonų ryšio energija, dideliu optiniu pralaidumu regimajame šviesos diapazone, jo geras cheminis bei terminis stabilumas, tai nėra toksiška aplinkai medžiaga.

Dėl šių priežasčių cinko oksidas didelį potencialą turi medžiaga konstruojant optoelektronines, skaidrias medžiagas ir ypač tinka plonasluoksnių saulės elementų formavimui [1]. Įprastai, dėl gero energetinių lygmenų suderinamumo, stibio selenido saulės elementuose heterosandūrą yra formuojama ant kadmio sulfidu (CdS) padengtų padėklų. Tačiau CdS, dėl jame esančio Cd yra žalingas aplinkai ir žmogui. CdS galima pakeisti oksidų junginiais ir cinko oksidas (ZnO) kuris yra iš tos pačios II-VI medžiagų klasės, yra vienas iš perspektyviausių kandidatų. Pramoniniu požiūriu tai taip pat nebrangi, lengvai modifikuojama ir apdorojama medžiaga [2].

Cinko oksido dangos formuojamos įvairiais metodais. Tai radijo dažnio ar magnetroninio uždulkinimo, cheminio nusodinimo iš garų fazės, lazerinių impulsų energijos nusodinimu, purškimu ant karšto padėklo, zolių- gelių procesais [3].

Šiame darbe cinko oksido dangoms formuoti buvo pasirinktas zolių- gelių chemijos metodas- kombinuojant jį su išsukimo (spin-coating) technika. Šio metodo esminiai privalumai: tirpalai iš kurių dengiama - išmaišomi molekulinio lygiu, lengvai kontroliuojamos reagentų koncentracijos bei kompozicijos, lengva kartoti dengimų skaičių ir pasiekti norimą dangos storį. Metodas lengvai automatizuojamas ir pasižymi pigumu [4].

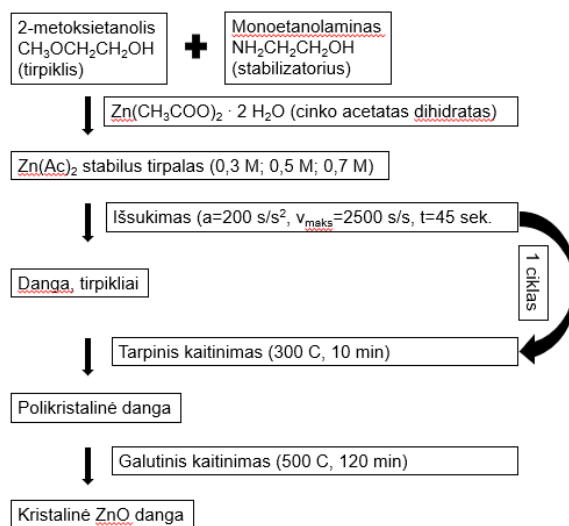
Darbe formuojant dangas buvo keičiamos reagentų koncentracijos ir dengimų skaičius. Principinė metodo schema pavaizduota 1 paveiksle. Dangos formuojamos iš cinko acetato tirpalų, kurių koncentracijos buvo 0,3 M; 0,5 M ir 0,7 M. Dengimų ciklai kartojami 1, 2, 5 ir 8 kartus. Tarp dengimų naudota 300 C (10 min.) tarpinio kaitinimo temperatūra, o galutinis atkaitinimas, norint pilnai suformuoti kristalinės fazės ZnO dangą atliekamas 500 C (120 min) temperatūroje.

Padengus cinko oksido dangas ant fluorinto alavo oksido (FTO), pastebima daug didesnė varža, kuri atitinka cinko oksidui būdingą varžą.

