

13



FIZINIŲ IR
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ
CENTRAS

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS
MOKSLŲ CENTRO

**DOKTORANTŲ IR
JAUNŲJŲ MOKSLINIKŲ
KONFERENCIJA**

2023 m. spalio 18-19 d.



TEZIŲ KNYGA

TURINYS

01	Kasparas Kižys. Investigation of Microbial Biofuel Cell based on <i>Saccharomyces cerevisiae</i> modification.
02	Yaraslau Padrez. Clustering of second harmonic generation microscopy images of collagen capsules of thyroid nodules.
03	Maryia Drobys. Electrochemically-driven molecularly imprinted polymer-based sensor for detecting the nucleocapsid protein of SARS-CoV-2.
04	Ahmed Taha. Nanosecond Pulsed Electric Field Treatment Facilitated BSA/EGCG Binding.
05	Greta Tartėnė. Investigation of <i>S. cerevisiae</i> Plasma Membrane and Cell Wall Interaction After PEF Treatment.
06	Neringa Bakutė. Žinduolių ląstelių elektroporacijos mikrofiziologinė sistema su deguonies, pH ir TEER sensoriais.
07	Kamilė Jonynaitė. Uncovering novel effects of combined plasma and pulsed electric field (PEF) treatments on algae cells: Insights into cell death mechanisms.
08	Laisvidas Striška. Menadiono įtaka mielių ląstelių mechaninėms savybėms.
09	Tomas Mockaitis. Development of Latent Electrochemical Redox Probe for Detecting Vanin-1 in Blood and Cells.
010	Aliona Klimovich. Characterization of the Urotensin-II peptide by nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy.
011	Sukomol Barua. A Comparative Study of Bimetallic Nickel-Manganese/Titanium Bifunctional Electrocatalysts for Alkaline Freshwater and Simulated Seawater Splitting.
012	Greta Pilvenytė. MIP formavimas elektrai laidaus polimero pagrindu.
013	Nadežda Traškina. CNC-Based Binders for Aqueous Na-Ion Batteries.
014	Birutė Serapinienė. Applicability of Electrochemical Methods to Determine the Real Surface Area of Porous Cu 3D Nanostructures.
015	Abdullah Khan. Impact of PM2.5 and PM10 Emissions on Changes of Their Concentration Levels in Lithuania: A Case Study.
016	Daria Pashneva. Seasonal variations of aerosol black carbon concentration in Vilnius.
017	Touqeer Gill. Carbonaceous Aerosol Particle Sources in Manila North Port and Urban Environment.
018	Audrė Kalinauskaitė. Oro taršos šaltinių kilmės nustatymas receptoriniams taškams miesto ir kaimo aplinkose.
019	Laurynas Bučinskas. Stabiliųjų izotopų santykio ir radioanglies metodų pritaikymas kietųjų dalelių taršos šaltinių charakterizavimui.
020	Laurynas Butkus. Atmosferinio metano emisijų iš taškinio šaltinio tyrimo sistema dronų platformoje.
021	Matas Tartėnas. Stacionarios eulerinės gardelės panaudojimas greitai grįžtamojo ryšio injekcijai aktyviųjų galaktikų SPH modeliuose.
022	Eimantas Kriščiūnas. Adaptyvi apertūrinė žvaigždžių spiečių fotometrija.
023	Povilas Jurkšaitis. Stipriosios sąveikos režimas tarp paviršinių plazmonų ir Rodamino 6G molekulių.
024	Mantas Drazdys. Atominių storio sluoksnio nusodinimas GaSe kristalų skaidrinimui.
025	Justina Anulytė. Itin didelio jautrumo hibridinių plazmonų poliaritonų modų taikymas optiniams biojutikliams.

- O26** **Mykola Koliada.** Graphene-manganite structures for magnetic sensors applications.
- O27** **Andrea Zelioli.** Minimization of the dislocation density in multi quantum wells for the fabrication of NIR VECSELS.
- O28** **Lukas Stakéla.** Semiconductor Bloch Laser: A Theoretical Analysis of the Operational Limits of a Superlattice Terahertz Emitter.
- O29** **Surya Revanth Ayyagari.** THz Waveplate based on Laser Processed Silicon Grating.
- O30** **Lamiaa Abdelrazik.** Energy Transfer Dynamics in CsPbCl₃ Perovskite Doped with Various Contents of Yb³⁺.
- O31** **Muhammad Mujahid.** A Road Map to Perovskite Perovskite Tandem Solar Cells.
- O32** **Ihor Zharchenko.** Exploring Spectral and Temperature Aspects of Hot Carrier Phenomena in GaAs Solar Cells.
- O33** **Rokas Silkinis.** Theoretical modelling of vibrationally resolved optical lineshapes of a carbon-oxygen pair defect in silicon.
- O34** **Vytautas Žalandauskas.** Ab initio study of vibrational properties of divacancy defects in 4H-SiC.
- O35** **Karolis Adomavičius.** High-Throughput Fourier-Domain Optical Coherence Tomography for Retinal imaging.
- O36** **Shathya Duobienė.** Investigation of wireless sensor nodes for environmental monitoring.
- O37** **Justas Berškys.** Vektorinių nehomogeniškai poliarizuotų Airy pluoštų tyrimas.
- O38** **Klemensas Laurinavičius.** Vektorinių sufokusuotų židinio modų sklaidimo dielektrinėje terpėje tyrimas.
- O39** **Ernestas Nacius.** Vektorinių kontroliuojamo intensyvumo skirstinio pluoštų pritaikymas lazeriniam įvairių medžiagų mikroapdirbimui.
- O40** **Miglė Mackevičiūtė.** Vienašuvių modifikacijų formavimas lydytame kvarce naudojant MHz ir GHz papliūpas.
- O41** **Modestas Sadauskas.** Besrovis cheminis vario mikro takelių nusodinimas ant dielektriko paviršiaus.
- O42** **Laimis Zubauskas.** Optinių elementų formavimo skirtumai naudojant pikosekundinius ir femtosekundinius lazerinius impulsus.
- O43** **Mantas Gaidys.** Lazerinis plieno spalvinimas ultratrumpųjų impulsų voromis.
- O44** **Raimundas Burokas.** Kompaktiško priverstinės Ramano sklaidos keitiklio kaupiamo GHz impulsų paketais kūrimas.
- O45** **Aivaras Kazakevičius.** Ultrasparčiųjų lazerių impulsų energijos ir vidutinės galios didinimo metodai ir apribojimai.
- O46** **Augustinas Petrulėnas.** Didelės energijos kelių optinių ciklų NIR-SWIR-MIR diapazono lazerinė Sistema.
- O47** **Jaroslav Kodz.** Sanjako efektu pagrįstas neapgręžiamas fazės postūmio įrenginys.
- O48** **Alireza Shahidi.** A Dynamic Method to Determine the Elasticity of Additively Manufactured Ceramic Composite Specimens.
- O49** **Ada Steponavičiūtė.** Influence of Powder Particle Size on the Characteristics of Alloys Formed by Direct Metal Laser Sintering.
- O50** **Ignas Bitinaitis.** Aluminium doped silver films for space applications.

P1	Augustė Bielevičiūtė. Timing resolution of low gain avalanche detectors after irradiation up to high fluences.
P2	Martynas Laužikas. Aktyvaus galaktikos branduolio kuriamos tėkmės poveikis žvaigždėdarai.
P3	Karolis Stravinskas. Influence of Silicon Carbide on Alloys Formed by Laser Metal 3D Printing.
P4	Mohammad Esmaeil Daraei. Plasmonic diffraction gratings for THz emission.
P5	Ivan Halimski. Concentration fluorescence quenching in (zinc)-phthalocyanine solutions.
P7	Kristina Mikalauskiė. Nedestrukciniai metalinių atliekų tyrimai pasitelkiant gama spektrometrinius matavimus bei MCNP6 modeliavimą.
P8	Agnė Minderytė. Aerosol optical properties and black carbon source apportionment in Vilnius and Warsaw during the warm season of 2022.
P9	Huma Amber. Cobalt-Phosphorus Catalysts for Hydrogen Generation Reaction.
P10	Enayat Mohsenzadeh. Application of Computational Methods in the Design of Molecularly Imprinted Polymers.
P11	Paulina Nemaniūtė. Study of Polyurethane Composition with Betaine-Based Deep Eutectic Solvents.
P12	Pamela Rivera. Development of Electrochemical Sensor Arrays for Agriculture 4.0 Applications.
P13	Gitana Valeckytė. Synthesis and Characterisation of Nickel and its Alloys.
P14	Vita Petrikaitė. Lazeriu generuojamų aukso, sidabro ir hibridinių koloidinių nanodalelių stabilumo ir SERS sustiprinimo kontroliavimas naudojant KCl vandeninius tirpalus.
P15	Kernius Vilkevičius. Aukso nanodarinių gamyba, naudojant skirtingas femtosekundinio lazerio harmonikas.
P16	Rodrigas Liudvinavičius. Titano pasluoksnio įtaka plazmoniniam sužaditimui plonoje aukso dangoje naudojant tiesioginį lazerinį rašymą mikrogumbelių formavimui.
P17	Sandra Barysaitė. CP29 fotosintetinis kompleksas: chlorofilų geometrija ir elektroninės būsenos.
P18	Austėja Burbulytė. Synthesis and application of nanocomposite of lignin obtained from secondary wood raw materials for microplastic removal.
P19	Asta Bronušienė. Impact of annealing temperature for the formation and structure changes for tin sulfide films.
P20	Gabrielė Rankelytė. Baltyminės aplinkos elektrostatinė įtaka šviesorankos kompleksų pigmentų sužadintosioms būsenoms.
P21	Tomas Stonkus. Study of microplastic particles in Lithuanian rivers - plastic pirates project.
P22	Adolfas Žukauskas. Hydrothermal synthesis and investigation of Prussian blue analogues for aqueous sodium ion batteries.
P23	Justina Vaičaitytė. Užšaldytų modų artinys klasikinėse sistemose.
P24	Germantė Paulikaitė. Study of MXenes interaction with organic molecules in the aqueous environment.
P25	Aistė Butkutė. Investigation of photoluminescence efficiency of GaAsBi/GaAs quantum well structures.
P26	Patricija Šleiniūtė. Temperature-dependent photoluminescence and photoreflectance study of GaAsBi layers.
P27	Kipras Čepaitis. Femtosekundiniu lazeriu formuojami plazmonus žadinantys masyvai.

P28	Martynas Zalieckas. Grafeno kvantinių taškų ir doksorubicino agregatų stabilumas, įvertintas optiniais metodais.
P29	Kristupas Volbikas, Jonas Paukštys. Synthesis and coupling of functionalised terphenyls with air-stable di-alkyl phosphine salts.
P30	Monika Jokubauskaitė. Growth and optical properties of multiple GaAsBi quantum wells with parabolic AlGaAs barriers.
P32	Muhammad Haris. High System Kinetics of Photoelectrochemical (PEC) Water Splitting using Plasmonic Nanocomposite of Bivo4.
P33	Saulė Steponavičiūtė. Lazerinis tekstūravimas paviršiaus vilgumo savybėms keisti.
P34	Austėja Trečiokaitė. Pilnojo lauko optinė koherentinė mikroskopija su skaitmenine aberacijų korekcija.
P35	Aivaras Špokas. Precise Control of Emmission Wavelentgh in GaAsBi MQW Structures During MBE Growth.
P36	Gustas Petrusėvičius. Investigation of Optical Properties of GaAsBi MQW NIR LED Grown on AlAs Sacrificial Layer.
P37	Julija Pronckutė. MXene-based colorimetric sensor for the detection of silver ions.
P38	Martynas Marozas. Titanium suboxides application as a photocatalyst for the decomposition of Rhodamine B dye under visible light irradiation.
P39	Kasparas Stanaitis. Cost-effective production and examination of paraffin lenses designed for THz radiation.

INVESTIGATION OF MICROBIAL BIOFUEL CELL BASED ON SACCHAROMYCES CEREVISIAE MODIFICATION

Kasparas Kižys¹, Domas Pirštelis², Inga Morkvėnaitė-Vilkončienė¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: kasparas.kizys@ftmc.lt

²Vilnius University, The Faculty of Chemistry and Geosciences Naugarduko 24, LT- 03225 Vilnius

Microbial fuel cells (MFC) can purify water, generate electricity, or be used as a biosensor [1]. However, due to their low current density, practical application is very limited. In this research, we present improved Bakers' yeast (*S. cerevisiae*) containing MFC modified with polypyrrole (pPy) in the presence of 9,10-phenanthrenequinone (PQ).

PQ acts as a redox mediator, transferring electrons through the yeast membrane, thus resulting in greater membrane charge permeability while only slightly halting the growth of yeast [2]. For further improvement of MFC, yeast cells were modified with a conductive polymer pPy, which was synthesized by taking advantage of yeasts' metabolism reactions. pPy enhances electrical charge transfer from the microorganism to the electrode and, in addition, does not harm the yeast cell [3].

Several PQ-covered graphite electrodes (Fig. 1) – unmodified, covered with regular yeast, covered with pPy modified yeast, and, as “final form” modification, yeast modified by pPy with added gold nanoparticles – were evaluated in a glucose/potassium hexacyanoferrate solution after 20 min of incubation. The performance of electrodes was evaluated by voltametric measurements, which were calculated to represent power density.

References

1. K. Kižys, A. Ramanavičius, I. Morkvėnaitė-Vilkončienė et al., *Biosensors* **13**, 221 (2023).
2. J. Rozene et al., *Electrochim. Acta* **373**, 137918 (2021).
3. A. Kisieliute et al., *Chem. Eng.* **356**, 1014–1021 (2019).

Several resistors were used during the measurement, and the best performance was represented with a 10 k Ω resistor. In glucose/potassium hexacyanoferrate solution, the unmodified electrode did not exhibit any mentionable power density, less than 1 mW/m². The yeast-covered electrode had a substantially higher power density of 5,4mW/m², while the modified yeast with nanoparticles-covered electrode had the greatest peak of power density: 28,9mW/m² – 5,35 times more than the regular yeast electrode.

From this, we can conclude that covering a graphite electrode with PQ, Ppy, and nanoparticles yeast increases its effectiveness by 5,35 times, yielding higher values of the power density of the MFC, in comparison to results in covering the electrode with PQ and bare yeast only.

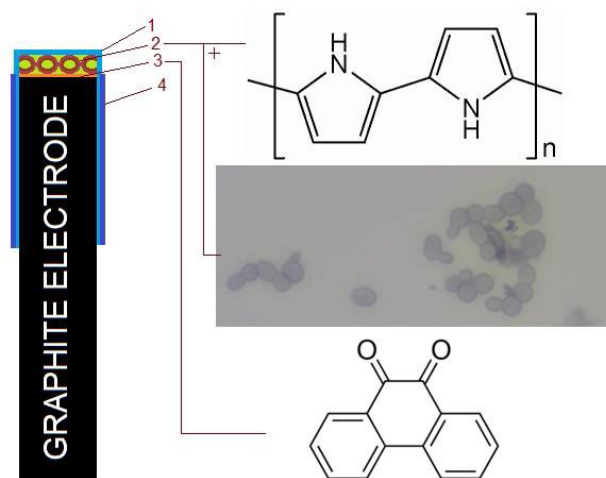


Fig.1. Composition of “final form” electrode: 1.) Porous microfilm; 2.) Yeast, covered with Ppy and added gold nanoparticles; 3.) PQ layer; 4.) Layer of isolator.

CLUSTERING OF SECOND HARMONIC GENERATION MICROSCOPY IMAGES OF COLLAGEN CAPSULES OF THYROID NODULES

Yaraslau Padrez, Lena Golubewa, Igor Timoshchenko,
Danielis Rutkauskas

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

Papillary thyroid carcinoma (PTC) is one of the most common endocrine tumors. Some PTCs can be totally or partially surrounded by a capsule, which consists predominantly of collagens of fibrillar structure. During the disease, the structural and textural features of collagen can change significantly. These changes can be revealed by second harmonic generation (SHG) microscopy. Collagen fibers have a non-centrosymmetric structure, are characterized by high hyperpolarizability at a microscale, non-linear susceptibility of harmonophores at a macroscale, which creates favorable conditions for emitting SHG. SHG microscopy is a label-free technique as the SHG originates intrinsically from collagen fibers themselves making it a more acceptable technique than, e.g., fluorescence microscopy which requires additional staining.

To determine characteristic structural changes, it is necessary to process many textural parameters that can be extracted from SHG microscopic images of collagen. However, texture analysis of big sets of SHG images is often limited by heavy computation and interpretation of the results is often problematic. Implementation of the machine learning-based models can significantly speed up and improve data analysis. In the present research unsupervised machine-learning techniques supported by principal component analysis were applied to big datasets of texture- and intensity-based features extracted from SHG images of whole PTC nodules. The main goal of this analysis was to reveal specific changes in collagen structure along the capsule surrounding PTC, that could indicate the capsular invasion or the formation of prerequisites for capsular invasion in any parts of the collagen capsule.

The data sets of SHG images of collagen capsules of PTC nodules were accumulated on the custom-made wide-field SHG microscope as described in [1]. Image texture analysis was performed to extract features that were further used to classify images based on their characteristics. However, algorithms of feature extraction sometimes fail in discriminating between specific textures [2], and simultaneous implementation of several methods of feature extraction is needed for proper data classification and further analysis. In the present study, three texture analysis algorithms based on the diverse statistics were used, including: first order statistic, second order statistic (based on a

gray level co-occurrence matrix) and high order Statistic (based on a gray level run length matrix) [3]. As a result, sets of 34 intensity- and texture-based features were created for each SHG image out of 20736 images that make up whole PTC nodules. Pearson's correlation and principal component analysis were applied to reduce the dimensionality of the space of features extracted from SHG images. The first four principal components (PCs) explaining 93% of data variance were used for further data classification. K-means clustering based on four PCs was used to discriminate PTC collagen capsule from surrounding tissue and then to divide collagens composing PTC capsule into subclusters. The initial clustering revealed eight clusters: clusters corresponding to data outliers (3), cluster relating to glass slide supporting the tissue sections (1), cluster possibly related to inflamed tissue (1), cluster corresponding to adjacent tissue (1) and clusters specifically related to collagen capsules surrounding the PTC nodule (2). Subsequently, collagen-related clusters isolated at the first stage of analysis were classified again to reveal tiny changes along the capsule. According to clustering efficiency metrics, four subclusters composing the capsule itself were extracted. Each subcluster is characterized by specific intensity- and texture-based sets of features, explaining structural characteristics of collagen related to different areas of the capsule. Subcluster C1 represents the internal part of the capsule and corresponds to the tightest collagen. Subcluster C2 forms the largest part of the capsule, C3 relates to less integral and sparse collagen. Subcluster C4 characterizes collagen fibers around normal thyroid follicles. Regions of interest annotated by medical experts as cites of invasion consisted predominantly of C2 subcluster, with some inclusion of C3/C4 and almost total absence of C1 cluster. The obtained results may simplify diagnostics by machine learning based identification of pathological changes in collagen structure and provide prognosis of capsular invasion in cases when it is not detectable by conventional histopathology.

References

1. A. Dementjev et al., *Lith. J. Phys.* **60**, 145–153 (2020).
2. R. W. Conners et al., *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, **2**, 3 (1980)
3. G. Kumar et. al, 2014 Fourth International Conference on Advanced Computing & Communication Technologies, Rohtak, India, **5**-12 (2014).

ELECTROCHEMICALLY-DRIVEN MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER-BASED SENSOR FOR DETECTING THE NUCLEOCAPSID PROTEIN OF SARS-CoV-2

Maryia Drobysh¹, Vilma Ratautaite¹, Ernestas Brazys², Almira Ramanaviciene³,
Arunas Ramanavicius^{1,2}

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

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

³Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry,
NanoTechnas – Center of Nanotechnology and Materials Science, Naugarduko Str. 24, LT-03225 Vilnius

This is a comparative study of the utility of three different molecularly imprinted polymer (MIP) systems. These MIPs are based on polypyrrole with SARS-CoV-2 nucleocapsid protein templates. Notably, the nucleocapsid proteins are more structurally stable by a relatively low propensity for mutation compared to other SARS-CoV-2 antigens [1]. Such structural stability makes them an attractive target for diagnostic assays.

The three MIP systems examined in this study were based on screen-printed carbon electrodes (SPCE) modified with gold or platinum nanostructures.

Pulsed amperometric detection (PAD) was used to evaluate the three MIP systems. PAD is an electrochemical technique known for its label-free detection capabilities, eliminating the need for additional redox probes [3].

To evaluate the performance of each MIP system, calibration curves were constructed to quantify the response of the sensing systems to varying concentrations of SARS-CoV-2 nucleocapsid protein. In parallel, non-imprinted systems were included as controls to assess nonspecific binding, which is a critical factor in sensor development.

The study included the determination of analytical parameters such as limits of detection (LOD) and quantitation (LOQ) for the MIP1 system.

To confirm the specificity of the MIP1 system, a specificity test was performed using the receptor-binding domain of the SARS-CoV-2 spike protein as a control.

In conclusion, the most suitable and specific MIP-based sensor identified in this study is the MIP1 based on gold nanostructures. Continued research and development in this direction offer the potential for enhanced sensor applications in real sample analysis.

Acknowledgements: This project has received funding from the European Regional Development Fund (project No. 13.1.1-LMT-K-718-05-0033) under a grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT). Funded as the European Union's measure in response to COVID-19 pandemic.

References

1. X. Li, M. Xiong, Q. Deng, X. Guo, Y. Li, *J Clin Lab Anal.* **36**(7), e24534 (2022).
2. M. Drobysh, V. Liustrovaite, A. Baradoke, R. Viter, C-F. Chen, A. Ramanavicius, A. Ramanaviciene, *Biosensors.* **12**(8), 593 (2022).
3. V. Ratautaite, R. Boguzaitė, E. Brazys, D. Plausinaitis, S. Ramanavicius, U. Samukaite-Bubniene, M. Bechelany, and A. Ramanavicius, *Talanta.* **253**, 123981 (2023).

NANOSECOND PULSED ELECTRIC FIELD TREATMENT FACILITATED BSA/EGCG BINDING

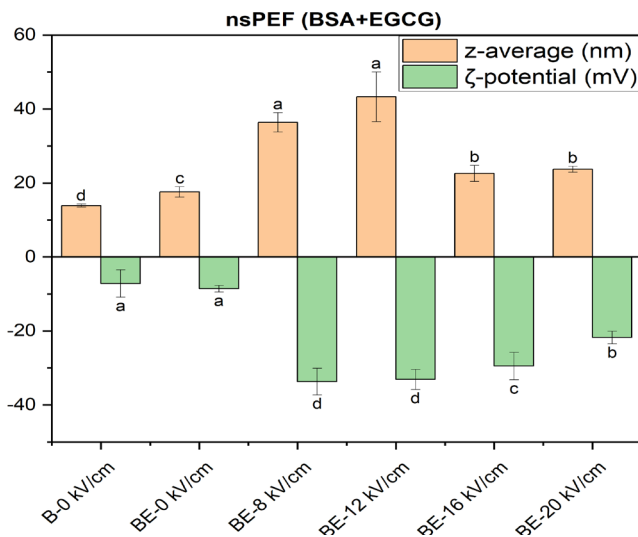
Ahmed Taha*, Federico Casanova**, Arūnas Stirė*

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

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

Proteins' structural characteristics severely affect their functionality, stability, and interactions with other molecules (1). Extensive research has been conducted on the impact of physical and chemical factors such as ultrasound, temperature, pH, and high pressure on protein conformation (2). Epigallocatechin-3-gallate polyphenol (EGCG) provides many health advantages (3, 4) and the binding between bovine serum albumin (BSA) and EGCG can improve the stability of EGCG and the functional properties of BSA. The study aimed to study the effects of nanosecond pulsed electric field (nsPEF) in altering the structure and physicochemical properties of BSA and its binding with EGCG.

nsPEF increased the α -helix content, particle sizes, absolute ζ -potential, and surface hydrophobicity values of BSA. Moreover, the addition of EGCG to nsPEF-induced BSA resulted in a significant increase in particle sizes of BSA and a decrease in fluorescence intensity and surface hydrophobicity. nsPEF treatment of BSA/EGCG mixtures induced changes in BSA structures as confirmed by Raman FTIR spectroscopy. Raman's results showed that nsPEF induced changes in protein structure, mainly in S-S and S-C bonds. Changes in amide I region was observed in FTIR spectra of nsPEF-induced BSA/EGCG mixtures. Moreover, nsPEF improved the particle sizes, absolute ζ -potential values and UV-vis absorbance intensity while reducing the surface hydrophobicity values. Molecular docking confirmed that BSA can bind with EGCG at specific active sites on both molecules. It is recommended to study the stability of nsPEF-induced BSA/EGCG mixtures under different conditions (i.e., light, temperature, digestion system conditions, etc.) as a primary step to prepare EGCG-encapsulated functional food products.



Effects of nsPEF (0-20 kV/cm) on the particle sizes and ζ -potential of BSA (B) and BSA/EGCG mixtures (BE).

References

1. R. S. H. Lam, M. T. Nickerson, Food Chem. 141, 975-984 (2013).
2. S. Xue et al., Innovative Food Science and Emerging Technologies. 45, 354-360 (2018).
3. A. B. Sharangi, Food Research International. 42, 529-535 (2009).
4. N. T. Zaveri, Life Sci. 78, 2073-2080 (2006).

INVESTIGATION OF *S. CEREVISIAE* PLASMA MEMBRANE AND CELL WALL INTERACTION AFTER PEF TREATMENT

Greta Tartėnė¹, A. Stirkė¹, A. Zimkus²

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

²Department of Biochemistry and Molecular Biology, Life Sciences Center,
Vilnius University, Saulėtekio al. 7, Vilnius, Lithuania

Saccharomyces cerevisiae are viewed as a prototype of eukaryotic cells, ideally suited for use in studies of many phenomena of eukaryotic life. Yeasts are surrounded by a cell wall, which provides them with protection. Pulsed electric field (PEF) treatment is known to cause plasma membrane permeabilization, an effect known as electroporation. However, the dynamic of cell wall and plasma membrane interaction during and after PEF treatment is a still unanswered question. Our previous work used tetraphenylphosphonium bromide [TPPBr] to measure the kinetics of yeast cell wall recovery after PEF treatment [1]. This study aims to expand the fundamental knowledge about plasma membrane and cell wall dynamic and recovery after PEF treatment.

The use of a potentiometric ion-selective electrode is a convenient method for the quantitative evaluation of the permeability of the yeast cell wall and membrane. In this study we have constructed an ion selective electrode by adapting Zimkus *et. al.* methodology [2]. Then, we

have employed a wild type (WT) and a mutant strain derived from WT, MNN11, to measure cell wall recovery via TPP⁺ ion uptake by electroporated yeast cells'. PEF parameters: single square pulse, duration of 150μs and field strength of 2.9, 4.5 or 5.9kV/cm.

We have found that non-electroporated WT cells can absorb a maximum of about 2μM and MNN11 about 1,5μM (Fig. 1. a,b). PEF treatment did not impact the maximum absorption, but it significantly reduced the time of TPP⁺ absorption. The higher electric field strength we applied, the faster TPP⁺ absorption happened. Furthermore, we measured cell wall recovery after PEF. What we found is that cell wall behaves in a similar fashion as plasma membrane does, but the time it takes to recover is slower (Fig. 1. c,d).

Further work includes measuring plasma membrane potential changes by employing a DisC₃(3) fluorescence probe to further investigate PEF effect on the yeast cell exterior.

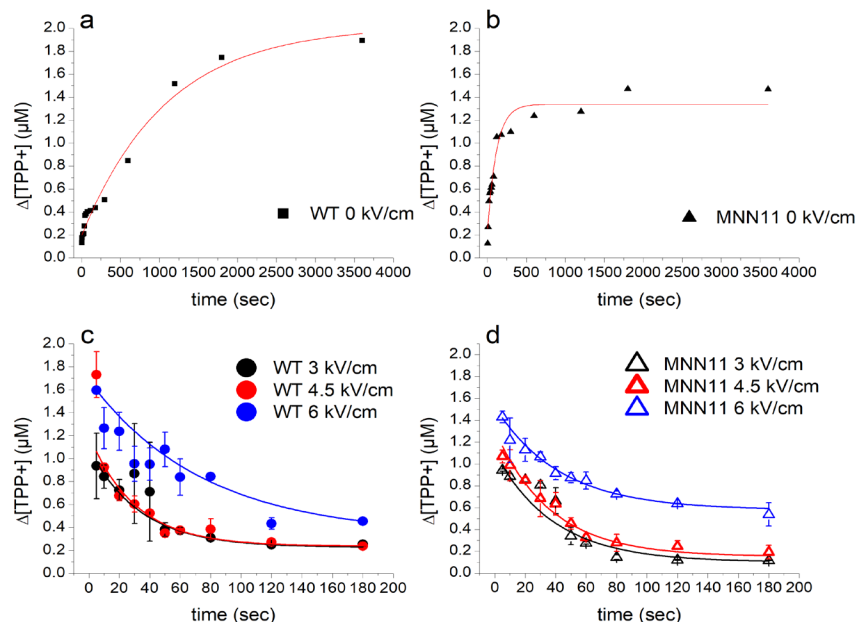


Fig. 1. TPP⁺ absorption of a. WT and b. MNN11 yeasts; cell wall recovery after PEF treatment of c. WT and d. MNN11 yeasts.