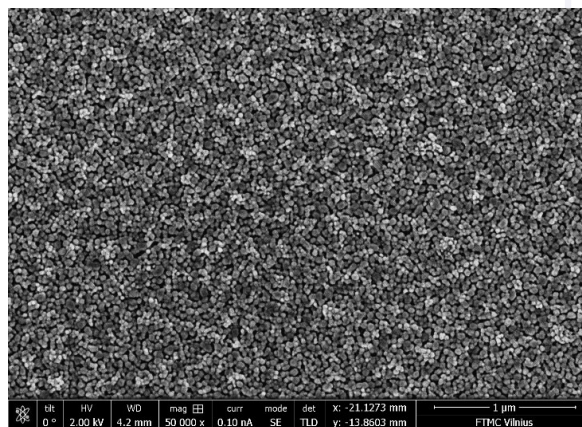
Atlikus Rentgeno spindulių difrakcinę analizę (XRD) pastebėta, kad polikristalinė cinko oksido danga pradeda formotis jau prie 300 C, o galutinai atkaitinus prie 500 C, kristališkumo

laipsnis žymiai padidėja.

Skleidžiamosios elektroninės mikroskopijos (SEM) fotografijos bei perpjautų dangų SEM vaizdai parodė, kad didėjant dengimų skaičiumi dangos storis didėja, jis lengvai kontroliuojamas, dangų paviršiaus morfologija nėra tolygi.



1 pav. Principinė ZnO dangų formavimo schema.



2 pav. ZnO dangos SEM nuotrauka po vieno dengimociklo iš 0,5 M koncentracijos tirpalo.

Literatūra

1. A. Mahroug, S. Boudjadar, S. Hamrit, L. Guerbous, Materials Letters. 134, 248-251 (2014).
2. V. Kumar, V. Kumar, S. Som, H. C. Swart, Journal of Colloid and Interface Science. 428, 8-15 (2014).
3. M. Smirnov, C. Baban, G. i. Rusu, Applied Surface Science. 256, 2405-2408 (2010).
4. M. D. Tyona, Advances in Material Research, 4, 181-193 (2013).

KOHERENTINIO IR NEKOHERENTINIO THz VAIZDINIMO STRUKTŪRINIAIS PLUOŠTAIS PALYGINIMAS SKAITMENINIAME EKSPERIMENTE

Karolis Mundrys, Paulius Kizevičius, Justinas Minkevičius, Sergejus Orlovas

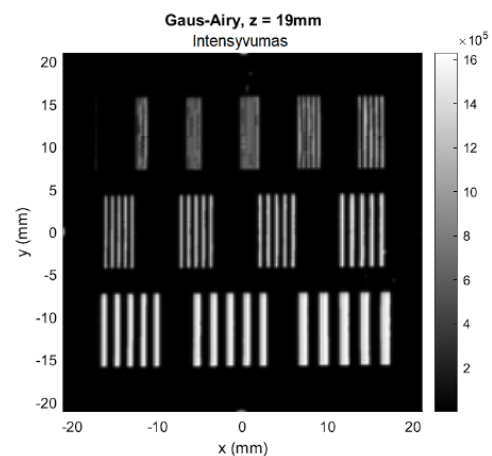
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: sergejus.orlovas@ftmc.lt

Fotonika yra įvardijama kaip pagrindinė įgalinanti technologija Europos Komisijos paskelbtame Bendrijos strateginiame plane. Tarp įvairių fotonikos sričių yra būtina išskirti elektromagnetinių šaltinių erdvinę sandarą formuojančią optiką ir tokios struktūrinės spinduliuotės įvairius pritaikymus. Elektromagnetinės THz bangų ruožo spinduliuotės šaltiniai per pastarąjį dešimtmetį susilaukė daug dėmesio dėl savo plataus pritaikymo potencialo: nuo neinvazinės spektroskopijos iki nejonizuojančio storų (virš keliasdešimt bangos ilgių) siekiančių bandinių vaizdinimo metodų. Tobulėjant THz spinduliuotei skirtų optinių elementų gamybos technologijoms, atsirado poreikis ištirti struktūrinių pluoštų savybių pritaikomumą milimetrinių elektromagnetinių bangų ruože atliekant bandinių neinvazinį vaizdinimą. Šio proceso metu vis dažniau reikalaujami netradiciniai struktūriniai pluoštai, kadangi be spinduliuotės bangos ilgio tampa svarbi ir pluošto struktūra židinio arba linijinio židinio aplinkoje.

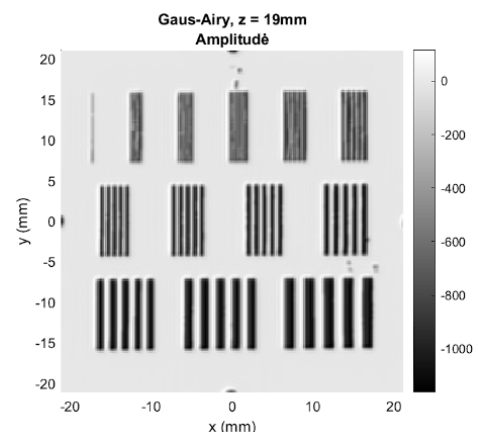
Viena svarbesnių specialios optikos taikymų sričių yra objektų vaizdinimas, jų atpažinimas, medžiagų detekcija, bandinių inspekcija. Šios užduotys yra kompleksiskai susijusios su difrakcijos teorija – tokie klausimai, kaip raiškos pagerinimas, geresnis kontrastas, platesnis regos laukas bei lauko gylis yra sunkiai išsprendžiami be fotonikos žinių. Standartinis vaizdinimas yra atliekamas su nekoherentiniais šaltiniais, kuomet informacija apie elektromagnetinio lauko fazę yra prarandama. Vaizdinimas su koherentiniais šaltiniais išlaiko informaciją apie bandinio fazę, tačiau vyksta elektromagnetinių bangų interferencija, tad kyla klausimas, kokie privalumai arba trūkumai atsiranda vaizdinant objektus koherentiškai.

Šio darbo idėja yra vaizdinimo eksperimentui pasinaudoti struktūrinę šviesą. Vietoje klasikinio Gauso pluošto ir jį generuojančio lęšio atlikti THz vaizdinimą su specialios optikos elementais, generuojančiais kitus banginės lygties sprendinius – nedifraguojančius cilindrinis (žinomus kaip Beselio) bei nedifraguojančius Airy pluoštais. Šiam tikslui pasiekti buvo sumodeliuoti plokštieji difrakciniai elementai, kurie surinktų spinduliuotę nuo bandinio apšviesto struktūriniais pluoštais. Buvo nagrinėjama šių elementų fazės moduliacijos profilio įtaka (pvz. kubinė, tiesinė, ir kitos) koherentiniame ir nekoheren-

tiname vaizdinime (1-2 pav.), buvo ieškomas optimaliausias vaizdinimo metodas, leidžiantis išgauti didžiausio kontrasto objekto vaizdą. Šio darbo metu buvo apžvelgtos tokio vaizdinimo pritaikymo medžiagų inspekcijoje perspektyvos.



1 pav. Vieno pikselio nekoherentinio vaizdinimo eksperimento intensyvumo rezultatai. Praėjusi pro bandinį šviesa buvo surinkta su zonine plokšte plus Airy kauke.



2 pav. Vieno pikselio koherentinio vaizdinimo eksperimento intensyvumo rezultatai. Praėjusi pro bandinį šviesa buvo surinkta su zonine plokšte plus Airy kauke.

Literatūra

1. R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė, P. Kizevičius, E. Nacius, D. Jokubauskis, K. Ikamas, A. Lisauskas, N. Alexeeva, I. Matulaitienė, V. Jukna, S. Orlov, L. Minkevičius, G. Valušis, "Terahertz structured light: nonparaxial Airy imaging using silicon diffractive optics" (2022) Light: Science and Applications (accepted).