References

1. A. Stirke, R. Celiesiute-Germaniene, A. Zimkus, N. Zurauskiene, P. Simonis, A. Dervinis, A. Ramanavicius, and S. Balevicius. The link between yeast cell wall porosity and plasma membrane permeability after PEF treatment. *Scientific Reports* 2019 9:1, 9(1):1-10, (2019).
2. A. Stirke, A. Zimkus, A. Ramanaviciene, S. Balevicius, N. Zurauskiene, G. Saulis, L. Chaustova, V. Stankevicius, and A. Ramanavicius. Electric Field-Induced Effects on Yeast Cell Wall Permeabilization. *Bioelectromagnetics*, 35:136-144, (2014).

ŽINDUOLINIŲ LAŠTELIŲ ELEKTROPORACIJOS MIKROFIZIOLOGINĖ SISTEMA SU DEGUONIES, pH ir TEER SENSORIAIS

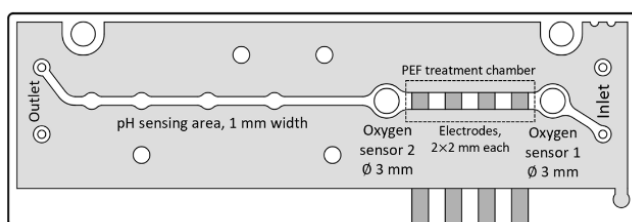
Neringa Bakutė, Agnė Damarackaitė, Kamile Kasperavičiūtė, Eivydas Andriukonis, Martynas Šapurov, Jorūnas Dobilas, Vilius Vertelis, Skirmantas Kersulis, Gatis Mozolevskis, Arunas Stirkė

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

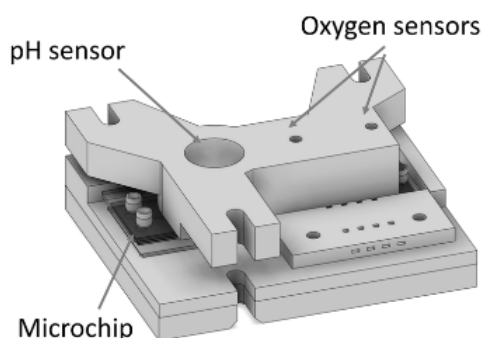
Elektroporacija - tai metodas, keičiantis ląstelių membranos pralaidumas ląsteles veikiant impulsiniu elektriniu lauku (PEF). Įprastai PEF poveikis vykdomas kiuvetėje su įterptais elektrodais, naudojamos komercinės kiuvetės. Vis dėlto, ląsteles veikiant PEF kiuvetėje įskaitant elektrinio lauko iškreipimus, lokalaus pH svyravimai, vyksta pernelyg didelis šilumos išsiskyrimas ir metalų jonų ištirpimas, dėl kurio sumažėja elektroporacijos efektyvumas ir ląstelių gyvybingumas¹. Siekiant įveikti šiuos trūkumus, įprastinė impulsinio elektrinio lauko (PEF) technologija buvo perkelta į mikroskopinį mastą ir integruota į mikrofluidinius prietaisus².

Mikrofluidinės sistemos yra kelių rūšių: organas ant lusto (OoC) ir mikrofiziologinė sistema (MPS) ir laboratorija ant lusto (LoC). OoC ir MPS yra artimos paskirties prietaisai, tačiau MPS išsiskiria tuo, kad pačiame prietaise yra dar ir integruotos sistemos fiziologinių parametrų stebėjimui.

Mikrolustų gamybai plačiai yra naudojama soft-litografijos technologija su polidimetilsiloksanu (PDMS). Vis dėlto PDMS pasižymi ir mikrofluidikai netinkamomis savybėmis, vienas kurių yra mažų molekulių absorbcija. Kaip alternatyva PDMS, gali būti naudojamas nestechiometrinis tiol-enas (OSTE), išlaikantis esmines mikrofluidikos savybes, tokias kaip skaidrumas, biologinis suderinamumas ir kt.³



1 pav. Schematinis mikrolustų pjūvis.

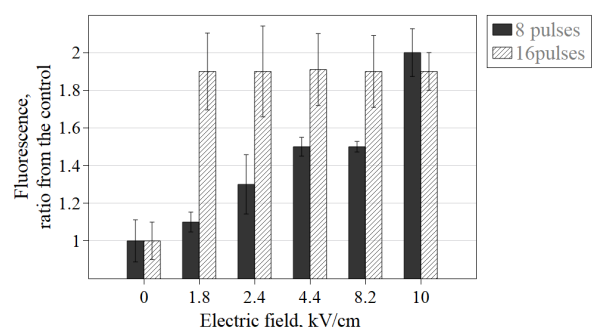


2 pav. Schematinis MPS pavaizdavimas.

Mes pagaminome mikrofluidinį lustą soft litografijos technologija panaudojant OSTE, pats mikrolustas yra padarytas mikroskopinio stiklelio formatu. Šis mikrolustas turi kanale integruotus elektrodus ląstelių elektroporacijai bei TEER matavimui bei du deguonies sensorius (pav.1). Visas surinktas MPS prietaisas turi papildomus prijungtus adapterius deguonies koncentracijos perdavimui bei pH matavimui.

Pagamintame mikroluste buvo atlikti žinduolių ląstelių PEF eksperimentai, įvertinant ląstelių pralaidumą ir gyvybingumą. Rezultatai patvirtino PEF sukeltą pralaidumą fluorescuojančiam dažui DAPI vykdant sustabdytos tėkmės PEF (3 pav.), tačiau ląstelių gyvybingumas nesiskyrė nuo kontrolinės nepaveiktos imties veikiant ląsteles 1,8-10 kV/cm elektriniu lauku. Matuojant fiziologinius parametrus, deguonies koncentracija padidėjo mėginiuose apdorojus PEF, tuo tarpu nesant PEF poveikio, deguonies koncentracija sumažėjo, kas sietina su ląstelių kvėpavimo metu sunaudotu deguonimi. Matuojant pH, nustatyta, kad po PEF poveikio pH pasilenka į šarminę pusę. Taip pat buvo atlikti TEER matavimai ir pademonstruota galimybė TEER stebėjimui eksperimentų metu.

Atlikti tyrimai patvirtino kad mūsų koncepcinė technologija veikia ir pagamintas MPS yra tinkamas žinduolių ląstelių elektroporacijai su deguonies koncentracijos, pH ir TEER stebėjimu *in situ*.



3 pav. Pralaidumas DAPI po poveikio PEF su įvairiais elektriniais laukais, 100 μ s, 1 Hz. Fluorescencijos intensyvumas išreikštas santykiu nuo neelektroporoties kontrolės kiekviename elektriniame lauke.

REFERENCES

1. G.Saulis, R.Rodaitė-Rišėvičienė, R.Saulė, *Membranes*, 2022, **12**, 184.
2. T. Geng and C. Lu, *Lab Chip*, 2013, **13**, 3803-3821.
3. C. F. Carlborg, T. Haraldsson, K. Öberg, M. Malkoch and W. van der Wijngaart, *Lab Chip*, 2011, **11**, 3136-3147.

UNCOVERING NOVEL EFFECTS OF COMBINED PLASMA AND PULSED ELECTRIC FIELD (PEF) TREATMENTS ON ALGAE CELLS: INSIGHTS INTO CELL DEATH MECHANISMS

Kamilė Jonynaitė¹, Rolandas Uscila², Skirmantas Keršulis¹, Žydrūnas Kavaliauskas²,
Liutauras Marcinauskas², Arūnas Stirke¹, Voitech Stankevič¹

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

² Lithuanian Energy Institute, Breslaujos st. 3, LT-44403 Kaunas

The combination of plasma and pulsed electric field (PEF) treatment allows for enhanced cell inactivation above that achieved by PEF treatment alone [1–3]. This promising effect is suggested to be associated with the oxidation of membrane lipids by plasma-generated radicals, resulting in compromised membrane integrity, which facilitates PEF-induced pore formation. Recent studies have also demonstrated that the combined treatment of plasma and PEF can induce various mechanisms of mammalian cell death, including apoptosis, autophagy, pyroptosis and ferroptosis [2]. However, there is a lack of research investigating the effects of combined plasma and PEF treatment on microalgae. Therefore, the aim of our study was to investigate the effect of a combination of plasma and PEF on *Chlorella vulgaris* cells. We focused on the initiation of cell membrane permeabilization and its downstream effects, including cell death mechanisms and the release of valuable intracellular compounds.

To achieve our research objectives, we used sliding arc discharge and PEF technologies to treat the freshwater alga *C. vulgaris*. Plasma was generated using compressed air at a flow rate of approximately 22.8 L/min, with an electrode-to-suspension distance of 30 mm, a treatment duration of 300 s, a plasma generator voltage of 50 to 250 V and a frequency of 270 kHz. The PEF treatment consisted of 10 μ s pulses, varying from 1 to 10 pulses, with a repetition rate of 1 Hz and an electric field strength of 24–25 kV/cm. Subsequent assessments included evaluation of electrical conductivity, cell permeability, DNA leakage and secreted protein concentration in the algal suspension. We used untreated and ultrasonically disrupted algal suspensions as negative and positive controls, respectively.

The findings showed that increasing the plasma generator voltage led to higher levels of long-lived NO₂/NO₃ radicals generated by the air plasma discharge, resulting in an almost twofold increase in suspension conductivity. However, there was no significant change in pH. In terms of cell permeability, plasma treatment alone induced permeability only at the highest voltages (above 210 V), whereas PEF treatment induced increased permeability in proportion to the number of pulses applied. In addition, cell permeability assessments after 24 hours showed that PEF treatment led to DNA leakage, whereas plasma treatment alone rendered cells permeable but did not lead to DNA leakage. When plasma and PEF were combined, two different effects on cell permeability were observed. When the plasma voltage was below 170 V, the combined treatment produced the same effect as PEF alone, with cell permeability and DNA leakage. However, when the plasma voltage exceeded 210 V, cell permeability increased without DNA leakage.

More unexpectedly, this strong plasma and PEF effect also resulted in a reduced release of soluble proteins from *C. vulgaris*.

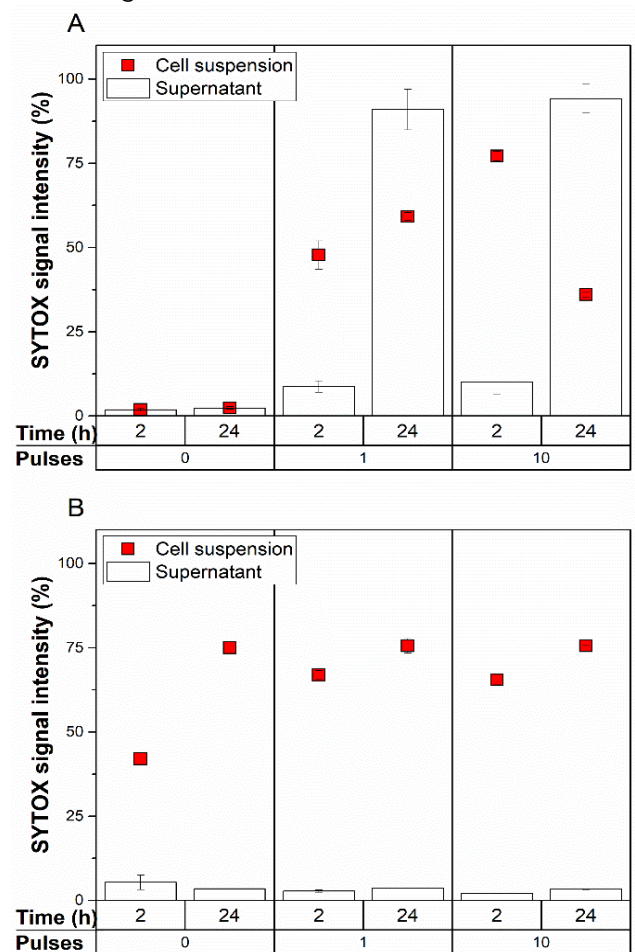


Fig. 1. Plasma and PEF treatment-induced changes in SYTOX green fluorescence in cell suspension and supernatant after 2 h and 24 h of incubation. The applied voltage of the plasma generator was 130 V (A) and 250 V (B).

These results reveal undescribed effects of the combined effects of plasma and PEF on algal cells and highlight the need for more detailed analysis to explain the mechanisms of the combined effects before they are applied.

References:

1. R. Mentheour, Z. Machala, *Frontiers in Physics*. 10 (2022). <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2022.895813>.
2. C.M. Wolff, J.F. Kolb, S. Bekeschus, *Biomedicines*. 10 (2022) 3084. <https://doi.org/10.3390/biomedicines10123084>.
3. Q. Zhang, J. Zhuang, T. von Woedtke, J.F. Kolb, J. Zhang, J. Fang, K.-D. Weltmann, *Appl. Phys. Lett.* 105 (2014) 104103. <https://doi.org/10.1063/1.4895731>.

MENADIONO ĮTAKA MIELIŲ LĄSTELIŲ MECHANINĖMS SAVYBĖMS

Laisvidas Striška, Inga Morkvėnaitė-Vilkončienė

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: laisvidas.striska@gmail.com

Gyvų ląstelių mechaninių savybių nustatymas iš atominės jėgos mikroskopijos (AFM) jėgos-atstumo kreivių yra iššūkis, nes apskaičiuotas tamprumo modulis priklauso nuo taikomo matematinio modelio. Patikimesnius rezultatus galima gauti naudojant baigtinių elementų modelius. Šiame darbe skirtingų mechaninių savybių turinčios mielių ląstelės buvo išmatuotos AFM. Norint pakeisti ląstelių mechanines savybes, mielės buvo veikiamos menadiono, kuris pakeitė ląstelių membranų tamprumą. Šie duomenys bus panaudoti visos ląstelės 3D baigtinių elementų modeliui, skirtam apskaičiuoti reakcijos jėgą, kai AFM adata spaudžia ląstelę, atkartojant realų eksperimentą. Darome prielaidą, kad modelis gali gauti informacijos apie ląstelių mechanines savybes, ląstelių membranų atsaką, adatos su membrana kontakta, ląstelės įtvirtinimo būdo įtaką ir adatos spaudimo lokacijos ląstelėje įtaką nustant ląstelės mechanines savybes.

Atominės jėgos mikroskopija (AFM) yra vertinga gyvų ląstelių tyrimo priemonė [1]. Ląstelių elastines savybes, adheziją, membranos hidrofobiškumą ir morfologinį tyrimą galima atlikti AFM [2, 3].

Pavienių ląstelių mechaninių savybių tyrimai rodo, kad vėžinės ląstelės yra „minkštesnės“, labai deformuojamos, o tamprumo modulis yra mažesnis nei sveikų [4]. Išmatuotos ląstelių membranų mechaninės savybės priklauso nuo matavimo sąlygų, tokių kaip ląstelių fiksacija, aplinkos aplinka (tirpalas arba oras), temperatūra, matavimo laikas, skenavimo greitis, zondo geometrija, taikoma jėga, matavimo būdas, adatos kokybė ir mėginių paruošimo procedūros [5]. Todėl paprastai AFM rezultatai vertinami lyginant; apvyzdžiui, sveikos ląstelės – vėžinės, vėžinės – vaistais gydomos ir pan.

Tamprumo modulis ląstelei skirtingomis eksperimentinėmis sąlygomis gali būti nustatytas matuojant jėgos-atstumo priklausomybes ir taikant matematinis modelius. Kelios teorijos aprašo tampriąją bandinio deformaciją. Šias teorijas sukūrė Hertz [6], Johnson-Kendall-Roberts (JKR) [7] ir Derjaguin-Muller-Toporov (DMT) [8], Snedonas [9, 10]. Kiekvienas iš modelių turi trūkumų (pvz.: nėra įvertinamas efektyvus kontakto plotas Snedono modelyje), todėl jiems nustatyti taikomi baigtinių elementų modeliai [11]. Nustatytas reikšmingas skirtumas tarp kepenų karcinomos ląstelių matavimo rezultatų su sferinėmis ir kūginėmis adatomis; buvo nustatyta, kad tamprumo modulis yra atitinkamai $15,0 \pm 3,2$ kPa ir $52,7 \pm 5,3$ kPa [12]. Autoriai padarė išvadą, kad Hertz-Sneddon

modelis negali paaiškinti šių rezultatų; o taikant baigtinių elementų modelį buvo gauta atitinkamai 8,52 kPa ir 7,44 kPa naudojant kūgio ir sferos formos adatas.

Taigi, baigtinių elementų modeliai gali būti patikimesnis būdas nustatant gyvų ląstelių mechanines savybes.

Literatūra:

1. Morkvenaite-Vilkonciene, I., Ramanavicius, A., and Ramanaviciene, A., Atomic Force Microscopy as a Tool for the Investigation of Living Cells. *Medicina*, 2013. 49(4): p. 155-164.
2. Roduit, C., Sekatski, S., Dietler, G., Catsicas, S., Lafont, F., and Kasas, S., Stiffness tomography by atomic force microscopy. *Biophysical journal*, 2009. 97(2): p. 674-677.
3. Guo, Q., Xia, Y., Sandig, M., and Yang, J., Characterization of cell elasticity correlated with cell morphology by atomic force microscope. *Journal of biomechanics*, 2012. 45(2): p. 304-309.
4. Lieber, S.C., Aubry, N., Pain, J., Diaz, G., Kim, S.-J., and Vatner, S.F., Aging increases stiffness of cardiac myocytes measured by atomic force microscopy nanoindentation. *American Journal of Physiology-Heart and Circulatory Physiology*, 2004. 287(2): p. H645-H651.
5. Cross, S.E., Jin, Y.-S., Rao, J., and Gimzewski, J.K., Nanomechanical analysis of cells from cancer patients. *Nature nanotechnology*, 2007. 2(12): p. 780.
6. Hertz, H., On the contact of elastic bodies. *Hertz's Miscellaneous Papers*, 1881: p. 146-162.
7. Dulińska, I., Targosz, M., Strojny, W., Lekka, M., Czuba, P., Balwierz, W., and Szymoński, M., Stiffness of normal and pathological erythrocytes studied by means of atomic force microscopy. *Journal of biochemical and biophysical methods*, 2006. 66(1-3): p. 1-11.
8. Lekka, M., Laidler, P., Ignacak, J., Łabędź, M., Lekki, J., Struszczyk, H., Stachura, Z., and Hryniewicz, A., The effect of chitosan on stiffness and glycolytic activity of human bladder cells. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Molecular Cell Research*, 2001. 1540(2): p. 127-136.
9. Sneddon, I.N., The Relation between Load and Penetration in the Axisymmetric Boussinesq Problem for a Punch of Arbitrary Profile. *Int. J. Eng. Sci.*, 1965. 3: p. 47-57.
10. Lekka, M., Laidler, P., Gil, D., Lekki, J., Stachura, Z., and Hryniewicz, A., Elasticity of normal and cancerous human bladder cells studied by scanning force microscopy. *European Biophysics Journal*, 1999. 28(4): p. 312-316.
11. McGarry, J. and Prendergast, P., A three-dimensional finite element model of an adherent eukaryotic cell. *Eur Cell Mater*, 2004. 7: p. 27-33.
12. Cappella, B. and Dietler, G., Force-distance curves by atomic force microscopy. *Surface science reports*, 1999. 34(1): p. 1-104.

DEVELOPMENT OF LATENT ELECTROCHEMICAL REDOX PROBE FOR DETECTING VANIN- 1 IN BLOOD AND CELLS

Tomas Mockaitis¹, Yan-Zhi Huang², Sheng-Tung Huang², Inga Morkvėnaitė-Vilkončienė¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania email: tomas.mockaitis@ftmc.lt

²National Taipei University of Technology, Department of Chemical Engineering,
1, Sec. 3, Zhongxiao E. Rd., Taipei 10608 Taiwan

The Vanin-1 enzyme is an important enzyme that plays a significant role in various biological processes. Vanin-1 is an extracellular enzyme widely present in mammalian and avian tissues and is expressed on the cell surface by glycosylphosphatidyl alcohol (GPL) anchoring in epithelial cells [1]. It is a member of the vanin family of enzymes and is found in various tissues and organs, including the liver, kidney, intestine, and immune cells, and is closely associated with a number of diseases [2]. This enzyme is involved in the metabolism of pantetheine, a precursor of coenzyme A. Vanin- 1 catalyzes the hydrolysis of pantetheine into pantothenic acid and cysteamine, which are essential molecules in cellular metabolism and also participates in the synthesis of glutathione (GSH) [2]. GSH is highly expressed in tumor cells and plays a significant role in the resistance of tumor cells to cisplatin. In recent years, many studies have intensely elucidated the latent role of pantetheinase in relation to inflammation and diseases. For example, Vanin-1 knockout mice showed higher

susceptibility to drug-induced hepatic injury and a decreased capacity to detoxify xenobiotics, suggesting enzymic protective effects. Moreover, pantetheinase has displayed a promising capacity as a disease marker since it is upregulated in the early phase of kidney injury and inflammatory bowel diseases [3]. However, the exact cellular mechanism of this enzyme remains poorly understood, largely due to the lack of a proper method to detect its distribution and expression in living cells. Therefore, developing an in situ analytical method for pantetheinase in biosystems is urgently needed. Several methods exist to detect Vanin-1, such as ELISA, fluorescence, and direct cysteamine testing. However, these methods are not "convenient" for rapid detection of the Vanin-1 enzyme due to long and complicated sample preparation, testing, or indirect detection. Our studies aim to synthesize the latent electrochemical redox probe, which would be easy to use and rapidly detect the small amount of the enzyme Vanin-1 in the blood and cells.

References:

1. J.Qian, L.Zhang, J.Wang, Z.Teng, T.Cao, L.Zheng, Y.Cao, W.Qin, Y.Liu and H.Guo, Red emission ratio fluorescent probe for the activity of vanin-1 and imaging in vivo, *Journal of Hazardous Materials* **401**, 123863 (2021).
2. P.Lu, C.Zhang, L.Fu, Y.We, Y.Huang, X.Wang, C.Lv and L.Chen, Near-Infrared Fluorescent Probe for Imaging and Evaluating the Role of Vanin-1 in Chemotherapy, *Anal. Chem.* **93**, 10378- 10387 (2021).
3. Y.Yang, Y.Hu, W.Shi and H.Ma, A near-infrared fluorescence probe for imaging of pantetheinase in cells and mice in vivo, *Chem Sci.* **11(47)**, 12802-12806 (2020).

CHARACTERIZATION OF THE UROTENSIN-II PEPTIDE BY NANOPARTICLE-ENHANCED RAMAN SPECTROSCOPY

Aliona Klimovich, Tatjana Charkova, Ieva Matulaitiene

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic chemistry
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: aliona.klimovich@ftmc.lt

Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) provides opportunities on investigation of biomolecules in small concentrations and in molecular level, which gives unique information about its bonding, orientation, and interaction with the environment. This information is especially useful for fundamental studies on biological systems, such as biocatalysis or receptor acceptor interaction through metal ion. Urotensin II (U-II) is vasoconstrictor that is widely distributed in numerous organs of different animal species and affects many physiological and pathophysiological activities, which makes it a promising target for potential drug development [1].

Unfortunately, the precise mechanism of U-II interaction with its receptor is unknown and there was no SERS studies performed on urotensin peptides as well.

In this study, we investigated U-II adsorption with silver surface by SERS. According by our data the U-II adsorbs on silver surface through the indole ring of the L-tryptophan residue and phenyl ring of the phenylalanine (Fig. 1).

References:

1. H.P. Nothacker and S. Clark, FEBS J **272**, 5694 (2005).

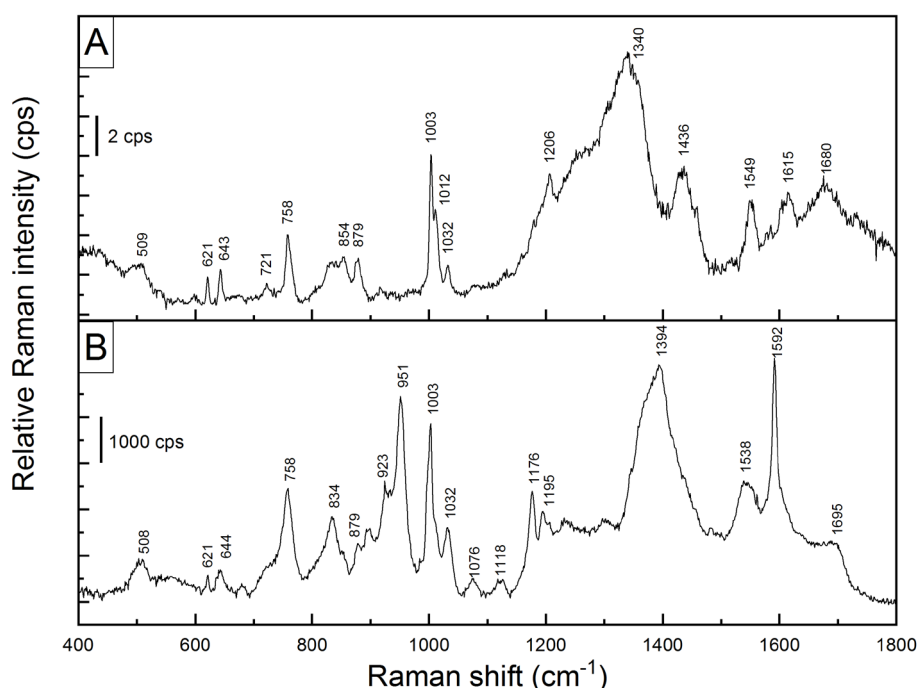


Fig. 1. Comparison of the Raman (A) and SERS (B) spectra of U-II

A COMPARATIVE STUDY OF BIMETALLIC NICKEL-MANGANESE/TITANIUM BIFUNCTIONAL ELECTROCATALYSTS FOR ALKALINE FRESHWATER AND SIMULATED SEAWATER SPLITTING

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

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

Herein, we demonstrate a facile synthesis of bimetallic nickel-manganese (NiMn) alloy electrocatalysts supported on a titanium (Ti) substrate ($1 \times 1 \text{ cm}^2$) using an electrochemical deposition through a dynamic hydrogen bubble template technique and report their bifunctional electrocatalytic performance for hydrogen evolution reaction (HER) and oxygen evolution reaction (OER) in alkaline media (1 M KOH) as well as in simulated seawater (1 M KOH+0.5 M NaCl).

The polarization curves of the prepared NiMn/Ti catalysts were recorded both in alkaline freshwater and simulated seawater at a potential scan rate of 10 mV s^{-1} and a temperature range from 25 up to 65°C . The fabricated NiMn/Ti-5 electrocatalyst with $\text{Ni}^{2+}/\text{Mn}^{2+}$ molar ratio of 1:5 exhibits excellent HER activity in alkaline media with a low overpotential of 127.1 mV whereas,

in simulated seawater, the NiMn/Ti-5 electrocatalyst demonstrates a superior HER activity with an ultra-low overpotential of only 64.2 mV to reach the benchmark current density of 10 mA cm^{-2} . On the contrary, the as-prepared NiMn/Ti-1 electrocatalyst with $\text{Ni}^{2+}/\text{Mn}^{2+}$ proportionality of 1:1 and the lowest Mn-loading of $13.43 \mu\text{g cm}^{-2}$ demonstrates exceptional OER activity with the minimum required overpotentials of 356.3 mV in alkaline media and 371.4 mV in simulated seawater to reach a current density of 10 mA cm^{-2} . These catalysts have also exhibited excellent long-term stability at the constant potential and constant current density of 10 mA cm^{-2} assuring their robustness and higher durability in both electrolytes.

MIP FORMAVIMAS ELEKTRAI LAIDAUŠ POLIMERO PAGRINDU

Greta Pilvenytė¹, Šarūnas Žukauskas¹, Alma Ručinskienė¹, Raimonda Bogužaitė¹,
Arūnas Ramanavičius^{1,2}, Vilma Ratautaitė¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanotechnologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: greta.pilvenytė@ftmc.lt

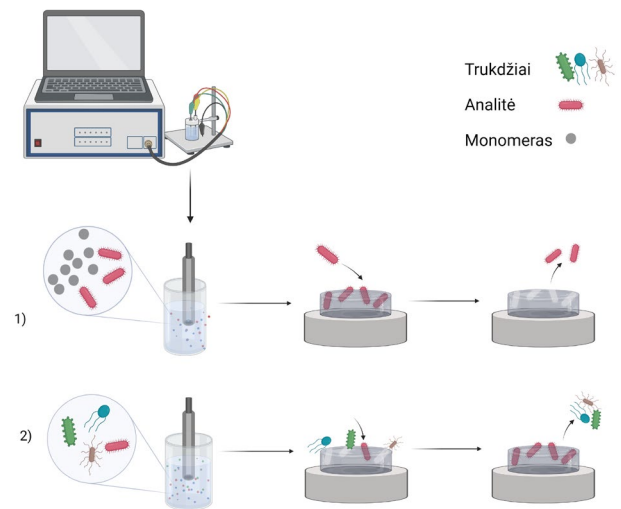
²Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas
Naugarduko g. 24, Vilnius LT 03225, Lietuva

Molekulių įspaudais modifikuoti polimerai (MIP) yra tokios unikalios struktūros sintetinės, siekiant atlikti atrankią tikslinių molekulių analizę. Jų veikimo principą galima apibūdinti „rakto ir spynos“ atitikmeniu. MIP gali būti pritaikytas vaistų pernašos sistemoms, mėginių gryninimui ir jutikliams kurti. MIP principas apima polimerų struktūrų kūrimą su specifinėmis šabloninių molekulių įspaudų vietomis, kurios imituoja tikslinės molekulės formą ir leidžia pasirinktinai ją atpažinti ir užfiksuoti (Pav.1) [1-2].

Nors jutiklių sandaros būna įvairios, polimerai jutikliui gali suteikti didelį atrankumą, jautrumą, ilgalaikį stabilumą, pritaikomumą įvairioms molekulėms, bei pakartotinį naudojimą.

Elektrai laidūs polimerai, tokie kaip polipirolas, polianilinas, gali būti polimerizuoti ne tik cheminiais, bet ir elektrocheminiais metodais, taip kontroliuojant nusodinamo sluoksnio savybes [1,3]. Polipirolas yra vienas iš dažniausiai naudojamų elektrai laidžių polimerų jutiklių gamyboje, o jo peroksidavimas suteikia galimybę lengviau pašalinti šablonines molekules, įsiterpusias sluoksnyje [4].

Šiame tyrime pristatomas modelinės MIP sistemos pritaikymas mažos molekulinės masės junginio analizei. Nesudėtinga sintezė, greitas nustatymas ir MIP grįstų jutiklių pritaikomumas įvairioms molekulėms suteikia puikias ateities perspektyvas farmacijos, biomedicinos, aplinkos tyrimų bei kitose srityse, kuriose reikalinga mėginių analizė.



Pav.1. MIP paruošimo schema: (1) šabloninių molekulių įspaudimas ir tada jų išplovimas; (2) analitės aptikimo procesas tiriant mėginį [2].

Literatūra

1. V. Ratautaitė, R. Bogužaitė, E. Brazys, A. Ramanavičienė, E. Ciplys, M. Juozapaitis, R. Slibinskas, M. Bechelany, A. Ramanavičius. *Electrochimica Acta*. **403**, 139581 (2022).
2. G. Pilvenytė, V. Ratautaitė, R. Bogužaitė, S. Ramanavičius, C.F. Chen, R. Viter, A. Ramanavičius. *Biosensors*. **13(6)**, 620 (2023).
3. S. Ramanavičius, A. Ramanavičius. *Polymers*. **13(1)**, 49 (2021).
4. S. Ramanavičius, A. Jagminas, A. Ramanavičius. *Polymers*. **13(6)**, 974 (2021).

CNC-BASED BINDERS FOR AQUEOUS NA-ION BATTERIES

Nadežda Traškina¹, Jurgis Pilipavičius¹, Jurga Juodkazytė¹, Linas Vilčiauskas¹

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

In recent times, growing environmental awareness has redirected scientific focus towards the creation of innovative, sustainable energy storage solutions that are environmentally friendly and safe for operation. The most thoroughly investigated and ever-advancing technology, lithium ion batteries (LIBs), despite their high energy and power densities, suffer from lithium's scarce presence in geopolitically sensitive areas and highly unstable prices.¹ As a result, sodium ion batteries (SIBs), especially their aqueous counterparts, have emerged as a promising alternative to LIBs due to sodium's superiority in terms of abundance in nature and elimination of highly toxic and flammable organic electrolyte.²

A typical SIB electrode consists of electrode active material, a conductive carbon and a polymeric binder.³ In many instances, binders do not yield any electrochemical advantages. Instead, they play a crucial role in connecting electrode components and ensuring adhesion to the current collector. The extensive studies have shown binding materials to influence ageing, capacity retention and Coulombic efficiency of an electrode.⁴ Currently, most of the water-based battery electrodes are processed using fluorine-containing polyvinylidene fluoride (PVDF). Although this predominant binder offers undeniable benefits, including excellent mechanical properties and resistance to oxidation-reduction, it is accompanied by several safety and environmental risks. The primary concerns stem from the inclusion of organic solvents, particularly the highly toxic N-methyl-2-pyrrolidone (NMP), in electrode formulations. Transitioning to aqueous electrode processing methods and the use of non-toxic polymeric binders would represent a significant stride towards the creation of genuinely sustainable solutions for electrochemical energy storage.⁵

Nanocellulose, with its potential for robust structural stability, versatile modification possibilities and straightforward extraction from natural sources, appears to be a promising alternative to PVDF in electrode production. Numerous significant benefits of nanocellulose include reduced manufacturing expenses, simplified disposal, and enhanced binding due to the presence of hydroxyl groups. Past research has successfully demonstrated the potential for crosslinking through esterification, connecting the carboxylic groups of citric acid with the hydroxyl groups in cellulose.⁶

The aim of this study is to establish a fast, noncomplicated and inexpensive procedure for fabrication of water-insoluble electrode film using nanocellulose and as a polymeric binder. The effect of crosslinking cellulose with glutaraldehyde and citric acid (CA) and subsequent treatment is investigated. Electrode properties such as elasticity, swelling, hydrophobicity and stability in aqueous electrolyte are characterized. The OR potentials of prepared electrodes and electrochemical activity of binder are evaluated by cycling voltammetry and the cycling stability of nanocellulose based electrodes was investigated by charge/discharge galvanostatic cycling in three-electrode cells where working and counter electrode are separated by a 1M NaNO₃ salt bridge.

References

1. Wu, M., Ni, W., Hu, J., & Ma, J. *Nano-Micro Letters*, **11**. (2019).
2. Bin, D., et al. *Adv. Energy Mater*, **8**, 1-31, (2018).
3. Lingappan, N., Kong, L., & Pecht, M. *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **147**, 111227, (2021).
4. Guy, D., Lestriez, B., & Guyomard, D. *Adv. Mater*, **16**, 553-557, (2004).
5. Bresser, D., Buchholz, D., Moretti, A., Varzi, A., & Passerini, S. *Energy Environ. Sci*, **11**, 3096-3127, (2018).
6. Hoang, M. T., et al. *Environ. Sci. Pollut. Res*, **28**, 11869-11881, (2021).

APPLICABILITY OF ELECTROCHEMICAL METHODS TO DETERMINE THE REAL SURFACE AREA OF POROUS Cu 3D NANOSTRUCTURES

Birutė Serapinienė, Laima Gudavičiūtė, Asta Grigucevičienė, Algirdas Selskis,
Rimantas Ramanauskas

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

The production of hydrocarbons in CO₂ reduction using Cu electrodes has caused significant interest due to its high Faradaic efficiency and selectivity. The length scale at which the surface operates determines the active surface area required for specific applications. In electrochemical reactions, the key parameter is the electrochemically active surface area (ES_R) responsible for transferring charge to the species in the solution [1]. The extent to which the electrolyte can enter the pores and be impacted by the surface roughness is a determining factor. An exact assessment of the surface roughness of porous electrodes is essential for comparing different catalytic systems' behaviour. Precise knowledge of this parameter is therefore of significant importance. Not all studies concerning CO₂ electrochemical reduction on Cu 3D electrodes have given sufficient attention to S_R evaluation, whilst others have employed methods that are not necessarily applicable to the case of porous electrodes [2]. As our study is particularly interested in Cu ES_R values, we have employed electrochemical techniques for analysing the Cu 3D structure. Trassati and Petrii [3] have provided a comprehensive summary of a wide range of methods for the determination of the real surface area in different materials.

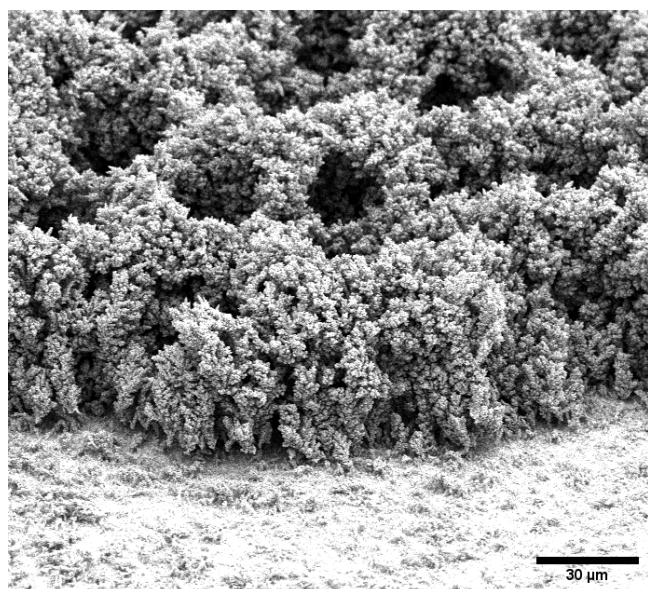


Fig. SEM image of Cu 3D electrode surface morphology.

The objective of this investigation was to evaluate the suitability of established methodologies employed in actual surface area measurement of Cu electrodes for the examination of 3D Cu nanostructure. The selected technique was also used to improve the deposition conditions of 3D Cu nanostructured electrodes.

The samples were analysed for their structural features employing SEM and an optical profiler. Further, electrochemical measurements were carried out using cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. The electrochemically active surface area was determined through underpotential deposition (UPD) of Tl and Pb monolayers as well as double-layer capacitance measurements. The results demonstrate that both methods produce similar outcomes for non-porous Cu electrodes. For Cu 3D nanostructures, however, the evaluation method has a strong influence on the results. In contrast to the UPD method, double layer capacitance measurements show significantly higher and more reliable values for the electrochemically active surface area. The primary explanation for the observed differences is that the complex spatial framework of the 3D Cu layer limits the formation of a uniform monolayer during the UPD process [4].

References

1. Nitopi, S.; Bertheussen, E.; Scott, S.B.; Liu, X.; Engstfeld, A.K.; Horch, S.; Seger, B.; Stephens, I.E.L.; Chan, K.; Hahn, C.; et al., *Chem. Rev.*, 119, 7610–7672, (2019).
2. Giri, S.D.; Sarkar, A., *Adv. Powder Technol.*, 29, 3520–3526, (2018).
3. Trasatti, S.; Petrii, O.A., *Pure Appl. Chem.*, 63, 711–734, (1991).
4. Serapiniene, B.; Gudavičiūtė, L.; Tutlienė, S.; Grigucevičienė, A.; Selskis, A.; Juodkazytė, J.; Ramanauskas, R., *Coat.*, 13, 1335, (2023).

INTEGRATED PERSONAL EXPOSURE AND DEPOSITION OF BLACK CARBON ON HUMAN LUNGS

Abdullah Khan, Lina Davulienė, Sergej Šemčuk, Kamilė Kandrotaitė, Agnė Minderytė, Mehri Davtalab, Ieva Uogintė, Martynas Skapas, Vadimas Dudoitis, Steigvilė Byčenkienė

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

The particle number concentration (PNC), particulate matter (PM₁) and black carbon (BC) mass concentration limits are not available from standard air quality monitoring networks as well as for indoor level standards in many countries [1]. Total personal exposure is often disproportionately affected by the relatively short amount of time spent in office spaces and commuting trips.

In this study, real-time measurements of PNC, PM₁, and BC mass concentrations in the office and during commuting trips were performed to assess real-time employee personal exposure.

Urban environments are very complex due to the different emission sources and their emission activities; therefore, a combination of mobile and stationary measurements allows for a better understanding of their dynamics and employee exposure, constituting a better predictor of health effects. Mobile measurements at the street level showed that the BC mass concentrations were the highest during peak hours, reaching up to 7.14 µg/m³ at hotspots. The hourly mean BC mass concentration in March 2022 at the urban background station ranged from 0.30 to 9.01 µg/m³, with traffic-related BC (BC_{tr}) accounting for 66% of the total BC mass concentration.

The highest minute deposition dose of BC (MDDBC) occurred during the morning rush hour at 53 ng/min and in the evening at 26 ng/min. These findings reveal the impact of traffic exhaust emissions on aerosol particles, particularly on fine particles. Marked differences were found between the MDDBC in the office and the vehicle micro-environment. The deposition dose in the office micro-environment was 11 ng/min. The results from the multi-path particle dosimetry model indicate that almost half of the inhaled BC mass 39.2% was deposited in the lowest part of the respiratory system, the lung-pulmonary region.

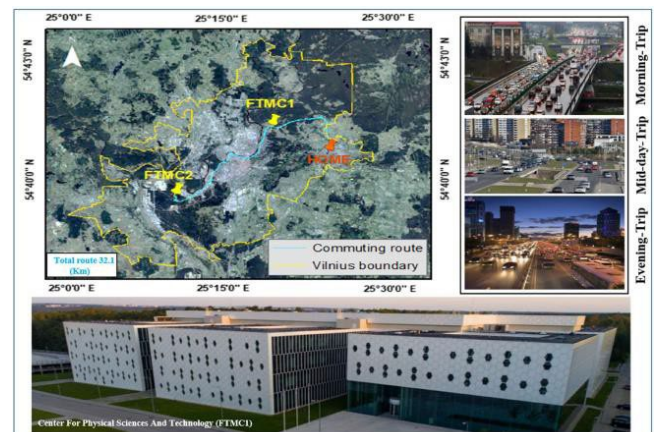


Fig. 1 Map of the study area indicating the fixed sampling site (Center for Physical Sciences and Technology FTMC1), the sub-office (Center for Physical Sciences and Technology FTMC2), the home site, and the mobile monitoring route (light blue) in Vilnius, Lithuania.

References

1. Alonso-Blanco, Elisabeth, et al. "Real-Time Measurements of Indoor-Outdoor Exchange of Gaseous and Particulate Atmospheric Pollutants in an Urban Area." *International Journal of Environmental Research and Public Health* 20.19 (2023): 6823.

SEASONAL VARIATIONS OF AEROSOL BLACK CARBON CONCENTRATION IN VILNIUS

Daria Pashneva, Agnė Minderytė, Lina Davulienė,
Vadimas Dudoitis, Steigvilė Byčenkienė

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

The significant impact of aerosol black carbon (BC) concentration level on regional climate, ecosystems and human health requires continuous research for a comprehensive understanding of BC and its implications [1] [2] [3].

The aim of the study was to investigate the annual variation in BC mass concentration, to identify seasonal dependencies and to determine the irrelationship with meteorological factors and air pollutants (NO_x and PM_{10}).

The BC mass concentration sampling campaign was conducted in the urban region of Vilnius. Measurements were taken from 1 June 2021 to 31 May 2022. The aethalometer (A MageeScientific Company Aethalometer model AE33) provided continuous real-time measurements of BC mass concentration. The hourly mean values of the BC mass concentration were used for the analysis. The optical transmission of carbonaceous aerosol particles was measured sequentially at 7 wavelengths ($\lambda = 370, 470, 520, 590, 660, 880$ and 950 nm), where the BC mass concentration was derived from the light absorption coefficient (σ_{ab}) at a 880 nm wavelength. Hourly mean of primary meteorological parameters (temperature (T , $^{\circ}\text{C}$), relative humidity (RH, %), wind speed (WS, m/s), pressure (P , hPa) and wind direction (WD, degrees)) and the mass concentrations of main pollutants (NO_x and PM_{10}) were collected at the meteorological station located 8.5 km away from FTMC.

The mean annual concentration of BC_{total} was $0.89 \mu\text{g}/\text{m}^3$ with a standard deviation (SD) of $0.99 \mu\text{g}/\text{m}^3$. The average fractions of BC_{bb} for the four seasons (summer, autumn, winter, and spring) were 0.41, 0.22, 0.30, and 0.27, respectively. The results indicate that the highest BC level during all seasons were observed during periods of calm wind ($< 0.5 \text{ m/s}$), suggesting that locally emitted air pollutants were not dispersed. In this study, BC concentration was found to have a positive relationship with NO_x ($r = 0.64$), PM_{10} ($r = 0.36$), P ($r = 0.25$) and RH ($r = 0.07$) and slightly negative relationship with T ($r = -0.30$), WS ($r = -0.20$), and WD ($r = -0.11$). The diurnal summaries of BC concentration for each season are shown in Fig. 1. The individual lowest average for each day occurred in the summer.

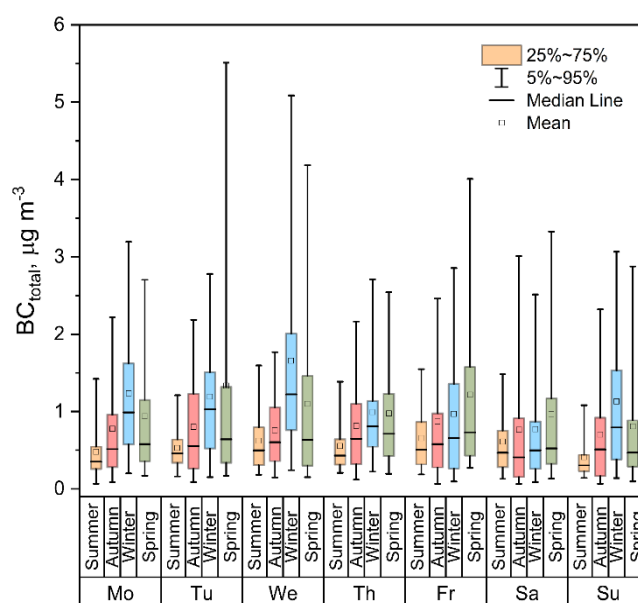


Figure 1. Box-plots showing BC seasonal variation during weekdays for the whole sampling period

References

- 1 Y. Zhang *et al.*, *Atmos. Environ.*, vol. 243, Dec. 2020.
- 2 U.S. EPA, *Dep. Inter. Environ. Relat. Agencies Appropriations Act, 2010*, no. March, p. 388, 2012.
- 3 B. Li *et al.*, *Environ. Pollut.*, vol. 267, Dec. 2020.

CARBONACEOUS AEROSOL PARTICLE SOURCES IN MANILA NORTH PORT AND URBAN ENVIRONMENT

Touqeer Gill¹, Simonas Kecorius^{1,2}, Kamilė Kandrotaitė¹, Vadimas Dudoitis¹, Leizel Madueno³, Alfred Wiedensohler³, Steigvilė Byčėnienė¹ and Kristina Plauškaite¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: touqeer.gill@ftmc.lt

²Helmholtz Zentrum München – German Research Center for Environmental Health, Neuherberg, Germany

³Leibniz-Institute for Tropospheric Research (TROPOS), Leipzig, Germany

The 2021 World Health Organization (WHO) report highlights a global crisis: an astounding 99% of the world's population is exposed to air quality that surpasses WHO's recommended limits, burdened by elevated pollutant levels [1]. This persistent issue is most prominent in urban areas, where a significant portion of fine particulate matter (PM_{2.5}) comprises carbonaceous aerosol particles [2]. These particles, known as Black Carbon (BC), originate primarily from combustion processes like biomass burning and internal combustion engines, posing severe health risks. To effectively tackle this ongoing problem, it's imperative to gain a comprehensive understanding of BC sources, their scale, and source-specific concentrations, especially in economically developing nations. Raising awareness about this persistent environmental crisis is the crucial first step toward achieving sustainable development.

As part of the "Transdisciplinary Approach to Mitigate Emissions of Black Carbon" (TAME-BC) project, an extensive field study was conducted in the urban areas of Metro Manila, Philippines. This investigation carried out at two distinct locations: the East Avenue roadside in Quezon City (QCG site) and Manila's North Port (Port site). During a three-month period from December 2019 to February 2020, the research focused on measuring the mass concentration of equivalent black carbon (eBC) using a 7-wavelength Aethalometer (AE-31). The primary objective was to assess the extent of air pollution in Metro Manila, with a specific emphasis on identifying sources of eBC and examining variations in mass concentration. Through a detailed analysis of wavelength-dependent absorption coefficients, the study revealed that at the Port site, transportation-related sources (eBC_{TR}) and biomass burning (eBC_{BB}) contributed approximately 86% and 14%, respectively, to the total eBC mass. In the case of Quezon City, these contributions were 80% and 20%, respectively (Fig. 1a, 1b).

Fig. 1c and 1d present a time series analysis depicting the dynamic changes in light absorption coefficients of equivalent black carbon (eBC) and brown carbon (BrC) at port and QCG sites.

Notably, the light absorption coefficient of BrC at 370 nm ($b_{abs,BrC}$) displayed spatial variability, ranging from 0.02 to 0.80 Mm⁻¹. At the port site, eBC made a substantial contribution of 80%, surpassing BrC 20%, while a similar trend was observed at the QCG site, with eBC accounting for 78% compared to BrC 22%.

The diurnal trend of eBC_{TR} at both sites (QCG and Port) showed higher mass concentration levels during the morning hours (6-8h) and lower levels during midday (11-13h). Similarly, eBC_{BB} mass concentrations exhibit a similar diurnal trend at both sites, with higher concentration between 6-8h and lower concentration between 11-13h (Fig. 2).

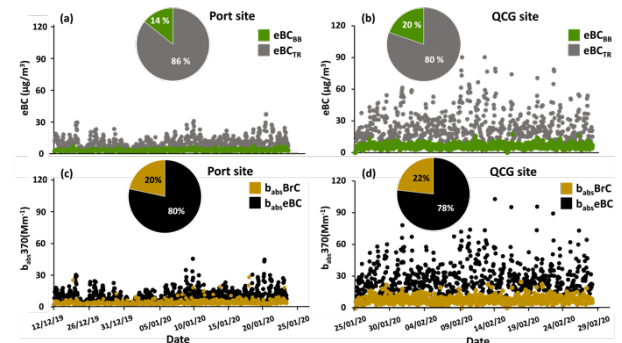


Fig. 1. Time series and contributions of the hourly average eBC_{TR} and eBC_{BB} to the total eBC, at port (a) and QCG (b) sites, as well as b_{abs} BrC and b_{abs} BC to the total b_{abs} (Mm⁻¹) at Port site (c) and QCG sites (d).

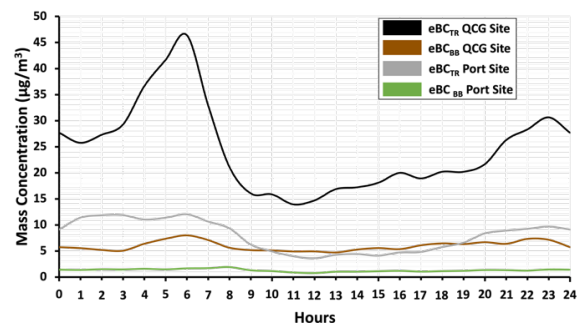


Fig. 2. eBC_{TR} and eBC_{BB} diurnal trend at Manila Port site and QCG site.

References

1. WHO Global Air Quality Guidelines. *Coast. Estuar. Process.* **2021**, 1–360.
2. Oh, H.J.; Ma, Y.; Kim, J. Human Inhalation Exposure to Aerosol and Health Effect: Aerosol Monitoring and Modelling Regional Deposited Doses. *Int. J. Environ. Res. Public Health*, **17**, 1–2, (2020).

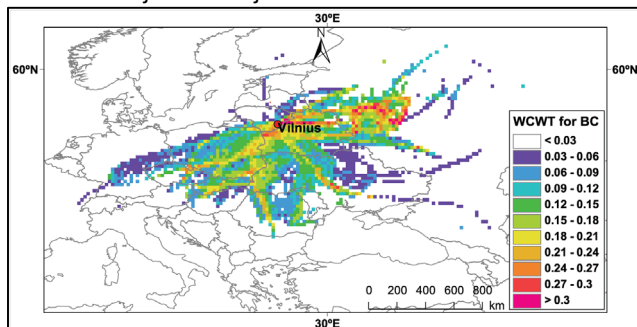
ORO TARŠOS ŠALTINIŲ KILMĖS NUSTATYMAS RECEPTORINIAMS TAŠKAMS MIESTO IR KAIMO APLINKOSE

Audrė Kalinauskaitė¹, Julija Pauraitė¹, Touqeer Gill¹, Abdullah Khan¹, Vidmantas Ulevicius¹, Kristina Plauškaitė-Šukienė¹, Steigvilė Byčenkienė¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Aplinkotyros skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: audre.kalinauskaite@ftmc.lt

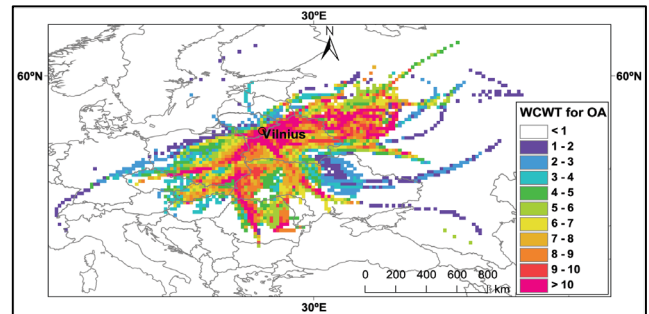
Pasitelkus pažangias oro kokybės stebėjimo ir modeliavimo technologijas, randama vis daugiau įrodymų, kad tolimoji oro masių pernaša gali žymiai prisidėti prie oro taršos padidėjimo įvairiose pasaulio vietose. Tad žinios apie tolimosios oro masių pernašos indėlį į oro kokybę padeda suprasti oro taršos pobūdį tam tikruose regionuose. Tai leidžia planuoti naujas arba tobulinti esamas oro taršos valdymo priemones [1].

Pirmojo tyrimo tikslas – nustatyti 2014 m. sausio – vasario mėn. į Vilnių (54°38' N, 25°10' E, 197 m a.s.l.) atkeliavusių oro masių, turėjusių didesnes juodosios anglies (BC) ir organinių submikroninių aerozolio dalelių (OA) koncentracijas, trajektorijas ir potencialius taršos šaltinių regionus. Antrojo tyrimo tikslas – nustatyti į Rūgštelį (55°27'N, 26°00'E, 170 m a.s.l.) atkeliavusių oro masių, turėjusių didesnes OA koncentracijas, trajektorijas ir potencialius taršos šaltinių regionus, apimant pavasario – rudens sezonus 2013, 2014, 2016, 2018 ir 2019 m. Abiejų tyrimų tikslams pasiekti buvo naudojami 72 valandų atgalinių oro masių trajektorijų klasterinė analizė, potencialaus šaltinio indėlio funkcijos (Potential Source Contribution Function, PSCF) ir koncentracija normuotos trajektorijos (Concentration Weighted Trajectory, CWT) metodai, naudojantis TrajStat programa [2]. Klasterinė analizė atskleidė, kad didžiausios BC ir OA koncentracijos buvo stebimos oro masėse, atvykstančiose iš pietvakarių-pietų-pietryčių-rytų ir šiaurės rytų kryptų. Remiantis svertinėmis CWT (WCWT) analizės vertėmis (nuo 0,24 iki 0,4 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) (1 pav.), teritorijos vakarų Rusijoje, Baltarusijoje, Ukrainoje, Rumunijoje, Slovakijoje, Čekijoje ir Lenkijoje padarė didžiausią įtaką padidėjusiai BC koncentracijai Vilniuje.



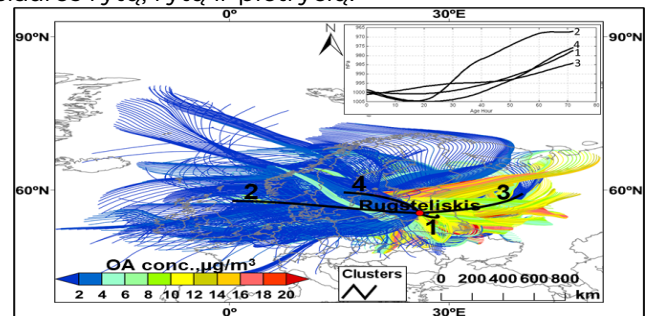
1 pav. WCWT vertės BC Vilniuje 2014 m. sausio ir vasario mėn.

Tuo tarpu galimi OA šaltiniai buvo plačiai paplitę – didžiausios WCWT vertės (9,7-16,37 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) buvo pastebėtos kai kuriose Vidurio, Pietų, Pietryčių ir Rytų Europos bei Vakarų Rusijos šalyse (2 pav.).



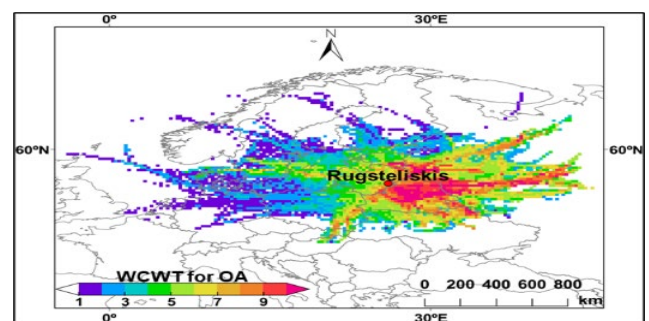
2 pav. WCWT vertės OA Vilniuje 2014 m. sausio ir vasario mėn.

Antrajame tyrime klasterinė analizė (3 pav.) atskleidė, kad pagrindinės oro masių, kuriose vidutinė OA koncentracija buvo didesnė, trajektorijų kryptys buvo šiaurės rytų, rytų ir pietryčių.



3 pav. 72 val. oro masių atgalinės trajektorijos su OA koncentracijomis ir trajektorijų klasteriai (2018 m.).

Tuo tarpu oro masių trajektorijos iš šiaurės vakarų ir vakarų lėmė žemiausias OA koncentracijas. Be to, WCWT rezultatai (4 pav.) parodė plačiai pasklidusias potencialias OA taršos šaltinių teritorijas Latvijoje, Lenkijoje, Ukrainoje, Baltarusijoje ir Rusijoje. Jos labiausiai prisidėjo prie padidėjusios OA koncentracijos receptoriniame taške.