GROWTH OPTIMIZATION AND CHARACTERIZATION OF MQWs BASED ON InGaAs AND GaAsBi FOR VECSELS AND NIR SOURCES

Silvija Keraitytė^{1, 4}, Andrea Zelioli¹, Evelina Dudutienė¹, Monika Jokubauskaitė^{1, 4},
Bronislovas Čechavičius¹, Artūras Suchodolskis¹, Sandra Stanionytė²,
Virginijus Bukauskas³, Vladimir Astachov³ and Renata Butkutė^{1, 4}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: silvija.keraityte@ftmc.lt

²Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterization of Materials Structure,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

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

⁴Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Photonics and Nanotechnology,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

Laser-based devices have immense potential in many application fields including optical fiber communication systems, material processing, LiDAR systems, Raman spectroscopy. Main parameters that define the capabilities of lasers are emission wavelength, beam quality, wavelength tunability, output power and the size of the device [1, 2]. From a technological point of view, there are numerous epitaxy limitations leading to the creation of structural defects or features, which reduce the optical quality, including non-radiative Auger recombination processes, temperature related instabilities [3]. It is very important for both electrically and optically pumped lasers to understand how crystal growth influences laser characteristics. Moreover, the ability to tune and/or flexibly control laser performances could extremely extend the application area. Thus, the optimization of the gain region composition and dimensions becomes a crucial step. As in order to obtain desired characteristics of the laser source, various challenges need to be solved during the growth of the active media and the quantum structures.

Therefore, the goal of this work was to grow and characterize multiple quantum well (MQW) structures based on two different materials – InGaAs and GaAsBi for laser devices operating in the near-infrared (NIR) region. All samples were grown using solid-source MBE system (Veeco GENxplor R&D). The structures were grown on semi-insulating GaAs substrate oriented in (001) crystalline plane. The optimization was performed varying molecular beam epitaxy conditions (temperature, pressure) and QW composition, number and thickness.

Fig. 1. shows the photoluminescence results obtained for InGaAs and GaAsBi MQW grown under optimized conditions. The insets demonstrate the surface peculiarities of the grown structures, characterized by atomic force microscopy.

References

1. M. Kuznetsov, *Semiconductor Disk Lasers: Physics and Technology* (2010) p. 1-71.
2. A.C. Tropper et al., *Journal of Physics D: Applied Physics* 37 R75 (2004).
3. M. Guina et al., *Journal of Physics D: Applied Physics* 50 (2017).

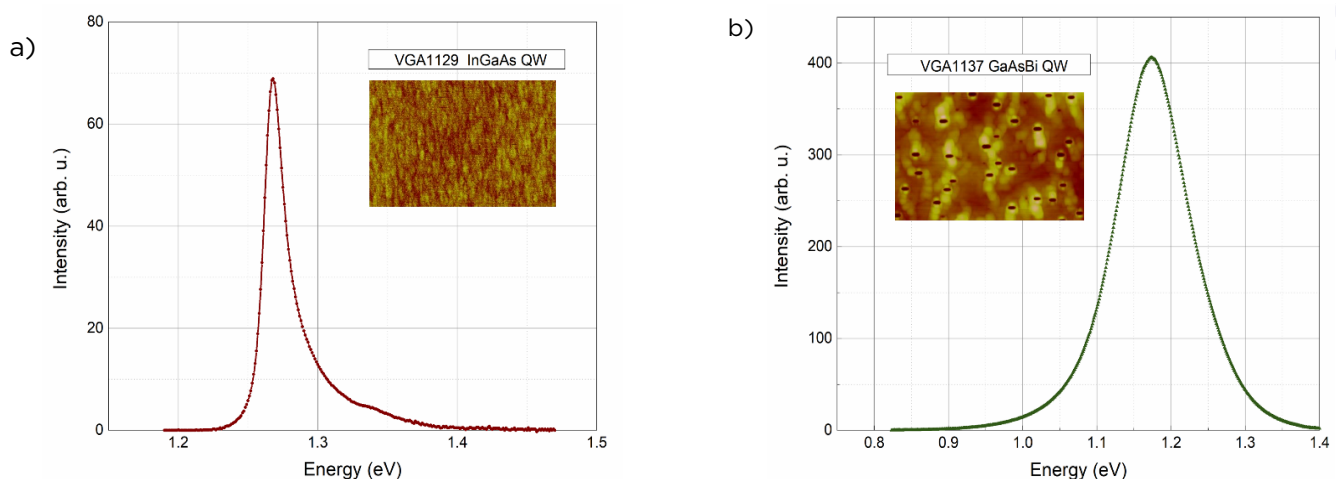


Fig. 1. Photoluminescence spectra of InGaAs (a) and GaAsBi (b) MQW. Insets depict surface morphology.