4 pav. WCWT vertės OA (2018 m.).

Literatūra

1. P.Pongkiatkul, and N.T.K. Oanh, Atmos. Res. **85**, 1 (2007).
2. Y.Q. Wang, X.Y. Zhang, and R.R. Draxler, Environ. Model. Softw. **24**, 8 (2009).

STABIILIŲŲ IZOTOPŲ SANTYKIO IR RADIOANGLIES METODŲ PRITAIKYMAS KIETŲJŲ DALELIŲ TARŠOS ŠALTINIŲ CHARAKTERIZAVIMUI

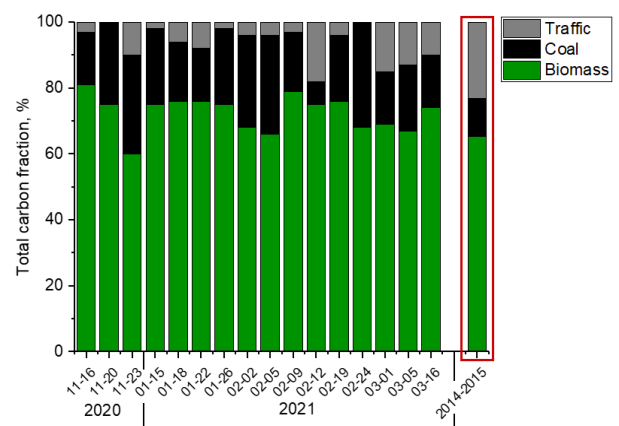
Laurynas Bučinskas¹, Inga Garbarienė¹, Agnė Mašalaitė¹, Justina Šapolaitė¹,
Žilvinas Ežerinskis¹, Dalia Jasinevičienė², Vidmantas Remeikis¹, Andrius Garbaras¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: laurynas.bucinskas@ftmc.lt

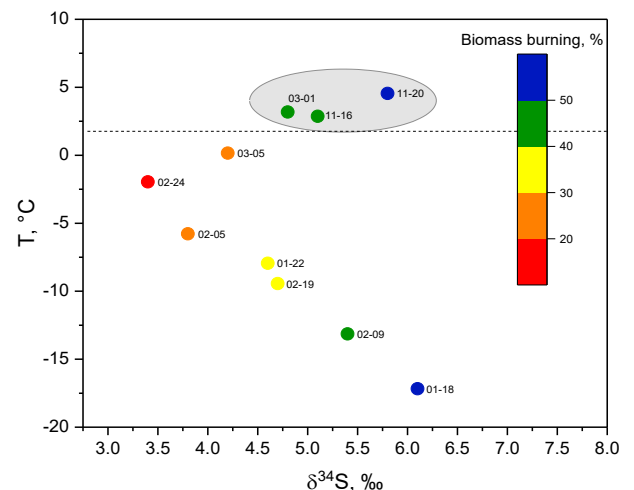
²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Aplinkotyros skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

Antropogeninės taršos kietosiomis dalelėmis lygiai gali drastiškai pakisti pritaikius valstybines taršos mažinimo strategijas ar dėl pandeminių apribojimų. Šiame darbe bus pristatytas stabilųjų anglies ir sieros izotopų ir radioanglies analizės metodų pritaikymas KD₁ (kietosios dalelės su mažesniu nei 1 μm diametru) taršos šaltinių charakterizavimui miesto aplinkoje. Bandiniai buvo renkami žiemos metu nuo 2020-11-11 iki 2021-10-21 Vilniuje, Lietuvoje kai tuo metu buvo įvestas COVID-19 karantinas. Bandiniams buvo atlikta anglies (¹⁴C/¹²C, ¹³C/¹²C) ir sieros izotopų (³⁴S/³²S) analizė, siekiant kiekybiškai įvertinti iškastinių ir neiškastinių emisijų KD₁ įnašus. Taip pat, buvo atlikti visos anglies (TC, total carbon) ir sulfatų koncentracijų matavimai. Šaltinių charakterizavimas atskleidė tris pagrindinius anglingųjų KD₁ emisijos šaltinius (1 pav.): biomasės deginimą (73 ± 5 %), anglies deginimą (21 ± 6 %) ir transporto emisijas (6 ± 5 %). Anglies koncentracijos buvo tame pačiame ruože prieš COVID-19 karantiną kaip ir jo metu, tačiau pandemijos metu pakito anglies izotopų santykiai (δ¹³C) ir tirtų šaltinių pasiskirstymas. Transporto emisijos dalis buvo vidutiniškai 2,3 karto mažesnė karantino metu.

Sulfatų KD₁ svarbiausieji šaltiniai buvo anglies deginimas (60 ± 10 %) ir biomasės deginimas (40 ± 10 %). Tačiau žiemą, biomasės deginimo indėlis sustiprėja ir tampa vyraujančiu vietiniu sulfatų KD₁ šaltiniu Lietuvoje, susijusiu su padidėjusia namų ūkio šildymo veikla (2 pav). Tačiau Vilnių pasiekianti anglies degimo emisijų KD₁ tarša buvo labiau nulemta tolimosios oro masių pernašos iš kaimyninių šalių.



1 pav. Transporto, biomasės ir anglies deginimo emisijų anglingųjų KD₁ indėliai. Raudonai pažymėta 2014 - 2015 metų šaltinių frakcijos [1].



2 pav. δ³⁴S priklausomybė nuo vidutinių temperatūrų. Spalvų gradientas vaizduoja biomasės degimo frakcijas.

Literatūra

- [1] I. Garbarienė, J. Šapolaitė, A. Garbaras, Ž. Ežerinskis, M. Pocevičius, L. Krikščikas, A. Plukis, V. Remeikis. „Origin identification of carbonaceous aerosol particles by carbon isotope ratio analysis,” *Aerosol Air Qual Res*, 2016, doi: 10.4209/aaqr.2015.07.0443.

ATMOSFERINIO METANO EMISIJŲ IŠ TAŠKINIO ŠALTINIO TYRIMO SISTEMA DRONŲ PLATFORMOJE

Laurynas Butkus, Šarūnas Vaitekoniš, Artur Plotnikov, Elena Lagzdina, Jevgenij Garankin, Žilvinas Ežerinskis, Artūras Plukis, Vidmantas Remeikis

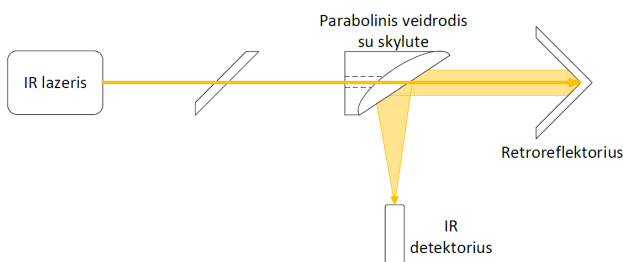
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: laurynas.butkus@ftmc.lt

Intensyvi pramonės, žemės ūkio ir transporto plėtra lemia technogeninės veiklos produktų kaupimąsi aplinkoje. Dėl didėjančių šiltnamio efektą sukeliančių dujų (metano, anglies dioksido ir kt.) koncentracijų jau dabar pastebimi klimato kaitos padariniai. Moksliniai tyrimai, sprendžiantys klimato kaitos švelninimo iššūkius ir sukuriantys mokslu pagrįstas prielaidas naujoms aplinkos monitoringo sistemoms ir technologijoms, tampa vis aktualesni.

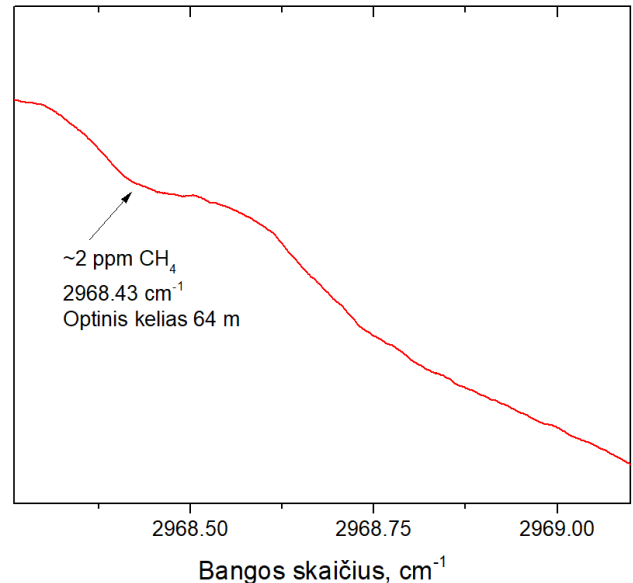
FTMC BTS buvo sukurtos ir šiuo metu tobulinamos dvi naujos dronų sistemos, kurių pagalba galima įvertinti iš taškinio šaltinio į atmosferą patenkančio metano emisijas. Pirmąją sistemą (1 pav.), skirtą nustatyti metano koncentracijų pasiskirstymą atmosferoje aplink taškinį emisijos šaltinį, sudaro du bepiločiai orlaiviai. Ant didesniojo bepiločio yra pakabinta optinė CH₄ registravimo sistema, kurią sudaro IC (angl. interband cascade) lazeris, parabolinis veidrodinis ir detektorius, sumontuoti ant lazerio stabilizavimo ir nutaikymo sistemos. Ant mažesniojo drono yra sumontuotas retroreflektorius.

Optinės sistemos veikimo principas:

- 1) iš IC lazerio skindanti IR spinduliuotė yra nukreipiama į retroreflektorių, esantį ant mažesniojo bepiločio orlaivio;
- 2) nuo retroreflektoriaus atsispindėjęs šviesos pluoštelis grįžta atgal link didžiojo drono. Pataikęs į parabolinį veidrodį šviesos pluoštelis yra nukreipiamas ir sufokusuojamas į detektorių.
- 3) detektoriumi yra registruojama metano sugertis ties 3337 nm bangos ilgiu (2 pav.). Optinis kelias yra lygus dvigubam atstumui tarp bepiločių ir gali būti keičiamas priklausomai pagal poreikį.



1 pav. Optinės sistemos, skirtos CH₄ koncentracijų nustatymui atmosferoje, schema.



2 pav. CH₄ sugerties spektras, užregistruotas pažemės atmosferoje, kai atstumas tarp lazerio ir retroreflektoriaus buvo 32 m.

Atmosferinio metano izotopinės analizės atlikimui kuriama nauja sistema bepiločių orlaivių platformoje. Žinant CH₄ koncentracijų pasiskirstymą aplink taškinį šaltinį planuojama paimti oro mėginius iš tam tikrų taškų ir atlikti anglies izotopinę (¹²C, ¹³C, ¹⁴C) analizę metane. Ši sistema bus įmontuota ant drono ir siurbis ore esantį metaną, kuris pasinaudojant Pd katalizatoriumi bus oksiduotas į CO₂. ¹²C ir ¹³C izotopinė analizė bus atliekama realiu laiku registruojant deginimo etape susidariusių ¹²CO₂ ir ¹³CO₂ sugertį (ties 4,3 μm). Katalitinio degimo metu susidaręs CO₂ galiausiai surenkamas ceolitinėje gaudyklėje, kad vėliau laboratorinėmis sąlygomis naudojant greitintuvo masių spektrometrą atliktų ¹⁴C analizę.

Ši kompleksinė sistema leidžia charakterizuoti metano emisijas iš taškinio šaltinio bei, pasinaudojant teršalų sklaidimo modeliu, prognozuoti tolimesnį teršalų sklaidimą atmosferoje.

STACIONARIOS EULERINĖS GARDELĖS PANAUDOJIMAS GREITAI GRĮŽTAMOJO RYŠIO INJEKCIJAI SPH AKTYVIŲJŲ GALAKTIKŲ MODELIUOSE

Matas Tartėnas

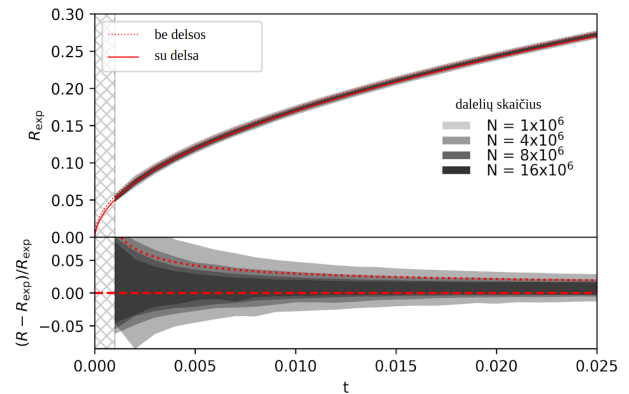
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: matas.tartenas@ftmc.lt

Galaktikų ir galaktikų centrų mastelius sieja supermasyvių juodųjų skylių (SMJS) kuriamas grįžtamasis ryšys (GR) [1]. Šis epizodiškas galaktikos aktyvumas per ilgą laiką visoje galaktikoje sumažina žvaigždėrara, tačiau yra užuominų, kad aktyvaus galaktikos branduolio aplinkoje žvaigždėdara gali ir išaugti. Tam, kad teisingai interpretuotume vis gausesnius galaktikos centrų stebėjimus reikalingi ir vis realistiškesni modeliai, nuosekliai įtraukiantys įvairius reikšmingus fizikinius procesus.

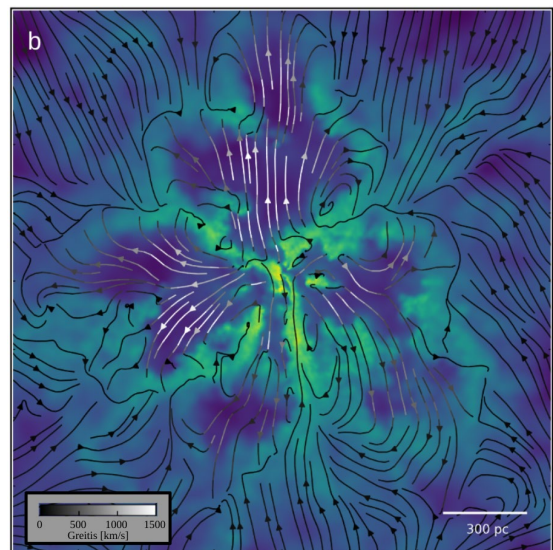
Šiuo metu grįžtamąjį ryšį išplėstų dalelių hidrodinamikos (SPH) modeliuose galime įtraukti keliais būdais. Paprasčiausias - sferinė energijos injekcija [2]. Šis intuityvus metodas išdalina per laiko žingsnį sukauptą energiją artimiausioms šaltinio kaimynėms. Deja, metodas nėra tinkamas, kai tyrimui svarbu detali dujų, supančių šaltinį, struktūra ar kai jų išsidėstymas smarkiai netolygus [3]. Plačiai naudojamas ir sudėtingesnis, diskrečiais energijos paketais (DEP) grįžtas metodas [4]. Jis yra gerokai lankstesnis - leidžia atsižvelgti į galimą GR sklidimo greitį ar netolygumą. Tačiau jis taip pat reikalauja gerokai daugiau skaičiavimo resursų. Mes sukūrėme alternatyvų greitą GR injekcijos metodą gridWind, kuriame neprarandamas DEP suteikiamas lankstumas, tačiau gerokai sumažinamas skaitmeninių resursų poreikis. gridWind metodo esmė - SMJS (ar kito šaltinio) kuriamo vėjo propagavimas radialiai sferine gardele išorės kryptimi pastoviu greičiu $v \sim 0.1c$. Vėjo-dalelės sąveikos srityje dalelei pridama energija ar judesio kiekis proporcingas tos dalelės indėliui į bendrą tankio lauką. Naudojant šį metodą mes galime keisti vėjo parametrus priklausomai nuo laiko ar krypties, pavyzdžiui, sekti kūgiškus vėjo gūsius sklindančius iš plokštumos kryptį keičiančio akrecinio disko.

Šiuo metu gridWind metodas implementuotas hibridiniame n-kūnų/SPH kode Gadget-3 [5]. Pav. 1 pavaizduotas judesio kiekio GR palaikomos sferos plėtimasis homogeniškoje dujose. Naudojami gridWind metodą gauname rezultatus, palyginamus su DEP [4]. Be to, metodas leidžia naudoti didesnę dalelių skaičių, negu būtų praktiška naudojant DEP dėl milžiniško sąveikų skaičiaus. Nors naudojama stacionari gardele, metodas geba atkurti sudėtingas dujų struktūras, bei atkuria realistiškas tēkmes aktyvaus galaktikos

branduolio (AGN) modelyje atvaizduotame tankio žemėlapyje pav. 2.



1 pav. sferinės ertmės plitimas dėl judesio kiekio forma įvedamo grįžtamojo ryšio homogeniškoje aplinkoje. Brūkšninė raudona linija rodo analitinį sprendinį įskaičius baigtinį vėjo greitį [4].



2 pav. AGN sukuriama tēkme po 1 mln. trukusio aktyvumo epizodo. Netolygumai dėl turbulencijos.

Literatūra

1. M. Gaspari, F. Tombesi and M. Cappi, Nat. Astron. **4**, 10 (2020).
2. V. Springel, T. Di Matteo and L. Hernquist, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **361**, 776 (2005).
3. K. Zubovas, M. A. Bourne and S. Nayakshin, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **457**, 496 (2016).
4. S. Nayakshin, S. Cha and A. Hobbs, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **397**, 1314 (2009).
5. V. Springel, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **364**, 1105 (2005).

ADAPTIVE APERTURE PHOTOMETRY OF STAR CLUSTERS

Eimantas Kriščiūnas, Karolis Daugevičius, Rima Stonkutė, Vladas Vansevicius

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

Star clusters play a pivotal role in understanding galaxy formation and evolution. Detailed studies in the Milky Way are limited due to interstellar extinction. Therefore, gaining a more profound insight into the global process of star formation necessitates the examination of neighboring stellar systems that bear a resemblance to the Milky Way in terms of their structure and evolution. A good candidate for such studies is the Andromeda (M31) galaxy, where star cluster observations with high photometric accuracy allow us to determine causes and consequences of star formation processes and their impact on the evolution of stellar population across the galaxy. Star cluster studies in the M31 galaxy has been made possible by the extensive Panchromatic Andromeda Treasury Program (PHAT; Dalcanton et al. 2012) survey performed with the *Hubble* Space Telescope (HST). A large sample of PHAT survey star clusters are published by Johnson et al. (2015). These objects reside in diverse environments, from extremely crowded central parts of the galaxy to rather sparse outskirts.

The aim of this work is to present adaptive aperture photometry results, where we account for the problems arising due to bright field stars. We use the same two- aperture method as in Naujalis et al. (2021): (i) standard aperture approach to measure 'total' (T) fluxes and magnitudes; (ii) adaptive aperture approach to measure central parts of star clusters by applying aperture corrections, based on the *F475W* passband measurements, to other passbands: 'colour' (C) fluxes and magnitudes. By selecting C apertures, we avoid bright field stars, thus ensure consistent colour indices. In Fig. 1, we show two- colour diagrams constructed from T aperture (Fig. 1a) and C aperture photometry (Fig. 1b) results, compared to the stochastic cluster models (grey in the background). Most star clusters align well with the models drawn in the background. However, the C photometry results are more compatible with the stochastic star cluster models suggesting a better quality of the subsequent parameter determination procedure and study of M31 evolution.

References

1. J. J. Dalcanton, B. F. Williams, D. Lang, et al., *Astrophys. J. Supplement Series*, **200**, 18 (2012).
2. L. C. Johnson, A. C. Seth, J. J. Dalcanton, et al., *Astrophys. J.*, **802**, 127 (2015).
3. R. Naujalis, R. Stonkutė, and V. Vansevicius, *Astron. Astrophys.*, **654**, A6 (2021).

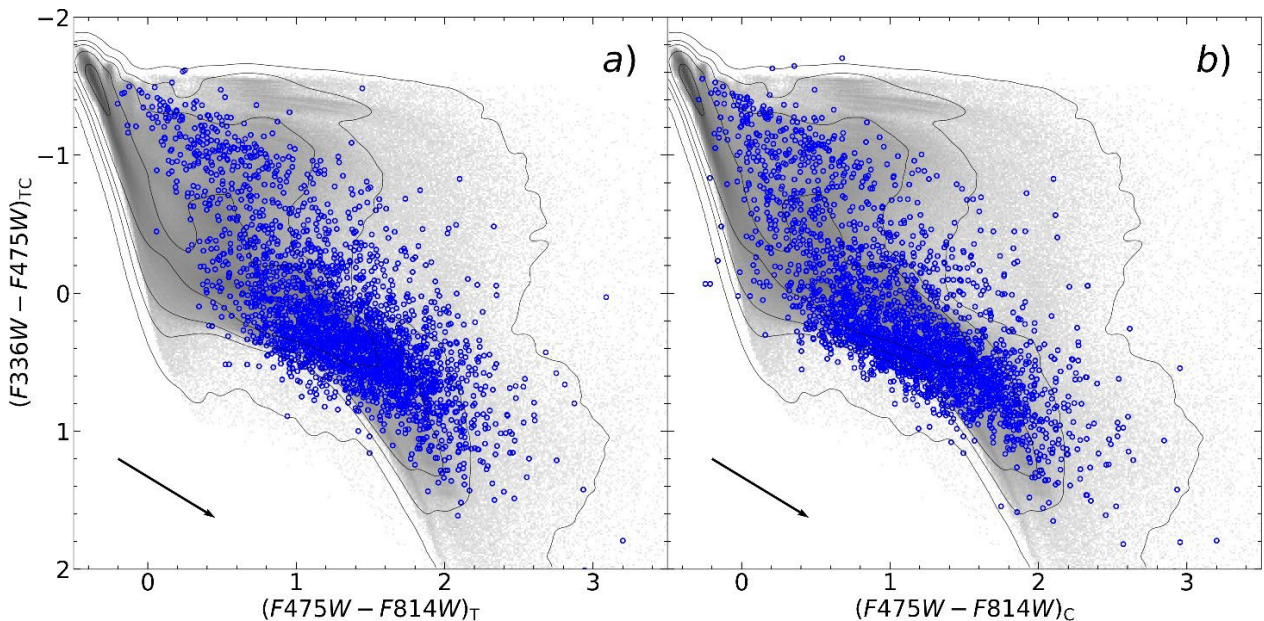


Fig. 1. Two-colour diagrams of star clusters over-plotted on the stochastic models. The masses of cluster models (grey areas) are from 10^2 to $10^5 M_{\odot}$. The subscript TC indicates that colour index is based on T and C aperture photometry in panels (a) and (b), respectively. Arrows indicate extinction vectors of $A_V = 1$, assuming the standard Milky Way extinction law.

STIPRIOSIOS SĄVEIKOS RĖŽIMAS TARP PAVIRŠINIŲ PLAZMONŲ IR RODAMINO 6G MOLEKULIŲ

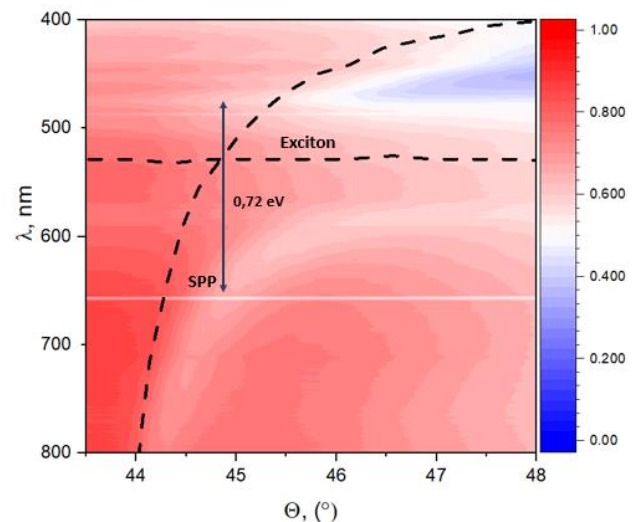
Povilas Jurkšaitis¹, Justina Anulytė¹, Zigmas Balevičius¹

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

Stipriosios sąveikos režimas per pastaruosius kelerius metus sulaukė ypač daug dėmesio. Skirtingų optinių ir medžiagos sužadinių tarpusavio sąveika atveria naujas galimybes cheminių reakcijų valdyme [1], biosensoriuose [2,3], plazmoniuose lazeriuose [4], kvantinės informacijos apdorojime [5,6]. Stiprioji šviesos – medžiagos sąveika atsiranda kai du sąveikaujantys osciliatoriai keičiasi energija greičiau negu įvyksta nuostoliai sistemoje. Šiame režime susiformuoja naujos būsenos – poliaritonų kvazidalelės, kurios pasižymi modifikuota dispersija.

Buvo atlikti stipriosios sąveikos modeliavimo ir eksperimentiniai darbai tarp paviršinių plazmonų (SPP) susiformavusių metalo dangose ir Rodamino 6G molekulių sluoksnio PMMA matricoje. Sumodeliuotos dispersinės kreivės stipriosios sąveikos režime buvo modifikuotos ir skyrėsi nuo pavienių SPP ir Rodamino dažo dispersijų. Sumodeliuotos sistemos optiniam atsakui nustatyti buvo panaudota visiško vidaus atspindžio konfigūracija. Sumodeliuoti sugerties spektrai parodė aiškius Rabi skilimo požymius dėl p-polarizuotos šviesos, o tai rodo, kad sistema veikia stipriosios sąveikos režime.

Visiško vidaus atspindžio elipsometrija buvo pasitelkta siekiant eksperimentiškai nustatyti sugerties spektrus ir įvertinti pakitusias disperines priklausomybes. Taip pat buvo pasitelkta Fourier mikroskopija, siekiant įvertinti emisijos kampinę priklausomybę. Panaudotos skirtingos eksperimentinės technikos parodo, kad sistema yra stipriosios sąveikos režime.



Pav. 1. Visiško vidaus atspindžio elipsometrija išmatuotas 45 nm storios sidabro bandinys. Bandinys buvo padengtas su PMMA/R6G sluoksniu. Elipsometriniai matavimai parodo, kad bandinys pasižymi modifikuotomis disperinėmis kreivėmis.

Literatūra

- [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).

ATOMINIO STORIO SLUKSNIO NUSODINIMO TAIKYMAS GaSe KRISTALŲ SKAIDRINIMUI

Mantas Drazdys¹, Darija Astrauskytė¹, Ramutis Drazdys¹, Zigmas Balevičius¹

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

Pažangios lazerinės sistemos yra taikomos daugelyje mūsų gyvenimo sričių: fundamentiniuose moksluose, telekomunikacijose, medicinoje ir kt. Daugumos lazerinių sistemų pažanga yra įmanoma tik dėl gilesnio optinių komponentų savybių supratimo ir naujų inovatyvių sprendimų [1].

Įvairių tipų optiniai netiesiniai kristalai labai plačiai naudojami lazerinėse sistemose tiek generuojant lazerio spinduliuotę, tiek ją pertvarkant. Šių elementų optinės savybės dažnai apsprendžia lazerinių sistemų spinduliuotės kritinius galios parametrus ir spektrines charakteristikas, o jų optinis atsparumas ir stabilumas aplinkos poveikiui daro įtaką visos sistemos ilgaamžiškumui [2].

Galio selenidas (GaSe) yra puslaidininkis, kuris dėl unikalų optinių ir elektroninių savybių dažnai naudojamas lazerinių sistemų gamyboje mid-IR sričiai [3]. Tačiau GaSe kristalų naudojimas lazeriuose yra gana sudėtingas – kristalai yra labai jautrūs atmosferos drėgmei bei deguoniui, dėl ko degradoja kristalo paviršius ir, laikui bėgant, kinta jo optinės savybės. Taip pat, dėl didelio lūžio rodiklio, tokie kristalai pasižymi dideliais optiniais nuostoliais, nes didelė dalis šviesos tiesiog atsispindi nuo kristalo paviršių.

Šiais laikais, optinių dangų formavimo technologijos yra labai pažengusios ir pritaikomos stiklų, kristalų ar net polimerų optinių paviršių funkcionalizavimui [4]. Tačiau dangų formavimas ant GaSe kristalų yra taip pat sudėtingas. Pirma, GaSe kristalai pasižymi ne vienoda paviršiaus morfologija, todėl gali būti sunku nusodinti tolygias dangas, kurių storis ir optinės savybės turi būti vienodos visame kristalo paviršiuje. Antra, optinių dangų nusodinimui dažnai naudojami aukštatempūriniai ar didelių energijų joniniai procesai, kurie gali sukelti šiluminius įtempius dangoje bei įtempius kristalų struktūroje, o tai lemtų kristalo paviršiaus deformaciją, delaminaciją ar įtrūkimus, neigiamai paveikiant bendrą kristalo efektyvumą. Dėl šių priežasčių standartinės dangų nusodinimo technologijos, tokios kaip terminis garinimas elektronų pluoštu, magnetroninis ar jonapluošties dulkinimas nėra tinkamos GaSe kristalams skaidrinti.

Pastaraisiais metais suintensyvėjo atominio storio sluoksnio nusodinimo (ALD – angl. k. *atomic layer deposition*) taikymo optinių dangų gamybai tyrimai. ALD yra cheminio garų

nusodinimo (CVD – angl. k. *chemical vapour deposition*) atšaka, paremta ciklišku pirmtakų dozavimu į reaktorių, per vieną ciklą suformuojant atomo storio sluoksnį, todėl procesai pasižymi dideliu tikslumu ir atsikartojamumu. Šio proceso metu reaktoriuje padengiami visi optinių komponentų paviršiai, o dangų tankis bei struktūra nenusileidžia jonapluoščiu dulkinimu suformuotoms dangoms, todėl ALD dangos gali pagerinti optinių komponentų parametų stabilumą bei užtikrina komponento apsaugą nuo aplinkos poveikio [5]. Šiame darbe ALD metodas buvo taikomas GaSe kristalų skaidrinimui. Naudojant TFCalc programą buvo sumodeliuota vieno sluoksnio skaidrinanti danga. Atsižvelgiant į tai, jog ALD procesai pasižymi sąlyginai mažais sluoksnų augimo greičiais, pirmiausia, ALD metodo tinkamumo dangų formavimui ant GaSe kristalų patikrinimui buvo suformuota 280 nm storio Al₂O₃ danga. Atlikus kristalo inspekciją optiniu mikroskopu po dangos nusodinimo, buvo pastebėta, kad kristalas nebuvo pažeistas, todėl buvo nusodinta danga, pagal modeliavimo rezultatus turinti pasižymėti mažesniu nei 10% atspindžiu esant 40° krintančios spinduliuotės kampui 4 – 7 μm spektriniame diapazone. Suformavus dangą, inspekcijos optiniu mikroskopu metu kristalų paviršiuje buvo pastebėti 0,2 – 0,5 μm diametro dariniai primenantys pūsles. Viena iš galimų pūslių atsiradimo priežasčių yra dangos vidinių įtempių sukeltas GaSe kristalo lakšto atsilupimas. Nepaisant to, atlikus Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių (FTIR – angl. k. *Fourier-transform infrared*) spektroskopijos matavimus, buvo pastebėta, kad kristalo pralaidumas zonoje prie pūslės buvo padidintas daugiau nei 20%, o zonoje kurioje nėra pūslių – daugiau nei 30%.

Literatūra

1. J.Hecht, Opt. Eng. **49**, 9 (2010).
2. P.G.Schunemann, K.T.Zawilski, L.A.Pomeranz, D.J.Creedon, and P.A.Budni, J. Opt. Soc. Am. B **33**, 11 (2016).
3. N.B.Singh, D.R.Suhre, V.Balakrishna, M.Marable, R.Meyer, N.Fernelius, F.K.Hopkins, D.Zelmon, Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. **37**, 1 (1998).
4. S.O.Mbam, S.E.Nwonu, O.A.Orelaja, U.S.Nwigwe, X.-F.Gou, Mater. Res. Express **6**, 122001 (2019).
5. S.M.George, Chem. Rev. **110**, 1 (2010).

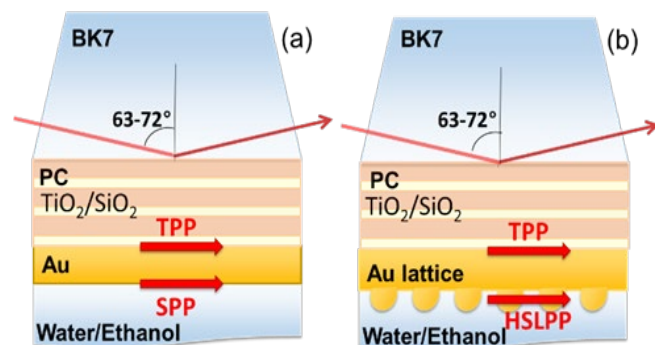
ITIN DIDELIO JAUTRUMO HIBRIDINIŲ PLAZMONŲ POLIARITONŲ MODŲ TAIKYMAS OPTINIAMS BIOJUTIKLIAMS

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

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

Optiniai jutikliai šiuo metu vis plačiau taikomi įvairių dujų ar bio-molekulių paviršinių procesų monitoringui. Optiniai metodai nereikalauja fizinio ar elektrinio kontakto su bandiniu. Dėl to optiniai metodai yra neardantys ir neinvaziniai, kas svarbu realaus laiko matavimams, dujų, cheminiams bei biologiniams tyrimams. Plazmoniniai rezonansai tai fotono ir elektrono medžiagoje paviršinė sąveika sudarant naują kvazibūsena plazmonų poliaritoną. Tokie rezonansai gali būti generuojami ant įvairių nanometrinių matmenų metalo-dielektriko darinių bei taikomi optiniams jutikliams. Tam tikslui buvo naudojamas spektrinis elipsometras J.A. Woollam RC-2 visiško vidaus atspindžio konfigūracijoje, elipsometro optinėje schemoje įterpiant stiklo prizmę (BK7 - 70°), ant kurios pagrindo per optinį kontaktą buvo patalpintos plazmoninės-nanofotoninės struktūros naudojamos jutiklio paviršiu. Elipsometrijos metodas matuoja atspindėtų nuo bandinio p- ir s-polarizacijų amplitudžių santykį (Ψ) ir fazių skirtumą tarp jų (Δ). Šiame tyrime aplinkos lūžio rodiklio pokyčiai buvo matuojami dvejose skirtingose struktūrose, panaudojant 1D fotoninio kristalo (FK) sudaryto iš penkių periodinių dvisluoksnių TiO_2 (~110nm)/ SiO_2 (~200nm) bei ištisiniu aukso sluoksniu (1 pav. (a)), o antroji struktūra papildomai buvo modifikuota lazerinio įrašymo metodu suformuojant aukso nanogumbų gardelę (1 pav. (b)) [1-2]. Tokiose plazmoninėse-fotoninėse struktūrose generuojami hibridinės Tamm'o (TPP) – paviršiaus plazmonų poliaritonų (PPP) modos. Tyrimai parodė labai didelį hibridinio plazmoninio režimo jautrumą $\approx 26000 \text{ nm}/\text{RIU}$ lūžio rodikliui ant ištisinio aukso sluoksnio, tuo tarpu aukso gardelės įvedimas sumažina signalo jautrumą, bet padidina plazmoninių rezonansų kokybės koeficientą (Q). Plazmoninio rezonanso jautrumo palyginimas su hibridinio TPP-PPP režimo lūžio rodiklio pokyčiais ant pavienio aukso sluoksnio ir tradicinio SPR (pavienis plazmono rezonansas) parodė, kad hibridinis plazmoninis režimas dėl stiprios sąveikos efekto įveikia maždaug 27% SPR.

Plazmoninių jutiklių technologijos bus pritaikomos naujos kartos biojutikliuose, vaistų nuo vėžio, COVID bei kitų imuninių ir virusinių ligų tyrimuose. Taip pat plazmoniniai jutikliai potencialiai gali būti taikomi vandenilio garų detekcijai, kas itin aktualu sprogimų prevencijoje vystant žaliąsias vandenilio technologijas.



1 pav. Optinė schema skirta fotoninėje-plazmoninėje struktūroje ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$)/Au generuoti TPP (Tamm'o plazmonas poliaritonas)-PPP (paviršinis plazmonas poliaritonas) (a) ir TPP-HPGSP (hibridinis paviršiaus gardelės sklindantis plazmonas) (b) hibridines modas visiško vidaus atspindžio spektrinės elipsometrijos metodu [3].

Literatūra

1. E. Stankevičius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, Z. Balevičius, *Adv. Opt. Mater.*, **9**, 2100027 (2021).
2. J. Anulytė, E. Bužavaitė-Vertelienė, V. Vertelis, E. Stankevičius, K. Vilkevičius, Z. Balevičius, *J. Mater. Chem. C*, **10**, 13234 - 13241 (2022).
3. J. Anulytė, E. Bužavaitė-Vertelienė, E. Stankevičius, K. Vilkevičius, Z. Balevičius, *Sensors* **22**(23), 9453 (2022).

GRAPHENE-MANGANITE STRUCTURES FOR MAGNETIC SENSORS APPLICATIONS

Mykola Koliada, Nerija Žurauskienė

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

The increasing demand in magnetic field sensors with increased sensitivity and decreased dimensions has resulted in extensive investigations of magnetoresistive effects called as xMR and search of new materials and nanostructures [1]. The search of advanced materials and their combination is important due to importance of high sensitivity and increasing magnetoresistance (MR) in different magnetic fields. It has been demonstrated that nanostructured lanthanum manganite thin films exhibiting negative CMR effect can be successfully used for magnetic field sensors applications. The drawbacks of this films are despite high sensitivity in low and intermediate magnetic fields, saturated sensitivity at high fields and absence of sensitivity to direction of applied magnetic field [2]. The demand of local measurements resulted in the research of magnetoresistive properties of two-dimensional (2D) materials such as graphene. Graphene can achieve high values of MR at high and intermediate magnetic fields, due to positive magnetoresistance phenomenon. However, at low magnetic fields MR of graphene is low [3].

Another drawback is graphene sensitive only when applied field is perpendicular to plane. Therefore, to improve sensors, the design of graphene-manganite magnetic field sensor, when both La-Sr-Mn-O and graphene layers are aligned in the same plane, was suggested [4]. In this work, the structure consisting of graphene exhibiting positive MR and nanostructured manganite film doped with cobalt exhibiting negative MR was investigated in magnetic fields up to 20 T. A prototype of magnetic sensor based on this structure was proposed. It was demonstrated, that sensitivity is dependent on the ratio of initial resistances of graphene and manganite. Also, it was shown the possibility to measure absolute value of magnetic field and its direction to sensor's plane using one combined sensor: connected manganite and graphene sensor.

References

1. Magnetic Microand Nanotechnology for Robust Sensor Solutions:
https://www.sensitec.com/fileadmin/sensitec/Service_and_Support/Downloads/Catalogue/Sensitec_Katalog2015_Web_LZen.pdf
2. T. Stankevič, L. Medišauskas, V. Stankevič, S. Balevičius, N. Žurauskienė, O. Liebfried and M. Schneider, Rev. Sci. Instrum. **85**, 044704 (2014).
3. O.N. Ivanov, M.N. Yaprntsev, R.A. Lyubushkin, O.N. Soklakova. Journal of Nano- and electronic physics, Vol. 8 No 4(1), 04033(4pp) (2016).
4. R.Lukose, N.Zurauskienė, S.Balevicius, V.Stankevic, S.Kersulis, V.Plausinaitienė, R.Navickas, Nanotechnology **30**, 355503 (2019).

MINIMIZATION OF THE DISLOCATION DENSITY IN MULTIPLE QUANTUM WELLS FOR THE FABRICATION OF NIR VECSELS

Andrea Zelioli¹, Aivaras Špokas¹, Gustas Petrusevičius¹, Kipras Mažeika²,
Monika Jokubauskaitė¹, Augustas Vaitkevičius^{1, 2}, Sandra Stanionytė¹, Bronislovas Čechavičius¹,
Evelina Dudutienė¹, Renata Butkutė¹

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

²Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio av.

3, LT-10257 Vilnius email: andrea.zelioli@ftmc.lt

Since the invention lasers become essential for many different applications in an increasing number of various fields, such as, research, medicine, consumer electronics, communication, etc. Each of these applications requires a very specific set of properties. Due to this reason many different types of lasers have been developed over time.

Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Lasers (VECSELS) are new family of structure that derive from Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers (VCSEL). The main advantage of VECSEL to respect to VCSEL is the possibility of generation of high optical power output while maintaining a circular beam quality [1].

The output power of such structures is proportional to the area of the emitting surface. Thus, it is very important to grow large area samples of the highest optical uniformity [2].

In this work we started by analysing the dependence of the wavelength of the quantum wells emission on indium content and thickness of the quantum wells (QWs).

type of samples were grown with a structures like the one shown in Fig. 1a,b. The PL emission of the samples of type 1 grown using optimum combination of parameters was mapped to evaluate the homogeneity, necessary to produce high outpower emitters.

It was observed that PL intensity reduces in some well arranged areas of PL maps, constructing net of perpendicularly oriented dark lines, and the density of such lines increases with In content. To solve this issue a novel type of MQW structure, in which couples of QWs are separated by thick barriers, was designed, such design is shown in Fig. 1b.

We demonstrated that using type 2 structure is possible to grow VECSELS exhibiting homogeneous PL emission on large area of substrates. Furthermore, coupling QWs in such a way the thickness allows for a thinner final laser simplifying the thermal management needed during operation.

Our measurements demonstrated that the PL intensity reduction are originated by lattice mismatch dislocations in the InGaAs QWs.

In order to obtain an emission wavelength in the target range of (970-1100) nm, high In content (20%-25%) is required, and lattice mismatch between GaAs and InGaAs complicates the growth .

Incorporation of Bi in GaAs leads to a much bigger reduction in bandgap to respect to In. Because of this GaAsBi is possibly a better option for the realization of a device working in this range.

Additionally in this work, we studied the homogeneity of PL emission of samples grown with both type 1 and type 2 structures containing GaAsBi QWs instead of InGaAs. GaAsBi QWs showed much high homogeneity in both types of structures.

We realized two full VECSEL chips, one with InGaAs and one with GaAsBi MQWs using type 2. Both VECSELS showed promising PL emission and reflectance spectra.

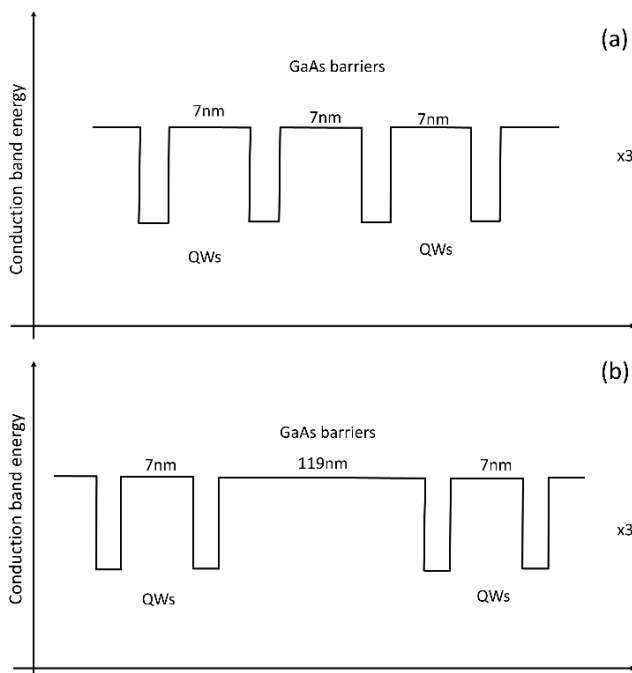


Figure 1: Two types of multiple quantum well grown and investigated in this work: a) type 1 structure, and b) type 2 structure.

The In content was varied from 15% to 27%, while QW thickness from 3.5 nm to 7.5 nm. Our target emission wavelength range was (970-1100) nm. Two

References

1. M. Guina, A. Rantamäki, and A. Härkönen, Optically pumped VECSELS: review of technology and progress, *Journal of Physics D: Applied Physics* **50** (38), 383001 (2017).
2. J.-F. Seurin, G. Xu, V. Khalfin, A. Miglo, J.D. Wynn, P. Pradhan, Ch.L.Ghosh, L.A. D'Asaro, Progress in high-power high- efficiency VCSEL arrays, Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers XIII. Proceedings of SPIE, **7229**, 722903 (2009).

SEMICONDUCTOR BLOCH LASER: A THEORETICAL ANALYSIS OF THE OPERATIONAL LIMITS OF A SUPERLATTICE TERAHERTZ EMITTER

Lukas Stakėla¹, Kirill N. Alekseev¹

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

Theory predicts that with specifically engineered semiconductor structures it would be possible to create an inversionless Bloch laser or in simple terms a terahertz emitter [1]. It happens to be that this can be achieved with semiconductor superlattices which possess, compared to traditional semiconductor structures, extremely long lattice periods. Since the high-frequency gain in superlattices is related to the negative differential conductivity [1] and does not require population inversion, the device can operate at room temperature, though thorough theoretical work is still needed to fully understand mechanisms that allow pushing the frequencies to the THz range. Our interest in the problem was also stimulated by a recent experimental demonstration of dissipative parametric generation, which underlines the importance of plasma effects in active superlattice devices [2]. We start our analysis with a relatively simple model of a semiconductor superlattice proposed by Ktitorov et al. [3]. The solution of the Boltzmann equation allows us to analyse the high-frequency conductivity of the system, which can show if there are any gain resonances.

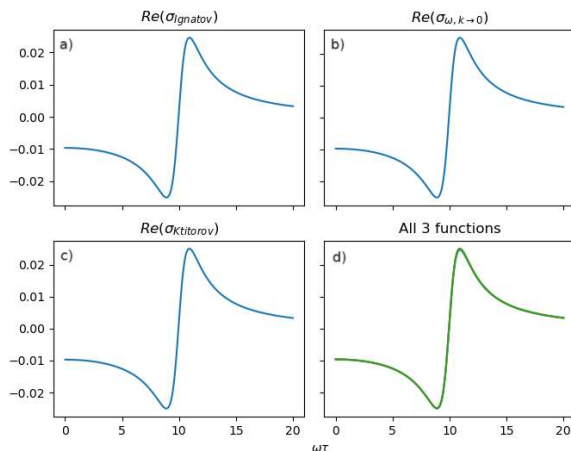


Fig. 1. Real part of high frequency conductivity of the superlattice. The graphs follow the Esaki-Tsu curve and predict a region of negative differential conductivity, where a theoretical Bloch laser could exist [1]. The graphs depict different conductivity calculation methods: a) Original Ignatov model b) Simplified Ignatov's equation when $k \rightarrow 0$ c) Original Ktitorov's model d) Comparison of all three calculation methods.

A more mathematically challenging approach, proposed by Ignatov et al., introduces a Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) collision integral,

that results in dependence of the conductivity on the wavenumber [4]. To our surprise, these two models are in good correlation. Additionally, the Ignatov model works in the limiting case (See Fig. 1).

With the knowledge of the conductivity, it is possible to find the eigenmodes of the plasma excitations in the system. From the combined results of these models, we see two main factors to consider (See Fig. 2). The first one is plasma frequency ω_p and the second one is Bloch frequency Ω_B . We believe that we have a combination of these effects interplaying with each other, thus forming a space-charge wave in the superlattice structure that predominantly defines the gain properties of the device.

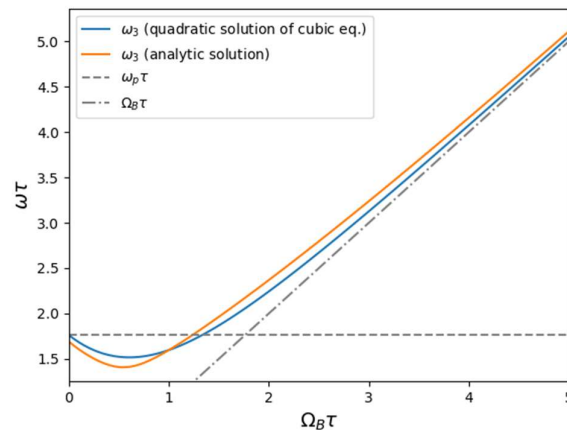


Fig. 2. The comparison of the real part of eigenmodes of the system, acquired from a cubic equation describing the oscillations in the system. The blue curve is a quadratic solution to a simplified cubic equation. The orange curve is an analytic solution to the full cubic equation. Both curves follow of what appears to be an interplay between two mechanisms: Bloch Ω_B and plasma ω_p oscillations.

References

1. Esaki, L. & Tsu, R., *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61-65 (1970).
2. Čižas, V. et al. *Phys. Rev. Lett.* **128**, 236802 (2022).
3. Ktitorov, S. A., Simin, G. S. & Sindalovskii, V. Y., *Fiz. Tverd. Tela* **13**, 2230-2233 (1971).
4. Ignatov, A. A. & Shashkin, V. I., *Sov. Phys. JETP* **66**, 526 (1987).

THz WAVEPLATE BASED ON LASER PROCESSED SILICON GRATING

Surya Revanth Ayyagari¹, Simonas Indrišiūnas², Daniil Pashnev¹, Vytautas Janonis¹,
Irmantas Kašalynas¹

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

²Laser Microfabrication Laboratory, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC),
Savanoriu ave. 231, LT- 02300 Vilnius, Lithuania
email: surya.revanth@ftmc.lt

The growing demand for waveplates and phase retarders with reduced complexity is crucial in the fields of THz imaging, THz spectroscopy, and THz communication [1]. These devices play a vital role in manipulating the polarization state of light. Waveplates introduce a controlled phase delay between two perpendicular polarization components, allowing for the modulation of electromagnetic wave properties. The key factor responsible for this phase delay, known as birefringence, which can also be artificially induced. The artificial birefringence can be achieved by creating electromagnetic structures or subwavelength gratings, leading to high anisotropy in materials due to the spatial irregularity of these structures [2][3]. This development is essential for advancing optical technologies and finding applications in various scientific and communication domains.

In this study, we developed the monolayer-silicon-based grating waveplates to function as quarter waveplates (QWP) for an application in broad frequency range, from 0.3 THz to 0.5 THz. Notably, these Si waveplates demonstrate anti-reflective properties due to the strategic inclination of grating walls along the Transverse Electric (TE) polarization. This inclination reduces reflection losses caused by silicon-air interfaces. Through experimental and numerical validation, we confirmed a phase retardance of $90^\circ \pm 10^\circ$ between orthogonal Transverse Magnetic (TM) and Transverse electric (TE) polarizations within an operational bandwidth of approximately 200 GHz.

Three samples were created, each featuring subwavelength periodic silicon-air interfaces with a fixed period (P) of 100 μm , width of grating ridge (w) and by varying grating heights (h) of 50, 100, and 200 μm . The grating height (h) represents the height of a ridge from the groove on top of a HRFZ-Si silicon wafer with an overall thickness (t) of 250 μm . For data analysis, TM (TE) polarization was aligned perpendicularly (parallel) to the grating ridges, as depicted in Fig.1. The Finite Difference Time Domain (FDTD) simulations and THz Time Domain spectroscopy (THz- TDS) were used to develop and assess the performance via analysis of waveplate transmission amplitude and phase spectra under varying conditions. Direct laser ablation (DLA) was employed to

fabricated the three samples on HRFZ-Si wafer having different depth and shape of the grating ridges. The transmission spectra of the sample with ridge heights of 50, 100, and 200 μm were precisely modeled and measured using FDTD and THz-TDS. The corresponding phase difference between the two orthogonal polarizations across the frequencies were calculated. Notably, the sample with a ridge height of 200 μm exhibited a distinct plateau region at a level of $90^\circ \pm 10^\circ$, covering a bandwidth of approximately 200 GHz centered around the frequency of 0.4 THz. All experimental spectra were modeled, confirming the quarter waveplate (QWP) performance with high accuracy. These results indicated the possibility to scale grating ridges, offering the potential to adjust the operational frequency within the THz range.

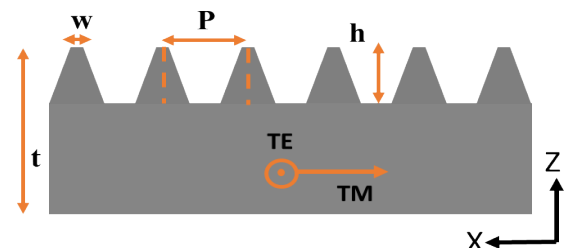


Fig.1. Schematic representation of monolayer-silicon-based grating QWP along XZ-axis with a design parameters.

ACKNOWLEDGMENT

This work received funding through the EU TERAOPTICS project (grant no. 956857, program H2020-EU.1.3.1. topic MSCA-ITN-2020) and European Regional Development Fund funded T-HP project (grant no. 01.2.2-LMT-K-718-03-0096).

References

- [1] T. Kürner, D. M. Mittleman, and T. Nagatsuma, *THz Communications*, vol. 234. Cham: Springer International Publishing, 2022. doi: 10.1007/978-3-030-73738-2.
- [2] M. Chen, F. Fan, S. T. Xu, and S. J. Chang, "Artificial high birefringence in all-dielectric gradient grating for broadband terahertz waves," *Sci. Rep.*, vol. 6, no. December, pp. 2–11, 2016, doi: 10.1038/srep38562.
- [3] P. Birgit, N. Passilly, J. Pietarinen, P. Laakkonen, M. Kuittinen, and J. Tervo, "Low-cost fabrication of form-birefringent quarter-wave plates Abstract.," vol. 16, no. 21, pp. 2939–2943, 2008.
- [4] Surya Revanth Ayyagari et al. "Wideband Waveplates Based on Dielectric Deep-Groove-Gratings in the Terahertz Range"(under submission)

ENERGY TRANSFER DYNAMICS IN CsPbX₃ PEROVSKITE DOPED WITH VARIOUS CONTENTS OF Yb³⁺

Lamiaa Abdelrazik, Simona Streckaite, Marius Franckevicius, Vidmantas Gulbinas

Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, LT-10257, Lithuania
lamiaa.abdelrazik@ftmc.lt

Cesium Lead Halide (CsPbX₃) perovskites have attracted attention due to their broadband absorption, narrow emission, high photoluminescence quantum yields (PLQY), and high stability. Recently, several reports stated that the Ytterbium-doped perovskites have been demonstrated as a suitable system for fabricating quantum-cutting materials, where one photoexcitation photon creates two near-infrared (NIR) photons.

To better understand the quantum cutting mechanism and properties, we demonstrate the formation of Cesium Lead Halide perovskite powders doped with ytterbium by dry and wet mechanosynthesis techniques. Both wet synthesis, in which the precursor materials are dissolved in water, and dry synthesis from raw materials allow the formation of high-quality cesiumlead halide perovskites.

We address the quantum-cutting mechanism and its efficiency limiting factors by analysis of the VIS and NIR luminescence kinetics. It shows that Yb³⁺ doped into the perovskite effectively quenches the excitonic emission and enables quantum cutting with photoluminescence efficiency of over 100% depending on the Yb³⁺ concentration.

References

- [1] Milstein, T. J.; Kroupa, D. M.; Gamelin, D. R. , Nano Lett. 2018, 18, 3792–3799.
- [2] Ishii, A.; Miyasaka, T., J Chem Phys. 2020 Nov 21;153(19):194704.

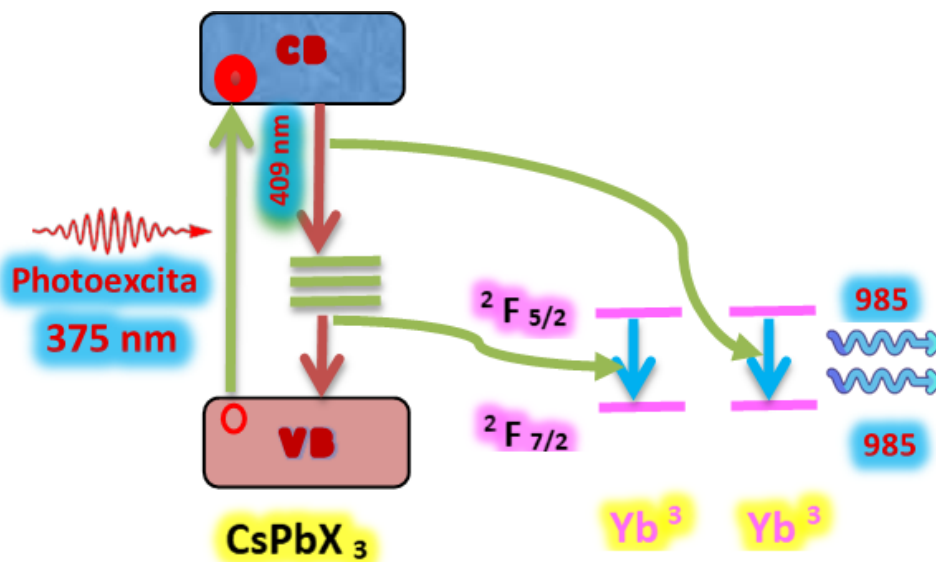


Figure 1. Schematic presentation of energy transfer from perovskite to Yb³⁺.

A ROAD MAP TO PEROVSKITE PEROVSKITE TANDEM SOLAR CELLS

Mujahid Muhammad

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

The power conversion efficiency (PCE) of single junction Perovskite solar cells (PSCs) has increased dramatically over the past decade, ranging from 3.8% to 26.1%. This has allowed the highest-PCE cells to achieve performance levels comparable to silicon counterparts.^[1] As the single-junction limit of perovskite devices is approached, however, the rate of efficiency improvement has slowed significantly. Higher PCEs are also possible with tandem device topologies that integrate light-harvesting layers with different bandgaps (1.2 eV and 1.7–1.9 eV, respectively).^[2] The photovoltaic properties of a triple cation perovskite/silicon tandem SC with four terminals $\text{Cs}_{0.06}(\text{MA}_{0.17}\text{FA}_{0.83})_{0.94}\text{Pb}(\text{I}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$ layer-based perovskite cell integrated on an industrial n-type monocrystalline bifacial PERT silicon SC were investigated. The measured transmittance spectrum of the perovskite layer demonstrates that it is an efficient absorber of visible light but only partially transparent in the infrared range. Within the range of wavelengths from 800 to 1100 nanometers, the transmittance is significantly higher than 80%. Because 19.4% of the semitransparent perovskite top cell is incorporated into the 4T perovskite/silicon tandem solar cell, the overall power conversion efficiency (PCE) of the cell is 26.6%, which is significantly higher than the efficiency of each subcell.^[3] The photovoltaic characteristics of the triple cation perovskite solar cell are shown in Table 1. The corresponding values include open circuit voltage, short-current density, fill factor (FF), and power conversion efficiency.