QUANTUM WELL INFRARED PHOTODETECTOR OPERATING AT ROOM TEMPERATURE

Karolis Redeckas¹, Ignas Grigelionis¹, Vladislovas Čižas¹, Vytautas Jakštas²,
Renata Butkutė¹, Andrius Bičiūnas¹, Linas Minkevičius¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: karolis.redeckas@ftmc.lt

²Center for Physical Sciences and Technology, Department of Physical Technologies
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius,

In today's quickly technologically emerging world infrared frequency range sensing systems are becoming more and more attractive for versatile applications like security, healthcare, agricultural industry etc. [1, 2]. Quantum well infrared photodetectors (QWIP) first demonstrated detector types for such sensing systems due to its economic efficiency and relatively simple manufacturing process [3]. Up to now the majority of applications, require cryogenic QWIP cooling in order to cancel out the room temperature background and obtain reasonable sensitivity and response time [4]. In the current study less cooling-dependent QWIP of the 7-12 μm wavelength range to (atmospheric window) were developed to respond to the high demand of infrared detectors for specific gas sensing [5]. In this work, the properties of GaAs/AlGaAs QWIP detectors designed and built using the FTMC facilities for 8-9 μm wavelength detection range are investigated. Characterization at room temperature as well as at the temperatures below 100 K was performed by measuring electrical properties and acquiring infrared photoresponse spectra in order to estimate signal to noise ratio and spectral responsivity. Spectra were obtained using conventional infrared Fourier spectroscopy. The collimated radiation emanating from the spectrometer was focused by a parabolic mirror ($f = 5\text{ cm}$) onto a surface of the QWIP. It was placed on the cold finger in the cryostat and biased with the DC voltage. Photo response was measured by using the Lock-in technique, mechanically chopping output radiation at 211 Hz. Spectra obtained with QWIPS having different grating couplers on top are presented in Fig. 1 (bottom). Each spectrum is smoothed and shifted by constant value in horizontal axis for easier comparison. The obtained results give an opportunity for the development of room temperature QWIPs which in turn opens possibilities for compact and light-weight sensing systems to be developed and used in wide amount of practical applications.

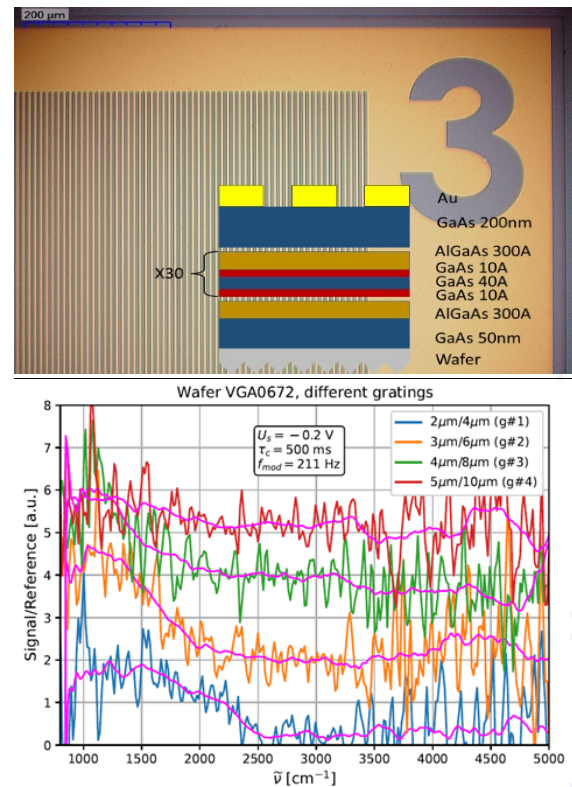


Fig. 1. The photo of the part of QWIP detector and its schematic cross section (top). Spectra obtained at room temperature (bottom).