Under the same 100 mW/cm² illumination, the open circuit voltage V_{oc} of the bottom cell is only marginally lower than that of the single silicon SC. All perovskite tandem solar cells are able to sufficiently harness the one-of-a-kind benefits offered by perovskite materials.^[4] These benefits include excellent performance at a cheap cost, an easy fabrication method, and compatibility with flexible substrates. Other types of perovskite-based tandem solar cells are limited in their ability to do so.^[5] We make an effort to sketch out a plan for the development of all perovskite tandem solar cells that are both high performing and stable.

References

1. Y. Li, L. Meng, Y. Yang, G. Xu, Z. Hong, Q. Chen, J. You, G. Li, Y. Yang, Y. Li, Nat. Commun. **7**, 10214 (2016).
2. N. Liu, L. Wang, F. Xu, J. Wu, T. Song, Q. Chen. **8** (2020).
3. S. Asmontas, J. Gradauskas, A. Griguševičienė, K. Leinartas, A. Lucun, M. Mujahid, K. Petrauskas, A. Selskis, A. Suziedelis, A. Silenas, E. Sirmulis, Ukrainian Journal of Physical Optics. **23**, 193 (2022).
4. S. Ašmontas, M. Mujahid, Nanomaterials. **13**, 1886 (2023).
5. P. Wu, D. Thrithamarassery Gangadharan, M. I. Saidaminov, H. Tan, ACS Central Science. **9**, 14 (2023).

Solar cell	V_{oc} , V	J_{sc} , mA·cm ⁻²	FF, %	PCE, %
Top perovskite SC	1.11	23.6	74	19.4
Separate Si SC	0.67	40.0	72	19.3
Bottom Si SC	0.64	15.8	71	7.2

EXPLORING SPECTRAL AND TEMPERATURE ASPECTS OF HOT CARRIER PHENOMENA IN GaAs SOLAR CELLS

Ihor Zharchenko, Jonas Gradauskas, Oleksandr Masalskyi, Steponas Ašmontas, Algirdas Sužiedėlis, Aldis Šilėnas, Aurimas Čerškus

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

The Shockley-Queisser theory assumes that only photons with energy higher than a semiconductor's bandgap participate in the formation of photoresponse while the photons with energy less than the bandgap are deemed inefficient in the formation of the total photoresponse of a solar cell [1]. Nevertheless, recent researches have shown that photons possessing energy below the bandgap can generate a photovoltage across a p-n junction. The polarity of this voltage is opposite to that of the conventional photovoltage [2]. Our calculations demonstrate that as much as 10% of the total absorbed solar radiation in GaAs falls within the below bandgap range. This proportion is significantly influenced by the carrier concentration and thickness of the top layer [3]. This talk aims to elucidate the detrimental impact of hot carrier photocurrent on the generation of photoresponse across a GaAs single junction solar cell. The p-n diodes were fabricated from GaAs by means of liquid phase epitaxy (LPE) technique and were subjected to pulsed laser irradiation of various wavelengths: 0.532 μm , 1.064 μm , and 1.342 μm . Our findings revealed several important observations (Fig. 1).

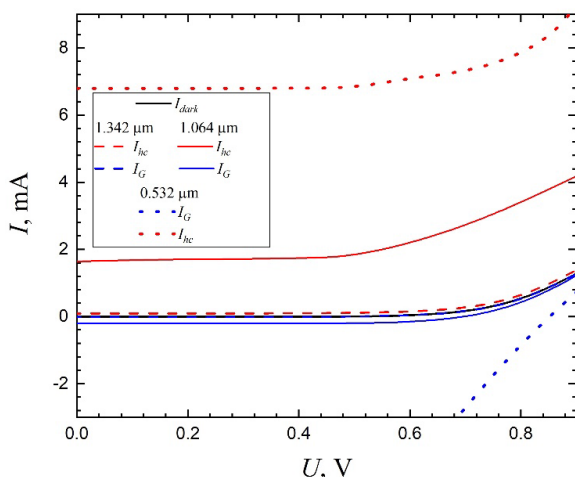


Fig.1. I-V characteristics of GaAs p-n junction under laser illumination of 0.4 MW/cm² intensity and wavelength: 0.532 μm (dotted lines), 1.064 μm (solid lines) and 1.342 μm (dashed lines).

The primary contribution of photons with a wavelength of 1.342 μm which corresponds to an energy of 0.92 eV, is observed in the hot carrier current, while their energy is insufficient to significantly elicit conventional generation-related photoresponse. Furthermore, the influence of photons with a wavelength of 1.064 μm (energy of

1.16 eV) results in the prevalence of hot carrier photoresponse over the classical photocurrent generated by two-photon absorption. The observed effect can be attributed to the surplus energy of 0.9 eV that remained after the formation of the conventional electron-hole pair. This surplus energy further contributed to carrier heating. Lastly, it is worth noting that laser illumination with a wavelength of 0.532 μm (photon energy of 2.32 eV which exceeds the GaAs bandgap) demonstrates a noticeable hot carrier photoresponse, contrary to what classical theory predicts. The observed effect is likely attributed to the excess energy (0.9 eV) that remained after the classical single-photon interband absorption process.

It is evident that the hot carrier contribution to the photocurrent remains consistent across different incident radiation wavelengths. In general, it is observed that the short-circuit photocurrent which is produced by the hot carriers exhibits a decline as the temperature of the solar cell lowers. This property creates advantageous conditions for the efficient operation of a solar cell.

Moreover, the research revealed that when subjected to laser light of a 1.064 μm wavelength and 0.7 MW/cm² power, the hot carriers can reach temperatures of up to 454 K within the p-n junction in standard room conditions and up to 262 K under liquid nitrogen conditions. The hot carrier photocurrent flowing across the p-n junction exhibits a recombination character.

In summary, this study underscores the substantial impact of the hot carrier effect and shows the importance of taking it into account when assessing the efficiency of solar cells. Consequently, there's a need to reevaluate the theoretical maximum efficiency of a single-junction solar cell (as per the Shockley-Queisser limit) by considering the impact of the hot carrier phenomenon across the entire solar spectrum.

References

1. W. Shockley, H. J. Queisser, Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells, J. of Appl. Phys. 32, 510-519 (1961).
2. S. P. Ašmontas, J. Gradauskas, D. Šeliuta, Photoelectrical properties of nonuniform semiconductor under infrared laser radiation, Nonresonant Laser-Matter Interaction conference, Proc. SPIE 4423, 18-27 (2000).
3. O. Masalskyi, J. Gradauskas, Pre-thermalizational effect of hot carriers on photovoltage formation in a solar cell, Ukr. J. Phys. Opt. 23, 117-125 (2022).

THEORETICAL MODELING OF VIBRATIONALLY RESOLVED OPTICAL LINESHAPES OF A CARBON-OXYGEN PAIR DEFECT IN SILICON

Rokas Silkinis, Lukas Razinkovas

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

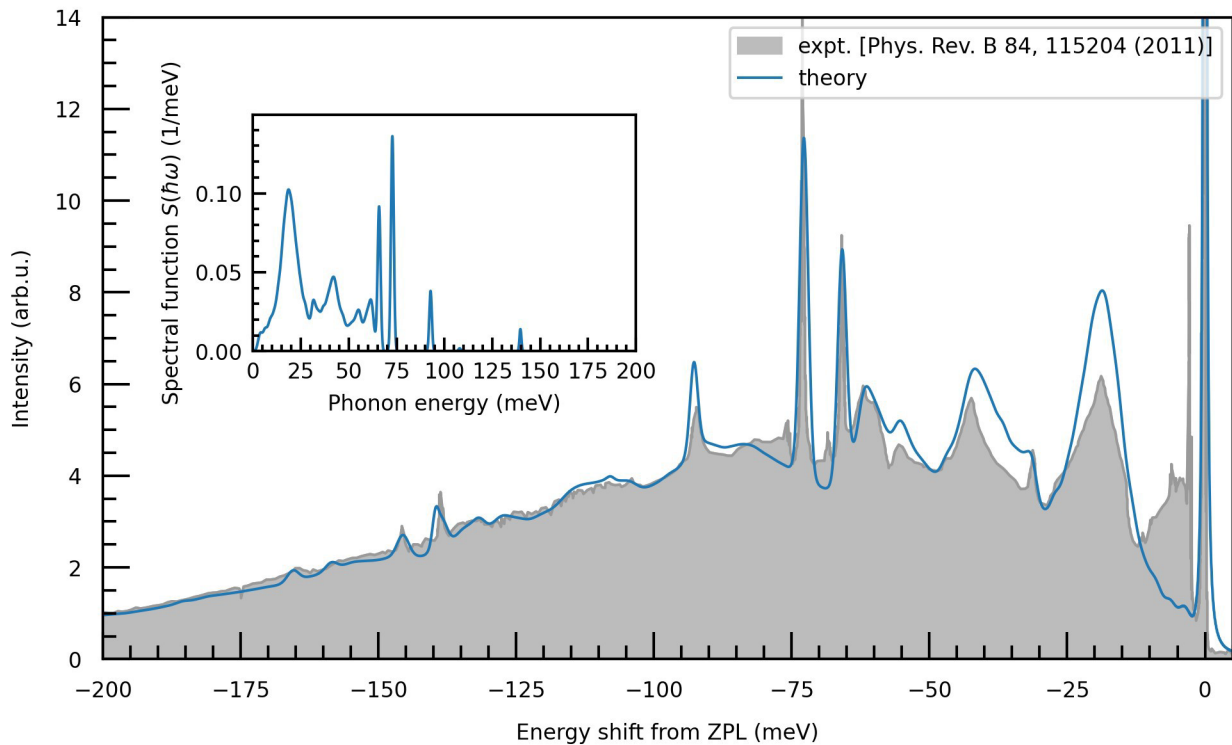


Figure 1. Experimental (gray) and calculated (blue) normalized luminescence lineshapes of C-center in silicon. The inset figure contains the spectral function of electron-phonon coupling.

In recent years, quantum technologies have been at the forefront of scientific interest due to various possible applications in quantum sensing, communication, and computing. Optically active point defects are of particular interest as single-photon emitters that could be used for short- and long-distance exchange of information [1]. The C-center, composed of a carbon-oxygen interstitial pair (CiOi), is one such defect [2, 3, 4]. It emits light at telecom wavelengths of 1570 nm (0.789 eV) and is thus a suitable candidate for a telecom-range single-photon source that is compatible with fiber-optic technology [5].

This work presents a first-principles computational study of the luminescence and absorption lineshapes associated with the C-center in silicon. We perform density functional theory (DFT) calculations with a semilocal functional based on the meta-generalized gradient approximation (meta-GGA) [6], in particular, the recently developed SCAN (Strongly-Constrained and Appropriately-Normed) functional [7]. Using a novel embedding methodology [8, 9], we obtain

optical emission (Figure 1) and absorption lineshapes of the defect in the dilute limit. Our results show a close agreement to the experimentally observed luminescence lineshape, while the absorption lineshape data could be used as a guide for further experimental analysis of the C-center.

References

1. W. Redjem, A. Durand, T. Herzig et al., *Nat. Electron.* **3**, 738 (2020).
2. J. Wagner, K. Thonke, and R. Sauer, *Phys. Rev. B* **29**, 7051(R) (1984).
3. K. Thonke, A. Hangleiter, J. Wagner et al., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18**, L795 (1985).
4. T. Ishikawa, K. Koga, T. Itahashi et al., *Phys. Rev. B* **84**, 115204 (2011).
5. P. Udvarhelyi, A. Pershin, P. Deák et al., *npj Comput Mater* **8**, 262 (2022).
6. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
7. J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, *Phys. Rev. Lett* **115**, 036402 (2015).
8. A. Alkauskas, B. B. Buckley, D. D. Awschalom, et al., *New J. Phys.* **16**, 073026 (2014).
9. L. Razinkovas, M.W. Doherty, N. B. Manson et al., *Phys. Rev. B* **104**, 045303 (2021).

Ab initio STUDY OF VIBRATIONAL PROPERTIES OF DIVACANCY DEFECTS IN 4H-SiC

Vytautas Žalandauskas¹, Rokas Silkinis¹, Lukas Razinkovas^{1,2},
Lasse Vines², Marianne Etzelmüller Bathen²

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Fundamental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: vytautas.zalandauskas@ftmc.lt

²University of Oslo, Department of Physics/Centre for Materials Science and Nanotechnology,
P.O. Box 1048, Blindern, Oslo N-0316, Norway

Silicon carbide (SiC) is a wide bandgap material with great potential for high-power and high-frequency electronic devices. Furthermore, certain deep-level semiconductor defects have potential applications as qubits and single photon emitters for quantum technologies (QT). SiC hosts a wide variety of defects with QT-compatible properties. In multi-component semiconductors, such as SiC, these defects can often inhabit several configurations with different characteristics. Therefore, a detailed characterization of different defect configurations and their electro-optical properties is essential.

Our study employed first-principles calculations to study four neutral divacancy configurations (hh , kk , hk , and kh) and their vibrational properties in the 4H-SiC polytype. The labels h and k refer to the distinct hexagonal and pseudo-cubic lattice sites in 4H-SiC, respectively. Using the r^2 SCAN density functional [1][2], we have determined the zero-phonon line (ZPL) energies and zero-field splitting (ZFS) values, which are in close agreement with experimental data [3]. Furthermore, we calculated the spectral functions of electron-phonon coupling using a novel embedding methodology [4][5]. The calculated luminescence lineshapes provide excellent agreement with the experimental data.

References

1. J. W. Furness *et al.* J. Phys. Chem. Lett. **11**(19), 8208 (2020).
2. M. Maciaszek *et al.* J. Chem. Phys. **159**(8), 084708 (2023).
3. A. L. Falk *et al.* Nat. Commun. **4**(1), 1819 (2013).
4. A. Alkauskas *et al.* New J. Phys. **16**(7), 073026 (2014).
5. L. Razinkovas *et al.* Phys. Rev. B **104**(4), 405303 (2021).

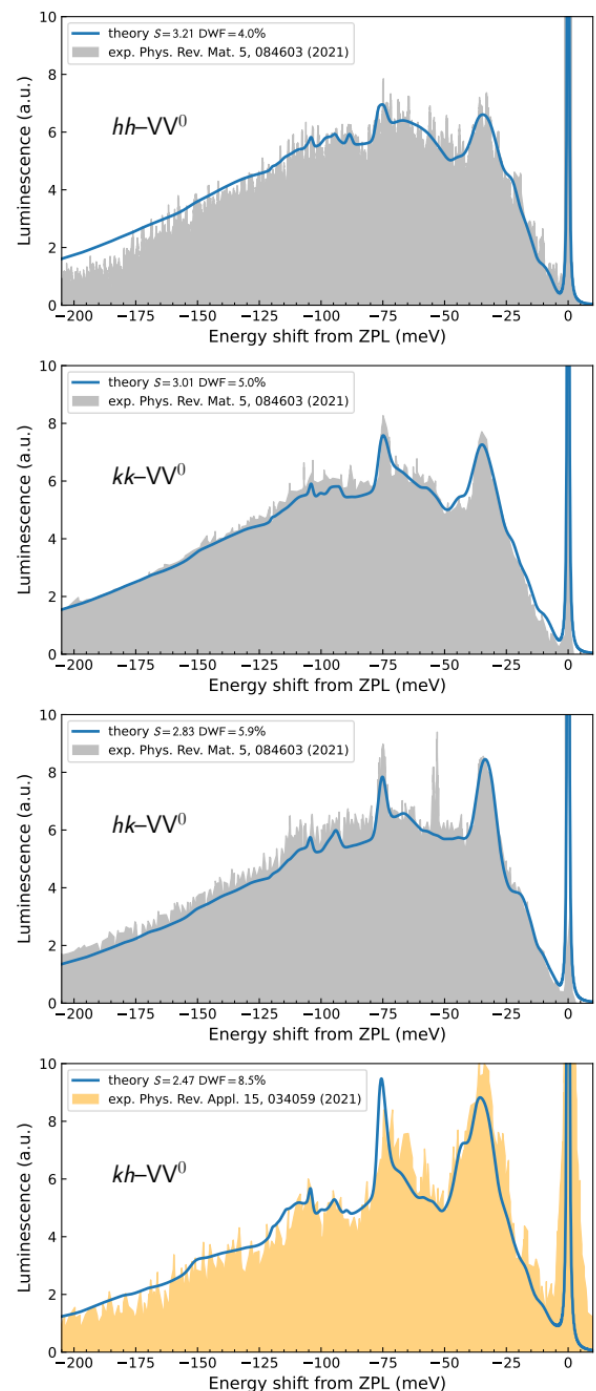


Fig. 1 Calculated theoretical normalized luminescence line shapes of divacancy defects in 4H-SiC compared with experimental data.

HIGH-THROUGHPUT FOURIER-DOMAIN OPTICAL COHERENCE TOMOGRAPHY FOR RETINAL IMAGING

Karolis Adomavičius, Austėja Trečiokaitė, Egidijus Aukorius

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

Optical coherence tomography (OCT) has been used successfully for non-invasive human retinal volumetric imaging *in vivo*, advancing the detection, diagnosis, and monitoring of various retinal diseases. However, the spatial resolution, imaging speed and depth is still an issue in OCT. Recently, to speed up OCT imaging, Fourier-domain Full-Field OCT (FD-FF-OCT) has been introduced that uses a super-fast camera and a swept laser source to parallelize signal acquisition.

We have recently showed that a multimode fiber can efficiently reduce coherence crosstalk noise in OCT images [1]. Such a system enabled us to visualize such hard-to-image retinal layers with $\sim 5\mu\text{m}$ spatial resolution. However, any standard interferometer configuration, including in FD-FF-OCT, wastes almost 75 % of light because it uses 50/50 beamsplitter. For example, light going to the reference arm is practically all lost there because of the strong attenuation necessary when imaging biological tissue.

To this end, we use in this work the so called high-throughput dark-field (HTDF) FD-FF-OCT configuration (Figure 1) that relies on using an asymmetric beamsplitter sending most of the light onto a sample [2].

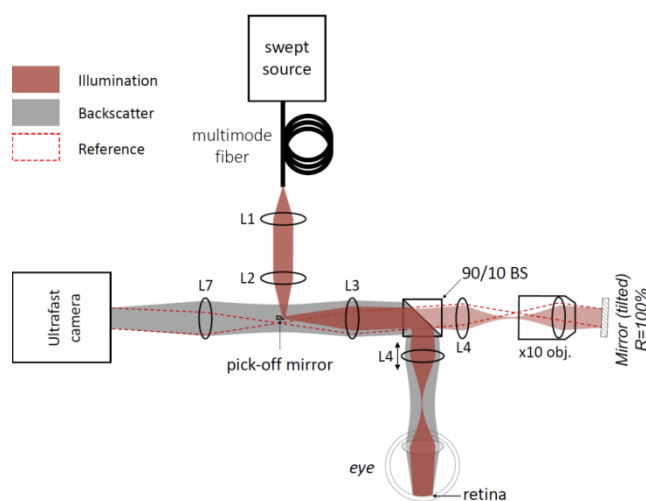


Figure 1. Detailed scheme of high-throughput dark-field Fourier-domain FF-OCT system.

It works in conjunction with a special mirror that separates illumination and detection paths. The configuration could also reject specular reflections from the system if the reflecting plane is properly oriented. Specifically, the configuration employs 90/10 beamsplitter, instead of the 50/50, that efficiently uses the available light budget and could enable detecting more scattered photons from a sample.

Such system can be important in retinal imaging where light can be phototoxic to the human retina since it would allow recording nearly two times more photons and it would also permit sending twice more photons, which is important when the budget of light is limited. We have implemented HTDF configuration in our retinal FD-FF-OCT system and demonstrated 3.5 times increase in signal on a USAF target sample mounted behind a scattering layer (Figure 2).

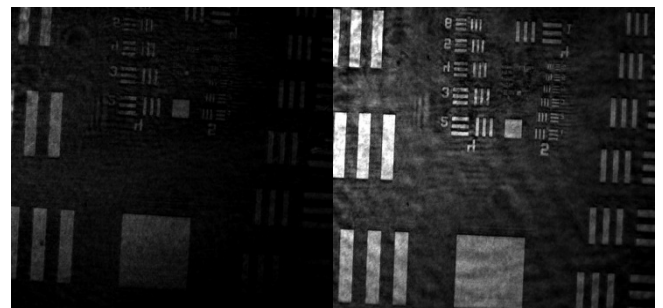


Figure 2. SNR increase in the image of the USAF target mounted behind a scattering layer obtained with high-throughput FD-FF-OCT system (right) compared to a standard FD-FF-OCT system (left).

References

1. E. Aukorius, D. Borycki, P. Wegrzyn, I. Žičkienė, K. Adomavičius, B. L. Sikorski, and M. Wojtkowski, "Multimode fiber as a tool to reduce cross talk in Fourier-domain full-field optical coherence tomography," *Optics Letters* 47(4), (2022).
2. E. Aukorius, A. C. Boccara, "High-throughput dark-field full-field optical coherence tomography," *Optics Letters* 45 (2), (2020)

INVESTIGATION OF WIRELESS SENSOR NETWORK FOR ENVIRONMENTAL MONITORING

Shathya Duobienė and Gediminas Račiukaitis

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

The integration of Internet of Things (IoT) devices into cloud computing platforms is an essential component in the development of scalable, flexible and efficient IoT solutions. Cloud computing offers the computational power, storage, and services necessary for managing the substantial volumes of data generated by IoT devices, as well as for performing complex analytics on that data. The objective is to explore the integration of IoT devices within cloud computing platforms. We delve into the technical aspects, benefits, challenges, and potential applications of this integration [1, 2]. A low-cost asynchronous web server for monitoring temperature and humidity sensors connected to the ESP32 Wi-Fi module has been developed. To cover the long distance of communication experiments with Long Range (LoRa) ESP32 module has been established as shown in Fig. 1 [3].

temperature and humidity monitoring framework comprises sensor nodes with an ESP32 Wi-Fi module and a DHT11 sensor with 4 AA batteries as the power supply has been running successfully for the past few months in the FTMC laboratory with Wi-Fi connectivity. The schematic of the sensor nodes connected to the base station directly is shown in Fig. 3.

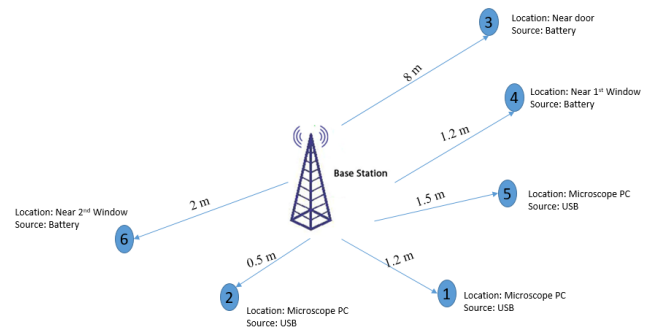


Fig 3. Schematic of sensor nodes.

The estimated total power consumption of the individual sensor node is presented below. In light of the numerous communication channels, a duty cycles of 10 min intervals are selected for this operation of data collection.

POWER CONSUMPTION OF A SENSOR NODE

Mode	Current (mA)	Power Consumption (mW)	Energy consumed per day kWh/day	Energy consumed per year kWh/year
Deep Sleep	12	39.6	0.00095	0.347
Normal	30	99	0.00237	0.867
Overall Total Power Consumption			1.214	

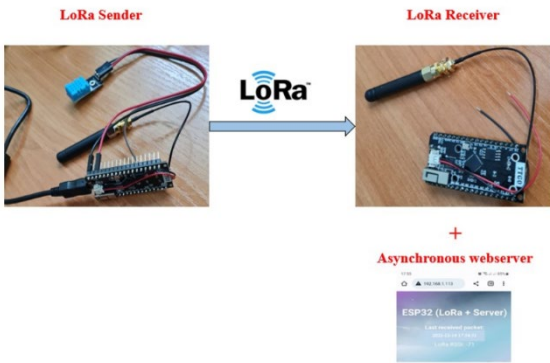


Fig 1. LoRa sensor node architecture.

Data from sensor nodes across the facility are collected and displayed in real-time charts on a web server shown in Fig 2.

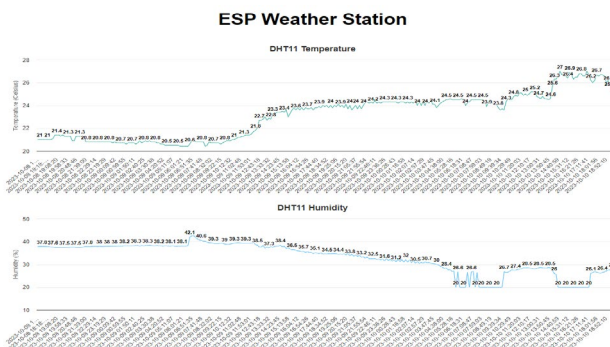


Fig 2. Webserver data collection.

Multiple web clients on the same network can access the sensor data. The proposed IoT-based

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," *2021 International Conference on Electronic Communications, Internet of Things and Big Data (ICEIB)*, 2021, pp. 23-27
- 2) Duobiene, S.; Ratautas, K.; Trusovas, R.; Ragulis, P.; Šlekas, G.; Simniškis, R.; Račiukaitis, G. Development of Wireless Sensor Network for Environment Monitoring and Its Implementation Using SSAIL Technology. *Sensors* **2022**, *22*, 5343. <https://doi.org/10.3390/s22145343>
- 3) S. Duobiene, G. Raciukaitis, "Design of Wireless Sensor Networks for Environmental Monitoring using LoRa", *ICEM 2023*: 17. International Conference on Environmental Monitoring, Paris, Volume: 17 (5) pp. 74-78.

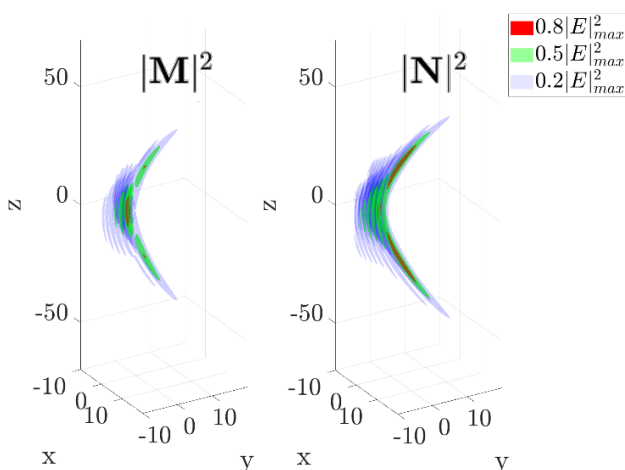
VEKTORINIŲ NEHOMOGENIŠKAI POLIARIZUOTŲ AIRY PLUOŠTŲ TYRIMAS

Justas Berškys, Sergejus Orlovas

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

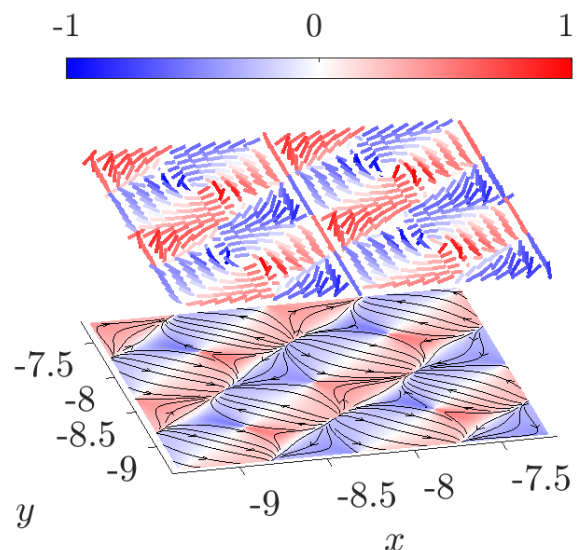
Lazerinių pluoštų formavimas yra ganėtinai nauja ir besivystanti tyrimų sritis randanti savo pritaikymą įvairiausiose mokslo šakose. Pavyzdžių galime aptikti medžiagų apdirbime, pluošto struktūra ypač svarbi norint preciziškai išpjauti, suvirinti ar kitaip paveikti medžiagą. Biomedicinoje tyrinėjant ląsteles ir visokias daleles, lazeriniai pluoštai yra naudojami kaip spąstai medžiagai sugauti ir ją valdyti. Kita labai svarbi sritis, kurioje ypatingą vaidmenį atlieka lazerinių pluoštų formavimas yra telekomunikacijos. Norint patenkinti didelę vartotojų paklausą keičiantis duomenimis internetu, komerciškai jau yra pradėti naudoti daugelio modų šviesolaidžiai, kuriuose atskiros lazerinės modos atlieka atskiro duomenų perdavimo kanalo funkcijas.