References

1. D. Tyagi, H. Wang, W. Huang et al., Recent advances in two-dimensional-material-based sensing technology toward health and environmental monitoring applications, *Nanoscale* **12**, 3535-3559 (2020).
2. L. Karthikeyan, I. Chawla, A. K. Mishra, A review of remote sensing applications in agriculture for food security: Crop growth and yield, irrigation, and crop losses, *Journal of Hydrology* **586**, 124905 (2020).
3. R. Dudek, A. Shenet et al., QWIPs beyond FPAs: high-speed room-temperature detectors, *Proc. SPIE Infrared Technology and Applications XXVII* **4369**, (2001).
4. G. P. Wang, J. H. Cai, N. Li et al., *Cryocoolers* **14**, 2007, (Springer, USA, 2004).
5. A. Agarwal et al., On-chip mid-infrared gas detection using chalcogenide glass waveguide, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 141106 (2016).

GROWTH OF SERIES SAMPLES FOR OPTIMIZATION OF MQW MBE PARAMETERS

Andrea Zelioli¹, Algirdas Jasinskas¹, Simona Pūkienė¹, Silvija Keraitytė^{1, 2},
Arnas Naujokaitis¹, Martynas Skapas¹, Monika Jokubauskaitė¹, Evelina Dudutienė¹,
Artūras Suchodolskis¹, Bronislovas Čechavičius¹, Renata Butkutė^{1, 2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: andrea.zelioli@ftmc.lt

²Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania

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 main activity was focused on the comparison between the properties of active areas obtained using InGaAs and GaAsBi multi-quantum wells (MQW).

We started by studying the effect of the growth and design parameters in the emission wavelength of an active area composed by InGaAs MQW. In particular we focused on the effect of In content and quantum well width.

In order to compare these results with an active area containing GaAsBi MQW we started by investigating the main technological parameters required to grow high quality GaAsBi and sharp interfaces between GaAsBi and GaAs. We then analysed different types of GaAsBi quantum wells to optimize the confinement and obtain good emission from the photoluminescence

measurements.

The two types of MQW investigated are GaAsBi quantum wells enclosed in AlGaAs parabolic barriers. In one configuration each quantum well was enclosed in parabolic wells, while in the second one three rectangular GaAsBi/GaAs wells were contained in the parabolic AlGaAs barriers.

In both configurations the Al percentage was varied from 0% to 30% to obtain the parabolic barriers.

The last step of this work consisted in the fabrication of multiple full VECSEL chips using InGaAs/GaAs active area and others using GaAsBi/AlGaAs aiming at comparing the lasing properties of such devices.

To grow the full structure we started by fabricating a distributed Bragg reflector (DBR) with central wavelength matching the emission wavelength of the final device. On top of this DBR we grew the active area and window layers on top. These sample were characterized using XRD, reflectance, STM, AFM, temperature dependent PL and PL. The photoluminescence spectra obtained from these structure are shown in Fig.1. These show high PL emission intensity and wavelength correspondent with the central wavelength of the DBR.

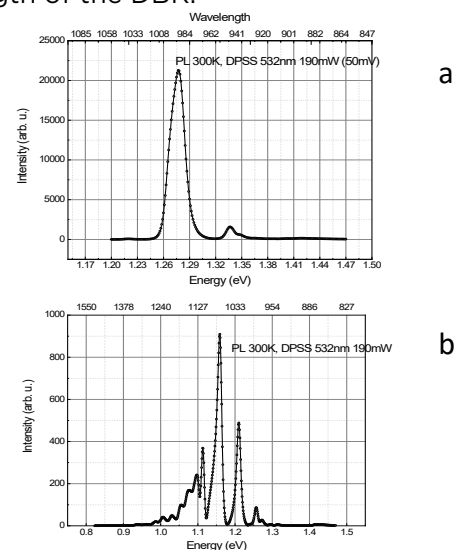


Fig. 1. Photoluminescence spectra of the full VECSEL structures, InGaAs/GaAs in a and GaAsBi parabolic MQW in b.

TRIPLE CATION PEROVSKITE/SILICON TANDEM SOLAR CELL

Muhammad Mujahid, Steponas Ašmontas

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

Perovskite solar cells based on organometal halide light absorbers have been highlighted as a viable photovoltaic technology because of its exceptional power conversion efficiency (PCE) and extremely low material prices. Nearly 90% of the solar cells (SC) produced today on the market are silicon-based. [1]. Perovskite and silicon SC have been experimentally combined to create tandem solar devices, which is significant since they outperform state-of-the-art silicon SC. In the two-terminal (2T) arrangement, the wide-bandgap cell is exactly positioned on the narrow-bandgap cell and both SC are monolithically included. [2]. The wide-bandgap cell is stacked on top of the narrow-bandgap cell, and the two cells are mechanically coupled in a four-terminal (4T) configuration [3].

We investigated the photovoltaic properties of a four terminal triple cation perovskite/silicon tandem SC built on an industrial n-type monocrystalline bifacial PERT silicon SC with a $\text{CS}_{0.06}(\text{MA}_{0.17}\text{FA}_{0.83})_{0.94}\text{Pb}(\text{I}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$ layer as shown in Fig.1. The triple cation perovskite film developed on the mesoporous titanium dioxide layer has a variety of grain sizes, some of which are greater than 1000 nm, as seen by the SEM image. The measured transmittance spectrum of the perovskite layer shows that it is semitransparent in the infrared and a good absorber of visible light. Transmittance in the 800-1100 nm wavelength range is significantly more than 80%. The top perovskite solar cell has an open circuit voltage of 1.11V, a short-current density of 23.6mA, a fill factor (FF), and a PCE of 19.4%, respectively. The bottom cell displays 7.2% PCE, 71%FF, 15.8mA short-current density, 0.64V open circuit voltage, and 7.2% PCE. Therefore, the overall PCE of the 4T perovskite/silicon tandem solar cell, which is 26.6%, is significantly higher than the efficiency of each subcell [4].

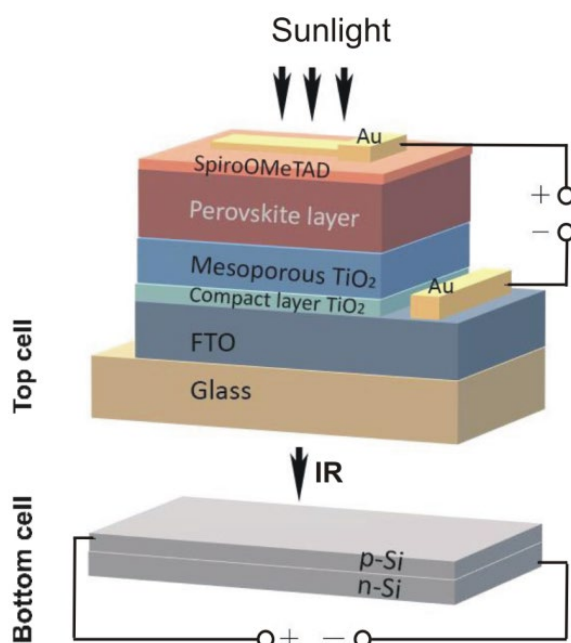


Fig.1. Architecture of the triple cation perovskite/silicon tandem solar cell composed of perovskite top cell and bottom silicon cell.

References

1. Yu C, Xu S, Yao J, and Han S; Crystals 8 (2018) pp. 430–41.
2. Albrecht S, Saliba M, Baena J P C, Lang F, Kegelmann L, Mews M, Steier L, Abate A, Rappich J, Korte L, Schlatmann R, Nazeeruddin M K, Hagfeldt A, Grätzel M, and Rech B; Energy Environ. Sci. 9 (2015) pp. 81–88.
3. Polman A, Knight M, Garnett E C, Ehrler B, and Sinke W C; Science. 352 (2016) pp. 4424–1– 442–10.
4. Ašmontas S, Gradauskas J, Grigučevičienė A, et al. Triple-cation perovskite/silicon tandem solar cell. 2022, 23: 193 1.