Šiame darbe dėmesys yra kreipiamas į Airy tipo pluoštus. Airy pluoštai tai laike ir erdvėje sklindančios elektromagnetinės bangos pasižyminčios invariantiškumu, kitaip tariant, nedifraguojančios. Prie nedifraguojančių pluoštų šeimos yra priskiriamos ir kitos šviesos struktūros: Beselio (ang. Bessel) ar Matjė (ang. Mathieu) bangos. Visi šie invariantiniai laukų sprendiniai esant perturbacijoms aplinkoje, sklisdami – atsistato ir sklidimo metu jų erdvinė struktūra išlieka pastovi. Eksperimentiškai 2007 m. pirmą kartą Airy pluoštus stebėjo mokslininkas Demetrios Christodoulides su savo komanda iš Centrinės Floridos universiteto [1]. Jie krintančio Gauso pluošto fazę moduliavo erdvinio šviesos moduliatoriumi ir lęšiu atlikę Furjė transformaciją CCD kamera stebėjo šį pluoštą.



1 pav. Azimutinį (M) ir radialinį (N) Airy vektorinį pluoštą atitinkančių laukų intensyvumo skirstiniai.

P. M. Morse ir H. Feshbach knygoje [2] yra aprašytas būdas kaip iš skaliarinio lauko galima suformuoti jį atitinkančius vektorinius sprendinius. Šiame pranešime bus aptariama keli tokius vektorinius sprendinius atitinkantys laukai su radialine – azimutine (atvaizduota 1 pav.) ir sferine – meridianine simetrija [3]. Šiuose nehomogeniškai poliarizuotuose Airy pluoštuose aptinkamos visokios egzotinės struktūros. Tai, tiek fazėje tiek poliarizacijoje aptinkami optiniai sūkuriai, taip pat egzotinės kvazi-dalelės [4] – stabilios lauko struktūros, pasižyminčios dalelėms būdingomis savybėmis, kurios taip pat bus aptiriamos pranešime ir atvaizduotos 2 pav.



2 pav. Sferiškai poliarizuoto Airy pluošto Skymioninis tankis atvaizduotas normalės poliarizacinei elipsei dedamojoje, lauko koordinatės atvaizduotos santykiniais vienetais.

Literatūra

1. G. A. Siviloglou, J. Broky, A. Dogariu and D. Christodoulides, Ballistic dynamics of Airy beams, Optics letters (2008): 207-209.
2. P. M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics. Part 1 & 2 (McGraw Hill, New York, 1953).
3. J. Berškys and S. Orlov, Accelerating Airy beams with particle-like polarization topologies and free-space bimeronic lattices, Optics letters Optics letters, (2023): 1168-1171.
4. Y. Shen, Q. Zhang, P. Shi, L. Du, A. V. Zayats, and X. Yuan, Topological quasiparticles of light: Optical skyrmions and beyond, arXiv preprint arXiv:2205.10329 (2022).

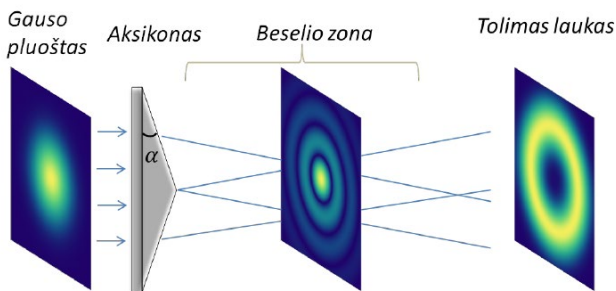
VEKTORINIŲ SUFOKUSUOTŲ ŽIDINIO MODŲ SKLIDIMO DIELEKTRINĖJE TERPĖJE TYRIMAS

Klemensas Laurinavičius, Sergejus Orlovas

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

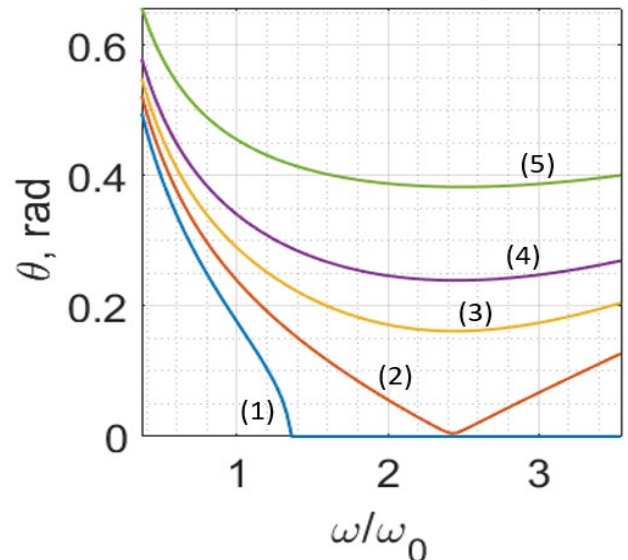
Struktūrizuotos šviesos inžinerija šiais laikais sparčiai vystosi dėl plačios galimų taikymų įvairovės ir naudos ne tik optikoje, bet ir fizikoje apskritai. Šis susidomėjimas kyla dėl didelio kontroliuojamų reiškinių skaičiaus, tokio kaip optinė trauka, optinis sukimas, savaiminis atsistatymas, vaizdinimas ir sklidimas be difrakcijos ir dispersijos. Šviesos pluoštų difrakcija yra viena iš kliūčių lazerinėje komunikacijoje, informacijos perdavime ir didelio atstumo lazerinėse sąveikose. Plintant pluoštui, jo erdvinės sudedamosios difraguoja, todėl erdvinis profilis iškraipomas: pluošto matmenys didėja, o intensyvumas mažėja. Nedifraguojantis pluoštas išvengia difrakcijos plitimo konstruktyvioje interferencijos zonoje, vadinamoje Bessel zona (1 pav.). Žinomiausias toks pluoštas yra Bessel pluoštas. Tačiau žinomi ir kiti pluoštai - elipsinis Matjė, parabolinis Veberis ar Airy pluoštas.

Šiuo metu esančios technologijos leidžia sukurti trumpus, siekiančius kelių fs trukmės, nedifraguojančius impulsus, kurių aprašymui yra sukurta keletas modelių (X-bangos, Bessel-X impulsai, sufokusuotos židinio modos (angl. Focus Wave modes, trump. FWM) ir kt.). Pastarasis modelis yra bendriausias nedifraguojančio impulso aprašymas visoje medžiagos dispersijos srityje. Vienas iš pavyzdžių parodytas (2 pav.).



1 pav. Bessel pluošto gavimo kūgine prizme principinė schema.

Detali FWM kampinės dispersijos kreivių analizė tiesinėse dispersinėse terpėse pateikta darbe [1]. Nedifraguojančio impulso forma priklauso nuo pradinės kampinės impulso dispersijos ir to, kurioje medžiagos kampinės dispersijos kreivės srityje yra nagrinėjamo impulso nešantysis dažnis.



2 pav. Sufokusuotų židinio modų kampinės dispersijos BK7 stikle, kai $\gamma = -0.628\mu\text{m}$, ir V/c : 0.629 (1), 0.63685 (2), 0.645 (3), 0.655 (4), 0.685 (5).

Vektorinės nedifraguojančių impulsų savybės pasireiškia tuomet, kai impulsai aštriai fokusuojami ir impulsą sudaro tiek skersine, tiek išilgine kryptimis nukreiptas elektrinis laukas. Taip pat vektorinė teorija leidžia aprašyti impulsus, kurie pasižymi nehomogenine poliarizacija. Viena iš įdomių sufokusuotų židinio modų savybių yra galimybė kontroliuoti impulso grupinį greitį. Priklausomai nuo kampinės dispersijos didumo, grupinis greitis gali būti didesnis, mažesnis, lygus šviesos greičiui ar net neigiamas [2].

Šiame darbe nagrinėjamos tiesinės, azimutinės ir radialinės poliarizacijos vektorinės sufokusuotos židinio modos ir jų sklidimas tiesinėje terpėje, BK7 stikle. Taip pat aptariama neigiamo grupinio greičio suformavimo galimybė. Šio darbo tikslas yra išanalizuoti vektorinių sufokusuotų židinio modų sklidimą tiesinėje dispersinėje terpėje.

Literatūra

1. S. Orlov, A. Stabinis, Angular dispersion of diffraction-free optical pulses in dispersive medium, Optics communications 240(1), 1-8 (2004).
2. C. J. Zapata-Rodriguez, M. A. Porras, X-wave bullets with negative group velocity in vacuum, Optics letters 31(23), 3532-3534 (2006).

VEKTORINIŲ KONTROLIUOJAMO INTENSIVUMO SKIRSTINIO PLUOŠTŲ PRITAIKYMAS LAZERINIAM ĮVAIRIŲ MEDŽIAGŲ MIKROAPDIRBIMUI

Ernestas Nacius^{1,2}, Orestas Ulčinas², Sergejus Orlovas¹, Vytautas Jukna^{1,3}

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

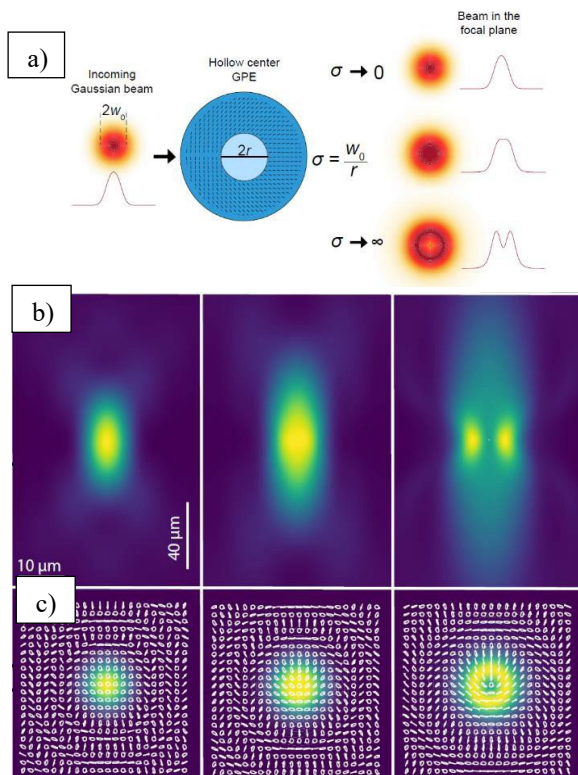
²Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, LT-08412, Vilnius

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

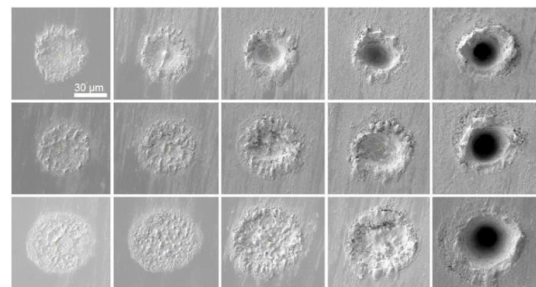
Lazerinis įvairių medžiagų mikroapdirbimas naudojant ultratrumpų impulsų šaltinius leidžia iki kelių mikronų tikslumu pakeisti bandinių formas bei savybes: pjauti, gręžti, abliuoti, įrašyti tūrinius pakitimus. Kiekvieno atskiro proceso pagerinimui ir pagreitinimui galima pasitelkti pluošto židinio zonos inžineriją, kurios pagalba įmanoma efektyviau paskirstyti pluošto intensyvumą erdvėje. Įprastai lazeriniam mikroapdirbimui yra naudojamas Gauso pluoštas turintis varpo formos intensyvumo skirstinį, o šis medžiagoje sukelia nevienodą poveikį. Medžiagos poveikis labai priklauso nuo spinduliuotės tankio, o kadangi Gauso pluošto centre jis yra didesnis, jis labiausiai medžiagą ir paveikia. Tačiau glotnūs energijos tankio kraštai gali dalyvauti lazerinės spinduliuotės ir medžiagos sąveikoje todėl dažnai stebima aplinkinė medžiagos poveikio zona, kuri nėra pageidautina. Šios nepageidaujamos poveikio zonos sumažinimui yra pasitelkiama pluošto židinio zonos inžinerija, kur

panaudojant amplitudę, fazę ar poliarizaciją keičiančius optinius elementus galima transformuoti Gauso pluoštą į sudėtingesnės struktūros pluoštus¹.

Šiame tyrime lazerio pluošto transformacijos židinio aplinkoje įvykdomos pasitelkiant lydyto kvarco tūryje suformuotų dvejetainių nanogardelių pagrindu pagamintus optinius elementus². Šios dvejetainių nanogardelių yra ypatingos tuo, kad lazerinio rašymo metu galima valdyti jų ilgį bei optinės ašies posūkio kampą keičiant įrašinio pluošto energiją ir tiesinės poliarizacijos kampą. Tai leidžia stiklo tūryje įrašyti kontroliuojamos orientacijos ir pozicijos struktūras³. Šiuo pagrindu pagamintas optinis elementas yra jautrus krentančio pluošto poliarizacijai ir gali ją lokaliai pasukti arba pakeisti fazę.



1 pav. a) Kontroluojamas pluošto skirstinio formavimo principas židinio zonoje naudojant S-banginės plokštelės pagrindu suformuotus optinius elementus su nemodifikuotu centru. b) ir c) pavaizduoti antros eilės banginės plokštelės formuojamų pluoštų skirstiniai židinio zonoje prie skirtingų įeinančio pluošto dydžių.



2 pav. Silicio paviršuje išabliuoti krateriai prie su skirtingomis pluoštų konfigūracijomis ir pakartojimų skaičiumi.

Šiame darbe pademonstruojami keli S-banginės plokštelės⁴ pagrindu pagaminti elementai, kuriais galima keisti pluošto židinio intensyvumo skirstinius (1 pav.). Pluoštų transformacijos analizei buvo pasitelktas skaitmeninis difrakcijos modeliavimas. Eksperimentiškai replikuoti pluoštai išbandyti sukeldami tūrinį poveikį stikle bei paviršinius pakitimus neskaidrių medžiagų paviršiuose (2 pav.).

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. 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).
3. Y. Shimotsu, P. G. Kazansky, J. Qiu, K. Hirao, Self-Organized Nanogratings in Glass Irradiated by Ultrashort Light Pulses, *Phys. Rev. Lett.* 91, 247405, (2003).
4. M. Beresna, M. Gecevičius, P.G. Kazansky, and T. Gertus, "Radially polarized optical vortex converter created by femtosecond laser nanostructuring of glass", *Appl. Phys. Lett.* 98, 201101 (2011).

VIENAŠŪVIŲ MODIFIKACIJŲ FORMAVIMAS LYDYTAME KVARCE NAUDOJANT MHz IR GHz PAPLIŪPAS

Miglė Mackevičiūtė, Juozas Dudutis, Paulius Gečys

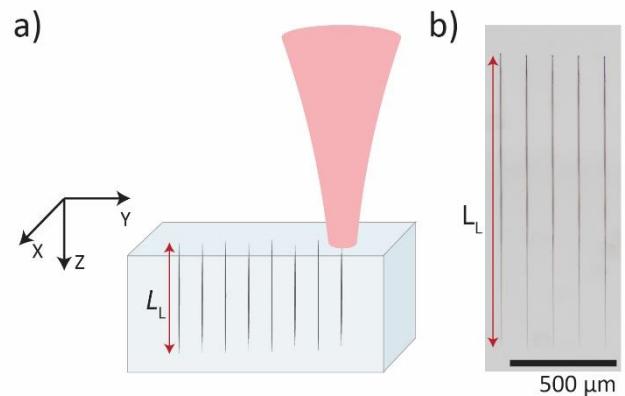
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių tyrimų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: migle.mackeviciute@ftmc.lt

Vienas populiariausių stiklo pjovimo būdų yra atliekamas Beselio pluoštu formuojant modifikacijas ir mechaniškai atskiriant bandinį [1]. Šiuo būdu pasiekiamas didelis pjovimo greitis, kurį lemia keli aspektai. Pirmia, modifikacijos yra suformuojamos per visą bandinio storį, todėl raižymui užtenka vieno pluošto skenavimo. Antra, valdant skersinių įtrūkių kampą galima formuoti įtrūkius išilgai pjūvio linijos [1]. Skersinių įtrūkių formavimas ir jų kampo valdymas leidžia pozicionuoti pažeidimus didesniu atstumu vienas nuo kito ir taip pasiekti aukštą pluošto skenavimo greitį. Išilginės modifikacijos stiklo raižymui taip pat gali būti suformuotos naudojant didelės smailinės galios pluoštus su kuriais suformuojamos šviesos gijos [2]. Tačiau dėl mažos skersinės pažeidimo zonos (keli μm) modifikacijos turi būti formuojamos arti viena kitos, o tai apriboja skenavimo greitį [3].

Šio eksperimento tikslas – pasinaudojus šviesos gijomis suformuoti modifikacijas, kurios galėtų potencialiai būti pritaikytos stiklo raižymui.

Darbas buvo atliktas naudojant femtosekundinį Carbide CB3-80W lazerį (*Light Conversion*), generuojantį GHz (2,2 ps) ir MHz (62,5 MHz) papliūpas (1 pav.). Pluoštas buvo fokusuojamas į 1,45 mm lydymo kvarco gylį pasinaudojus 100 mm židinio nuotolio telecentrinio f-theta lęšiu. Tokios sistemos skaitinė apertūra $\sim 0,04$. Modifikacijos buvo formuojamos su MHz ir GHz papliūpomis naudojant skirtingą papliūpos energiją bei skirtingą impulsų skaičių papliūpoje. Suformuotos modifikacijos buvo įvertintos su optiniu mikroskopu, matuojant jų išilginius bei skersinius ilgius bei skersinių modifikacijų kampą (2 pav.). Kiekvienam režimui įvertinti buvo matuojamos 10 modifikacijų iš kurių buvo apskaičiuotos vidutinės vertės bei standartiniai nuokrypiai.

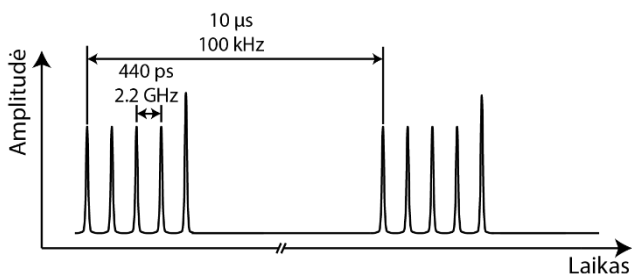
Eksperimente pademonstruotas modifikacijų formavimas lydyme kvarce naudojant papliūpų režimus. Nors modifikacijos buvo suformuotos ir su MHz ir su GHz papliūpomis, trumpesnė trukmė tarp papliūpoje esančių impulsų leido suformuoti tolygesnes išilgines modifikacijas. Eksperimente suformuotų modifikacijų skersiniai ilgiai leidžia manyti, jog su šiuo eksperimente naudojama įranga galima būtų pasiekti kelių m/s raižymo greitį.



2 pav. Modifikacijų formavimo schema (a) bei išilginių modifikacijų optinio mikroskopo nuotrauka (b). Čia L_L atitinka išilginių modifikacijų ilgį.

Literatūra

1. J. Dudutis, P. Gečys, and G. Račiukaitis, *Opt. Express* **24**, 28433 (2016).
2. A. S. Hosseini, P. R. Herman, Method of material processing by laser filamentation, U.S. patent US20130126573A1 (2013).
3. J. Li, E. Ertofer, and P. R. Herman, *Opt. Express* **27**, 25078 (2019).



1 pav. GHz papliūpų sudarytų iš 5 impulsų schema.

BESROVIS CHEMINIS VARIO MIKRO TAKELIŲ NUSODINIMAS ANT DIELEKTRIKO PAVIRŠIAUS

Modestas Sadauskas¹, Karolis Ratautas¹, Evaldas Kvietkauskas¹,
Viktorija Vrubliauskaitė¹, Gediminas Račiukaitis¹

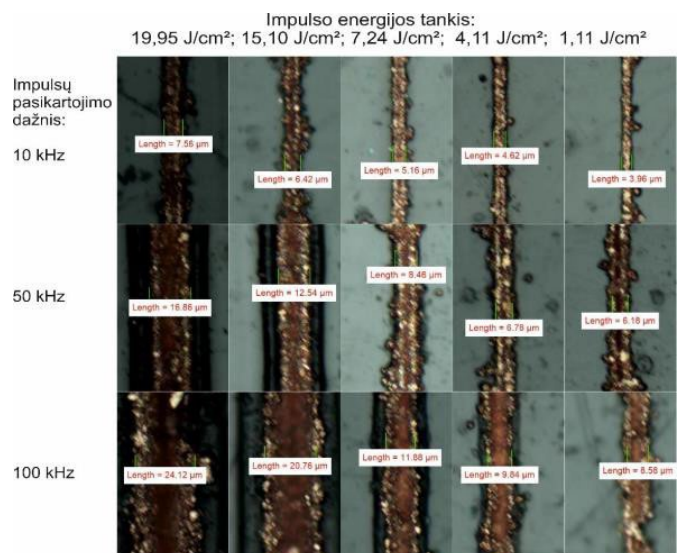
Fizinių ir technologijos mokslų centras, ¹Lazerinių technologijų skyrius,
²Katalizės skyrius Savanorių per. 231, LT-02300 Vilnius,
el. p.: modestas.sadauskas@ftmc.lt

Sparčiai besivystančiai elektronikos pramonei yra poreikis gaminti vis kompaktiškesnius bei funkcionalesnius produktus. Tam yra ieškoma naujų technologijų bei metodų. Selektyvus paviršiaus aktyvavimas lazerine spinduliuote arba SSAIL (*Selective Surface Activation Induced by Laser*) technologija galėtų būti viena iš technologijų taikoma elektrai laidžių takelių gamybai [1]. SSAIL procesą sudaro trys etapai: lazerinis paviršiaus modifikavimas impulsinio lazerio spinduliuote, modifikuotų vietų aktyvavimas joniniu kataliziniu tirpalu, besrovis cheminis vario nusodinimas aktyvuotose zonose. SSAIL procesas priklauso nuo įvairių lazerinių parametrų paviršiaus apdirbimo metu: impulsų pasikartojimo dažnis, impulsų trukmė, impulsų persiklojimo skenuojant pluoštą, impulso energijos, pluošto dydžio ant paviršiaus.

Geriausia žmogaus akis gali išskirti dvi linijas, kurios yra atskirtos maždaug 0,12 mrad kampų (pagal Relėjaus kriterijų laikant, jog vyzdžio dydis ~5 mm bei bangos ilgis 500 nm), tai atitiktų maždaug 24 μm atstumą tarp linijų žiūrint į jas 20 cm atstumu nuo veido. Objektai 40 μm pločio (žmogaus plaukas) yra išskiriami geros akies, tačiau laikoma, jog 20 μm pločio objektai nėra išskiriami. Suformavus siauresnius elektrinius takelius ant skaidraus paviršiaus, būtų galima teigti, jog paviršius išlieka skaidrus, tačiau papildomai įgyja tam tikrą laidumą, kuris jau galėtų būti alternatyva ITO (Indžio alavo oksido) paviršiams.

Tokių struktūrų formavimui ant silikatinio stiklo bei plonos, lanksčios polietileno tereftalato (PET) plėvelės buvo naudojamas šviesos konversijos Pharos lazeris su 320 fs impulso trukme, bei 515 nm spinduliuotės bangos ilgiu. Lazerio pluoštas buvo fokusuojamas mikroskopiniu objektyvu į maždaug 4 μm dydžio dėmę. Pluošto skenavimui buvo judinami XY stalai ant kurių buvo pritvirtinti dielektriko bandiniai. Skaidraus dielektriko paviršius buvo modifikuojamas naudojant skirtingas impulso energijas, impulsų pasikartojimo dažnį bei impulsų persiklojimą, norint įsivertinti kaip priklauso suformuotos ir metalizuotos linijos plotis nuo šių lazerinių parametrų. Paviršiaus modifikavimui taip pat buvo naudotas ir eksikonas, kuriuo buvo formuojamas Beselio pluoštas norint sumažinti

suformuotos linijos pločio priklausomybę nuo pluošto išfokusavimo pakitus atstumui tarp apdirbamo paviršiaus ir fokusuojančio elemento. Eksperimentiškai pademonstruota, jog naudojant SSAIL technologiją, ant skaidraus dielektriko galima suformuoti kelių mikrometrų pločio elektrai laidžias struktūras. Pastebėta, jog didinant impulsų pasikartojimo dažnį, norint padidinti proceso spartą, linijos išplatėja iki kelių kartų (Pav. 1). Proceso greitinimui buvo išbandyta impulsų praleidimo strategija, kuri anksčiau parodė teigiamus rezultatus su SSAIL technologija [2].



Pav. 1. Metalizuoti takeliai ant PET plastiko, paviršius modifikuojant skirtingomis impulso energijomis esant skirtingam impulsų pasikartojimo dažniui bet tam pačiam atstumui tarp impulsų (75 nm)

Literatūra:

1. K. Ratautas, A. Jagminienė, I. Stankevičienė, M. Sadauskas, E. Norkus, and G. Račiukaitis, Evaluation and optimisation of the SSAIL method for laser-assisted selective electroless copper deposition on dielectrics, *Results Phys.*, vol. 16, p. 102943, (2020).
2. K. Ratautas, V. Vosylius, A. Jagminienė, I. Stankevičienė, E. Norkus, and G. Račiukaitis, Laser-induced selective electroless plating on pc/abs polymer: Minimisation of thermal effects for supreme processing speed, *Polymers (Basel)*, vol. 12, no. 10, pp. 1–16, (2020)

OPTINIŲ ELEMENTŲ FORMAVIMO SKIRTUMAI NAUDOJANT PIKOSEKUNDINIUS IR FEMTOSEKUNDINIUS LAZERINIUS IMPULSUS

Laimis Zubauskas, Arnas Vyšniauskas, Edgaras Markauskas, Paulius Gečys

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

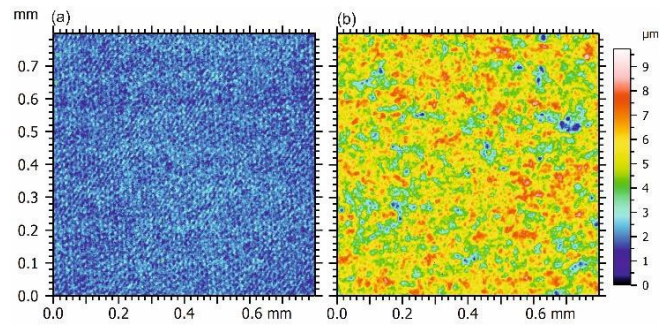
Nuolatos augantys optinių elementų paviršiaus kokybės reikalavimai skatina tobulinti gamybos technologijas. Tradicinis mechaninis stiklų apdirbimas tampa nepatrauklus dėl tiesioginės sąveikos tarp frezavimo įrankio ir medžiagos paviršiaus, kas lemia paviršiaus mechaninius pažeidimus [1]. Taip pat, sudėtingos formos paviršių mechaninis poliravimas yra neefektyvus dėl ilgo proceso trukmės ir rezultato tiesiogiai priklausančio nuo darbuotojo kvalifikacijos [2].

Lazerinės technologijos leidžia suformuoti norimos formos paviršius be mechaninio kontakto su medžiaga. Taip pat, fokusuojant lazerinę spinduliuotę yra galima formuoti $<1 \mu\text{m}$ dydžio struktūras ir gana tiksliai suformuoti optinį elementą [3]. Tačiau, toks elementas dar negali būti naudojamas optiniams taikymams dėl per didelio paviršiaus šiurkštumo – yra reikalingas paviršiaus poliravimo etapas, kuris gali būti atliktas taipogi panaudojant lazerinę spinduliuotę [4].

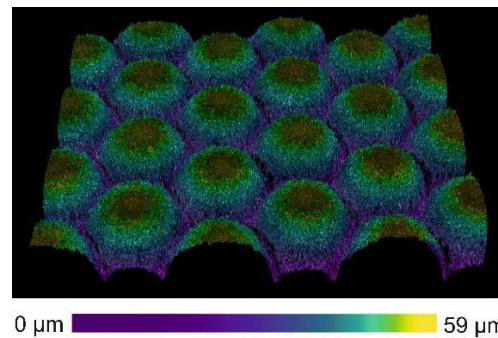
Optinių elementų formavimui dažnai yra pasirenkami femtosekundiniai lazeriai dėl stipresnės netiesinės sugerties ir dėl trumpesnės lazerinio impulso trukmės nei medžiagos termalizacijos laikas. Kita vertus, nėra tiesioginio palyginimo, kaip formavimo procesas priklauso nuo lazerinio impulso trukmės. Taigi, šiame darbe buvo atliekamas lydyto kvarco abliavimo tyrimas panaudojant pikosekundinį (10 ps) bei femtosekundinį (320 fs) lazerinius atitinkamai generuojančius 1064 nm ir 1030 nm bangos ilgio impulsus.

Eksperimentų metu buvo abliuojami $2 \times 2 \text{ mm}^2$ dydžio ploteliai siekiant pašalinti kuo plonesnį medžiagos sluoksnį. Papildomai buvo matuojami gautų plotelių paviršių šiurkštumai Sa. Gauti duomenys parodė, kad su femtosekundiniais impulsais buvo suformuotas apie 4 kartus mažesnio šiurkštumo paviršius (žr. 1 pav.). Taip pat abliacija buvo 2.4 kartų greitesnė.

Galiausiai abejomis lazerinio impulso trukmėmis ir išlaikant vienodas sąlygas buvo suformuotos lęšių matricos (žr. 2 pav.), kurios nupoliruotos iki optinės kokybės panaudojant CO₂ lazerį. Gauta, kad pikosekundiniais lazeriniais impulsais suformuotas elementas labiau sklaidė lazerinę spinduliuotę dėl 3 kartus didesnio galutinio paviršiaus šiurkštumo ir dėl galimų stiklo po paviršinių pažeidimų [5].



Pav. 1. Nufrezuotų paviršių topografijos, kai abliuota buvo su femtosekundiniais (a) ir pikosekundiniais (b) impulsais.



Pav. 2. Suformuotos lęšių matricos topografija. Vieno lęšio diametras yra 1 mm. Formuota su pikosekundiniais lazeriniais impulsais.

Literatūra

1. A. Temmler, C. B. Weingarten, B. Schober, and E. Uluz, *Applied Surface Science* **555**, 149609 (2021).
2. A. Temmler, E. Willenborg, and K. Wissenbach, *Proc. of SPIE* **8243**, 82430W-1 (2012).
3. G. Chen and J. Qiao, *Opt. Lett.* **47**, 3860 (2022).
4. S. Schwarz, and R. Hellmann, *J. Laser Micro Nanoengin.* **12**, 76–79 (2017).
5. C. Corbari, A. Champion, M. Gecevičius, M. Beresna, Y. Bellouard, and P. G. Kazansky, *Opt. Express* **21**, 3946 (2013).

LAZERINIS NERŪDIJANČIO PLIENO SPALVINIMAS ULTRATRUMPŲJŲ IMPULSŲ VOROMIS

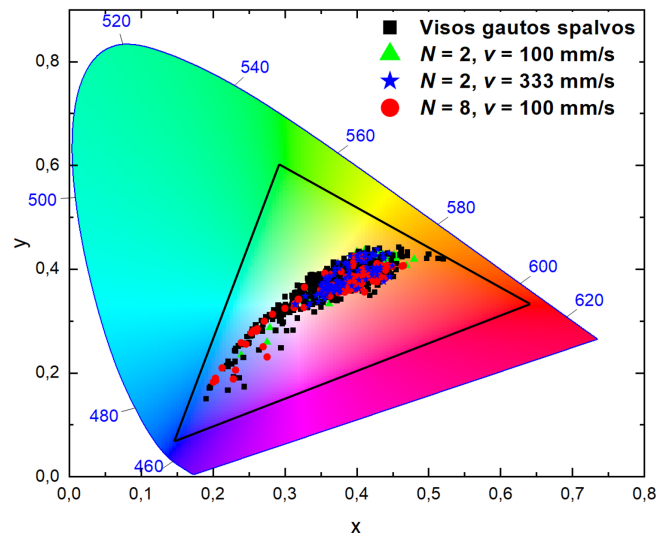
Mantas Gaidys¹, Algirdas Selskis², Paulius Gečys¹, Mindaugas Gedvilas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Medžiagų struktūrinės analizės skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: mantas.gaidys@ftmc.lt

Lazerinis spalvinimas yra ilgai išliekantis ir bekontaktis spalvinimo metodas, kuris yra atsparesnis aplinkos poveikiams nei kiti spalvinimo būdai. Lazerinis spalvinimas jau dabar yra naudojamas įvairiose pramonės šakose. Medicinoje jis naudojamas medicininių instrumentų ženklinimui spalvotomis žymomis, identifikavimo etiketėmis ar dekoratyviniais raštais. Kadangi lazeriniam spalvinimui nenaudojamos jokios cheminės medžiagos ar dangos, nekeliama papildoma rizika pacientams. Kitos taikymo sritys: pakuočių ir prekių ženklinimas, anti-klastotinė priemonė bei juvelyrinės pramonės. Šiuo metu yra 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] bei ženkliai pagerinti abliuojamo paviršiaus šiurkštumą [2]. Lazerinis spalvinimas priklauso nuo daugybės lazerinių bei medžiagos parametrų, todėl optimizuoti spalvinimą yra sunki ir daug laiko reikalaujanti užduotis. Šiame darbe, naudojant femtosekundinį lazerį skirtingų vorų režimuose buvo atliktas tyrimas, kurio metu lazeriu buvo spalvinamas nerūdijantis plienas. Eksperimente buvo tiriama spalvų priklausomybė nuo skirtingo impulsų kiekio vorose bei skirtingos vidutinės lazerinės galios. Naudojant MHz ir GHz vorų režimus buvo gautos tik rudos bei geltonos spalvos, tačiau naudojant bivoros režimą buvo gautas platus spalvų intervalas: mėlynos, violetinės, žalios, geltonos bei rudos spalvos. (1 pav.) matome, jog parametrų optimizavimas yra svarbi užduotis, nes parinkus optimalius parametrus (1 pav. raudoni apskritimai) yra gaunamas žymiai platesnis spalvų kiekis nei naudojant pusiau optimalius (1 pav. žali trikampiai) ar ne optimalius parametrus (1 pav. mėlynos žvaigždutės). Taip pat buvo tiriamos lazeriu apdirbto plieno paviršiaus su pakeistomis spalvinėmis charakteristikomis vandens drėkinimo savybės,

siekiant įvertinti gautų spalvų atsparumą aplinkos poveikiams. Buvo pademonstruota, jog visi ultratrumpų impulsų voromis nuspalvinti metalo paviršiai taip pat pasižymėjo ir hidrofobinėmis ar net kai kuriais atvejais superhidrofobinėmis savybėmis, kas daro paviršių savaime nusivalančiu, o tai lengvina priežiūrą bei didina tarnavimo laiką.



1 pav. CIE 1931 chromatiškumo diagrama. Juodas trikampis parodo visas įmanomas spalvas, kurias galima gauti naudojant XYZ spalvų modelį. Žali kvadratai – bivoros režimas su $N = 2$ impulsais MHz voroje, skenavimo greitis 100 mm/s; mėlynos žvaigždutės – bivoros režimas su $N = 2$ impulsais MHz voroje, skenavimo greitis 333 mm/s; raudoni apskritimai – bivoros režimas su $N = 8$ impulsais MHz voroje, skenavimo greitis 100 mm/s.

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).

KOMPAKTIŠKO PRIVERSTINĖS RAMANO SKLAIDOS KEITIKLIO KAUPINAMO GHz IMPULSŲ PAKETAIS KŪRIMAS

Raimundas Burokas^{1,2}, Lukas Kamarauskas², Kristupas Dagilis²,
Rokas Danilevičius², Andrejus Michailovas²

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

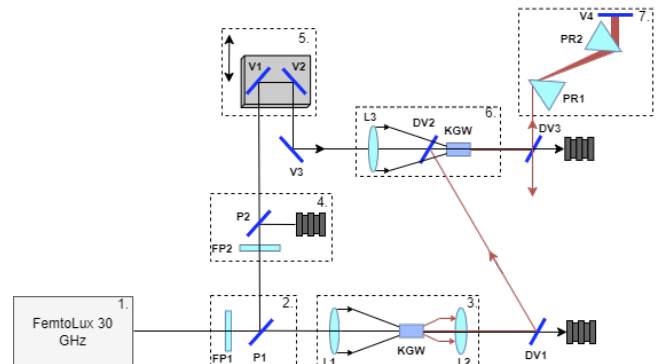
²Ekspla, UAB, Savanorių pr. 237, LT-02300 Vilnius

Biologinių audinių netiesinei mikroskopijai reikalingi lazeriniai šaltiniai, kurių bangos ilgis patenka į audinių skaidrumo langą (1,1 – 1,3 μm) ir turi mažus sklaidos sąlygotus nuostolius [1]. Tokiu būdu apšvietus artimosios infraraudonosios srities spinduliuote audiniuose sugeneruota antroji arba trečioji harmonika neturi destruktivaus poveikio ir yra lengvai registruojama.

Dėl riboto skaičiaus lazerinių šaltinių, kurie gali generuoti femtosekundinius impulsus šiame spektriniame diapazone, dažnai yra naudojama netiesinė šviesos konversija. Viena iš technologijų – optinis parametrinis stiprintuvas, kurio realizacijai reikia konstruoti dideles ir sudėtingas sistemas [2]. Kita alternatyvi technologija – priverstinė Ramano sklaida (SRS). Jos metu kaupinimo spinduliuotės bangos ilgis Ramano terpėje yra paslenkamas tam tikru, tai terpei būdingu dydžiu. Tokiu būdu įprastinių lazerių bangos ilgis gali būti pastumiamas į norimą sritį. Sąveikos efektyvumas per vieną lėkį Ramano stiprintuve dažniausiai yra mažas, todėl bangos ilgio keitimas gali būti realizuojamas patalpinant netiesinį kristalą į rezonatorių. Tipinis kaupinimo impulsų pasikartojimo dažnis (10-100 MHz) lemia kelis metrus siekiantį Ramano rezonatoriaus ilgį. Tokioje optinėje schemoje atsiranda dideli reikalavimai stabilizacijos sistemai ir ji negali būti kompaktiška. Ilgas rezonatorius yra jautresnis mechaniniui ir šiluminiui poveikiui, o kompaktizuojant jo optomechaninė schema darosi sudėtinga.

Šiai problemai spręsti, pasiūlytas metodas Ramano stiprintuvui realizuoti pasitelkiant GHz dažnio impulsų paketus. GHz dažnio impulsų paketas turi turėti skirtingo intensyvumo impulsus, kad pirmasis impulsas sugeneruotų superkontinuumą, o tolesni impulsai stiprintų sugeneruotus Ramano bangos ilgius tame pačiame kristale. Femtosekundiniai GHz impulsų paketai formuojami FemtoLux30 (Ekspla) lazeryje panaudojant aktyvią šviesolaidinę kilpą [3]. Prieš pradėdant konstruoti kompaktišką Ramano rezonatorių (kelių dešimčių cm eilės optinio kelio ilgio), kaupinamą GHz pasikartojimo dažnio impulsų paketais, reikia išsiaiškinti sugeneruotos Ramano spinduliuotės pluošto erdvines ir laikines savybes. Taip pat svarbu iširti superkontinuumo generacijos ir SRS stiprinimo

savybes. Šiam tikslui buvo surinkta vieno lėkio Ramano stiprintuvo schema, pavaizduota 1 pav. Šiame darbe pristatomi SRS stiprinimo ir laikinio spaudimo rezultatai ultratrumpais impulsais. Užkratui buvo naudojamas superkontinuumas, sugeneruotas 4 mm ilgio KGW kristale, panaudojant nedidelę dalį lazerio energijos. Likusi spinduliuotės dalis buvo naudojama SRS stiprinimui. Užkratas ir kaupinimas buvo suderinti laike panaudojant vėlinimo liniją ir sutapatinti erdvėje nekolineariai sąveikai 10 mm ilgio KGW kristale. Nustatyta optimali impulso energija (~500 nJ) reikalinga sugeneruoti superkontinuumą su kuria pasiekiamas 18 kartų stiprinimas SRS stiprintuve, panaudojant 26 J kaupinimo energiją. Išmatuota impulsų trukmė po SRS stiprintuvo buvo 418 fs, o priziminiame spaustuve suspausta iki 109 fs. Daugiau rezultatų bus pristatyta konferencijos metu.



1 pav. Eksperimentinė schema: 1. Lazerinis šaltinis 2. Poliarizacinis pluošto daliklis 3. Superkontinuumo generacijos dalis 4. Atenuatorius 5. Vėlinimo linija 6. SRS stiprintuvas 7. Prizminis impulsų spaustuvas.

Literatūra

1. L. van Huizen, N.V. Kuzmin, E. Barbé, S van der Velde, E.A. te Velde, M.L. Groot, J. Biophotonics. **12(6)**, e201800297 (2019)
2. M. Eremchev, D. Roesel, P.-M. Dansette, A. Michailovas, S. Roke, Biointerphases, **18**, 031202 (2023)
3. T. Bartulevicius, M. Lipnickas, V. Petrauskiene, K. Madeikis, and A. Michailovas, Opt. Express **30**, 36849-36862 (2022).

ALUMINIUM DOPED SILVER FILMS FOR SPACE APPLICATIONS

Ignas Bitinaitis

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

Compared to other metals, silver-based coatings show great perspective in plasmonic applications as silver has highest reflectivity as well as lowest polarization splitting in broad VIS-IR (400 - 10 000 nm) wavelength range [1, 4]. Also, silver (Ag) has the highest figure of merit (FoM) for plasmonic applications ($FoM = \text{Re}\{\epsilon\}/\text{Im}\{\epsilon\}$ [4]) of any plasmonic material in visible and near infrared range wavelengths [5]. Traditionally, silver coatings are successfully applied as telescope mirrors for terrestrial and space exploration missions.

To increase silver-based thin films performance, aluminum doped silver films are being researched. Recent study has shown Al doping concentrations of 1 - 2 % in Ag layer are beneficial as they induce favorable changes in the dielectric function by increasing alloy electron-to-atom ratio [2], smoothens film surface roughness and enhances film thermal stability [12]. Aluminum concentrations in silver films above 2% increases dielectric function imaginary part values, which resemble increase in film optical losses [2], despite further decreasing surface roughness [3]. Decreased surface roughness induces AgAl film permittivity and thus conductivity at much lower film thickness of 6 nm compared to 11 nm in pure Ag films [6] - highly promising factor for plasmonic devices and hyperbolic materials.

An increase of Al content up to 15 % in Ag-Al films reduced surface roughness, nevertheless it leads to the decrease of reflectance in the UV region. Higher Al content is deleterious due to an altered band structure associated with reflectivity loss in the UV region. Surface roughness of the Ag-Al mirrors decreased with an increase of Al content from $R_q = 1.7$ nm (0 % Al) to $R_q = 0.8$ nm (15 % Al). It is caused by Al having lower diffusion due to higher nuclear density and smaller particle size compared to Ag. In current investigation optimum concentration of Al doping is 8 %. Using such Al concentration, surface roughness was reduced by ≈ 52 % compared to pure Ag mirror.

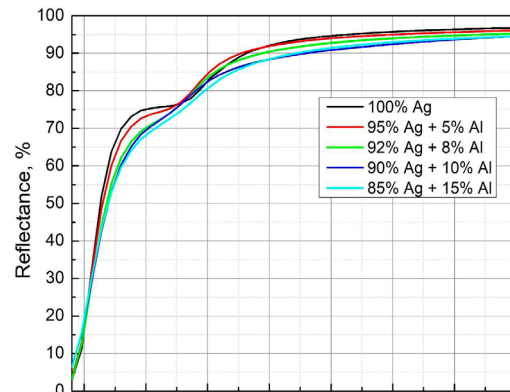


Figure 1. Reflectance spectra of deposited Al-doped silver mirrors in 230-1300 nm and 320-500 nm range.

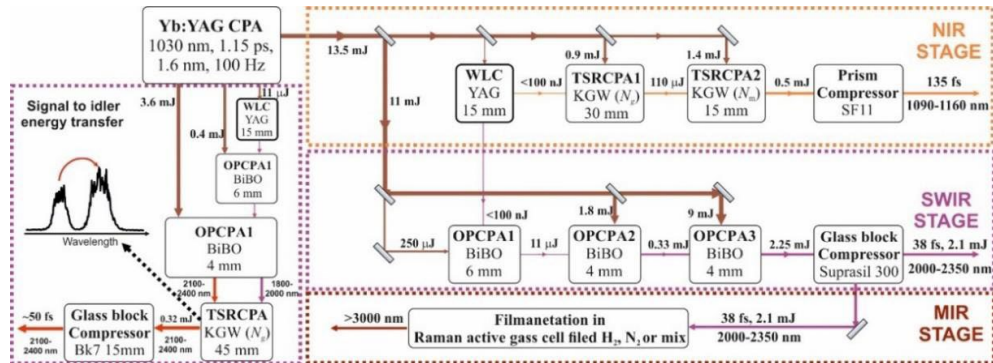
References

1. Thomas, N.L., Wolfe, J.D. and Farmer, J.C., 1998, August. Protected silver coating for astronomical mirrors. In *Advanced Technology Optical/IR Telescopes VI* (Vol. 3352, pp. 580-586). SPIE.
2. De Silva, K.S., Keast, V.J., Gentle, A. and Cortie, M.B., 2017. Optical properties and oxidation of α -phase Ag-Al thin films. *Nanotechnology*, 28(9), p.095202.
3. Gu, D., Zhang, C., Wu, Y.K. and Guo, L.J., 2014. Ultrasmooth and thermally stable silver-based thin films with subnanometer roughness by aluminum doping. *ACS Nano*, 8(10), pp.10343-10351.
4. Heaney, J.B., Kauder, L.R., Freese, S.C. and Quijada, M.A., 2012. Preferred mirror coatings for UV, visible, and IR space optical instruments. *Earth Observing Systems XVII*, 8510, pp.167-177.
5. Blaber, M.G., Arnold, M.D. and Ford, M.J., 2010. A review of the optical properties of alloys and intermetallics for plasmonics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(14), p.143201.
6. Gu, D., Zhang, C., Wu, Y.K. and Guo, L.J., 2014. Ultrasmooth and thermally stable silver-based thin films with subnanometer roughness by aluminum doping. *ACS Nano*, 8(10), pp.10343-10351.

DIDELĖS ENERGIJOS KELIŲ OPTINIŲ CIKLŲ NIR-SWIR-MIR DIAPAZONO LAZERINĖ SISTEMA

Augustinas Petrulėnas, Paulius Mackonis, Augustė Černeckytė, Aleksej Rodin

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



Pav. 1. NIR-SWIR-MIR lazerinės sistemos eksperimentinė schema.

Femtosekundiniai lazeriniai šaltiniai trumpojo ir vidutinio infraraudonojo spektro (SWIR-MIR) bangų ilgių diapazone (2-3 μm) yra naudingi spektroskopijos, stipriojo lauko fizikos, chemijos, biologijos ar medicinos srityse. Taip pat aukštųjų harmonikų, atosekundžių eilės koherentinę rentgeno ar didelės galios THz spinduliuotės generavimo efektyvumas ženkliai auga didėjant lazerinės spinduliuotės bangos ilgiui. O norint generuoti atosekundinės eilės impulsus sintezės būdu, reikia ne tik padidinti didelės energijos kelių optinių ciklų impulsų bangos ilgį, bet ir sukurti didelio intensyvumo lazerines sistemas, veikiančius vienu metu NIR, SWIR ir MIR diapazonuose su vidine sinchronizacija [2].

Šiame darbe yra pristatoma lengvai atkuriamą didelės energijos kelių optinių ciklų multispektrinę lazerinę sistemą, pagrįstą optiniu parametriniu čirpuotų impulsų stiprinimu (OPCPA) ir nenuostoviuoju priverstiniu čirpuotų impulsų Ramano stiprinimu (TSRPCA) su kelių oktavų superkontinuumo (SC) spinduliuote kaip užkrato šaltiniu ir 1.2 ps Yb:YAG kaupinimo lazeriu. Taip pat pirmą kartą pademonstravome, kad TSRPCA gali papildyti OPCPA stiprinant šalutinės bangos spinduliuotę.

Lazerinės sistemos eksperimentinė schema pavaizduota 1 pav. Bendras SC, OPCPA ir TSRPCA kaupinimo šaltinis yra dviejų pakopų Yb:YAG čirpuotų impulsų stiprintuvas (CPA), kurio išvadinių impulsų energija yra iki 20 mJ [3]. SC impulsai 1050-2400 nm spektro diapazone kurie naudojami kaip užkrato šaltinis tiek TSRPCA, tiek OPCPA buvo generuojami YAG kristale, naudojant nedidelę dalį kaupinimo impulso energijos. SC spinduliuotė NIR srityje buvo stiprinama dviejose TSRPCA pakopose KGW kristaluose, orientuotais atitinkamai į 901 ir 767 cm^{-1} vibracinės modas. Sustiprintų impulsų spektrinė juosta siekė ~40 nm, o po TSRPCA impulsai buvo suspausti naudojant SF11 prizmes iki ~135 fs. Šio stiprintuvo efektyvumas siekė

>30%. Tuo tarpu SC SWIR-MIR spektrinis diapazonas 1900-2400 nm sustiprintas trijų pakopų nekolinearios konfigūracijos OPCPA, naudojant BiBO kristalais. Sustiprintų impulsų impulsų spektrinė juosta siekė >300 nm, o išvadinių impulsų energija 2.2 mJ su rekordiniu 27% keitimo efektyvumu. Taip pat sustiprinti impulsai buvo suspausti Suprasil-300 stiklo bloke iki 38 fs. Šie impulsai bus nukreipti į aukšto slėgio dujų kamerą, užpildytą H₂, N₂, SF₆ ir jų mišiniais, siekiant išplėsti spektrą MIR srityje sužadinant rotacinį TSRPCA. Tuo tarpu norint padidinti šalutinės bangos spinduliuotės energiją buvo panaudota kolinearios konfigūracijos OPCPA ir TSRPCA. Kaip kaupinimas ir Stokso užkratas buvo naudojami signalo ir šalutinės bangos išvadiniai impulsai po OPCPA. TSRPCA buvo naudota 45 mm KGW kristalas orientuotas ties 767 cm^{-1} Ramano poslinkiu. Po stiprinimo šalutinės bangos energija padidėjo >30%, o impulsais su BK7 stiklu buvo suspausti iki 53 fs.

Taigi mes sukūrėme NIR-SWIR-MIR lazerinę sistemą, pagrįstą kelių oktavų SC, OPCPA ir TSRPCA kaupinimą su 1.2 ps Yb:YAG CPA. TSRPCA pakopos naudojant KGW, sudaro didelės energijos femtosekundinį lazerio šaltinį, kurio centrinis bangos ilgis yra 1120 nm. Tuo tarpu trijų pakopų OPCPA su BiBO kristalais sudaro SWIR-MIR 38 fs lazerio impulsų šaltinį, kurio išvadinių energija yra ~2,1 mJ. Galiausiai OPCPA kartu su TSRPCA gerokai padidina išvadines bangos impulsų energiją SWIR diapazone. Taip pat didelės energijos kelių optinių ciklų SWIR impulsai bus nukreipti į aukšto slėgio dujų kiuvetes generuoti kaskadinę rotacinę priverstinę Ramano sklaidą išplėsti impulsų spektrinę juostą link 3 μm .

Literatūra

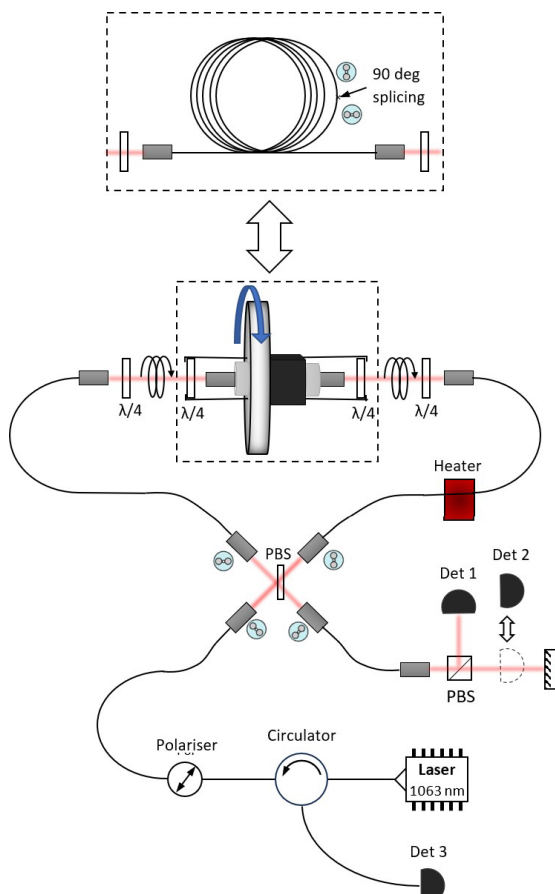
1. S. Ghimire, A.D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L.F. DiMauro, and D.A. Reis, *Ant. Phys.* **7**, (2011).
2. S.W.Huang, G. Cirmi, J. Moses, K. H. Hong, S. Bhardwaj, J. R. Birge, L. J. Chen, E. Li, B.J. Eggleton, G. Cerullo and F. X. Kartner, *Nat. Photon.* **5**, (2011).
3. P. Mackonis and A.M. Rodin, *Opt. Express*, **28**, 2 (2020).

SANJAKO EFEKTU PAGRĮSTAS NEAPGRĘŽIAMAS FAZĖS POSTŪMIO ĮRENGINYS

Jaroslav Kodz, Kęstutis Regelskis, Nikolajus Gavrilinas, Julijanas Želudevičius

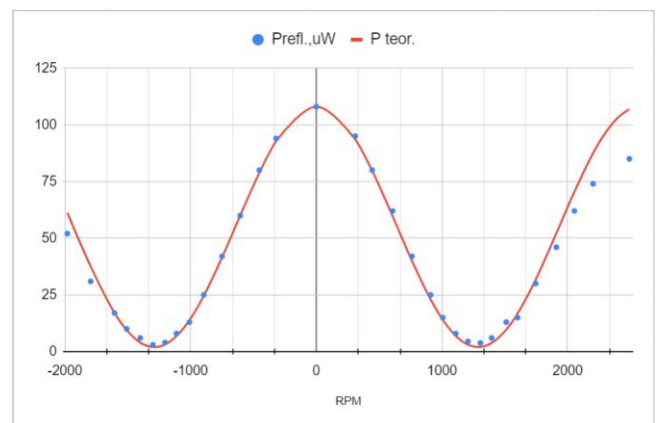
Fizinių ir technologijos mokslų centras, lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, el. p.: jaroslav.kodz@ftmc.lt

Ankstesniame darbe mūsų grupė pademonstravo modifikuotą Sanjako (Sagnac) interferometro schemą, kuri gali veikti kaip optinis izoliatorius. Tokio prietaiso esminę dalį sudaro greitai besisukantis diskas, ant kurio sumontuotas skaidulinis Sanjako interferomentras [1]. Fazės poslinkis atsiradęs dėl Sanjako efekto priklauso nuo šviesos sklidimo krypties disko sukimosi atžvilgiu ir prie tam tikro greičio jis yra lygus $\pm\pi/2$. Įvedus papildomą fiksuotą fazės poslinkį $\pi/2$ mes gausime bendrą fazės poslinkį π šviesai sklindančiai kryptimi sutampančia su disko sukimosi kryptimi ir 0 šviesai sklindančiai priešinga kryptimi. Naudodami du lygiagrečius, tačiau priešinga kryptimi orientuotus kanalus, kuriais sklinda šviesa, mes galime šį tarp kanalų atsiradusį fazių skirtumą panaudoti polarizacijos pasukimui ir pluoštų atskirimui ant polarizuojančių elementų. Tokių būdu šviesa įvesta į sistemą per tam tikros polarizacijos kanalą, grįžta tuo pačiu keliu atgal ir išeina pro kitą, orientuotą statmenai įvedimo kanalui.

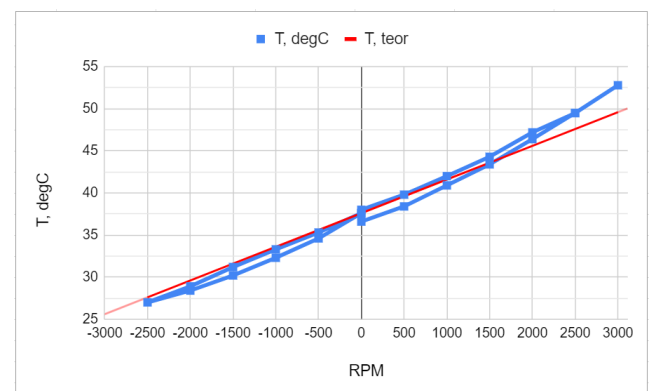


1 pav. Eksperimento schema.

Šiame darbe mes ištyrinėjome alternatyvią tokio prietaiso schemą (1 pav.). Taipogi susikoncentravome ne tik į patį šviesos blokavimo aspektą, bet ir į kitą šio prietaiso savybę - neapgrėžiamą fazės postūmį. Poliarizuota lazerinio diodo šviesa praeina pro Sanjako kilpą ir išeina per polarizacinį kubą į galios matuoklius *Det 1* ir *Det 2*. Čia ji yra atspindima veidrodžio pagalba ir grąžinama į sistemą atgal tuo pačiu keliu. Matuoklis *Det 3* fiksuoja grįžtančios šviesos galią. Skaidulos atkarpos temperatūra yra parenkama taip, kad būtų pasiektas maksimalus pralaidumas pro polarizacinį kubą (min. ant *Det 1*). Grįžtančio spindulio galia, kurį atitinka nekompensuojamą fazės postūmį pavaizduotą 2 pav., o temperatūros kreivė 3 pav.



2 pav. Išmatuota grįžtančios šviesos galios priklausomybė nuo disko sukimosi greičio (aps./min).



3 pav. Temperatūros kreivė prie skirtingų disko greičių.

Reikšminiai žodžiai: neapgrėžiamas fazės poslinkis, Sanjako efektas, optinis izoliatorius.

Literatūra:

[1] K. Regelskis, J. Kodz, N. Gavrilinas, J. Želudevičius, Polarization-dependent four-port fiber optical circulator based on Sagnac effect, Optics Express 31(3), DOI:10.1364/OE.476262

A DYNAMIC METHOD TO DETERMINE THE ELASTICITY OF ADDITIVELY MANUFACTURED CERAMIC COMPOSITE SPECIMENS

Alireza Shahidi

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Laser Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: Alireza.shahidi@ftmc.lt

Introduction:

Additive manufacturing has revolutionized the production of advanced materials, enabling the creation of intricate ceramic composite specimens with remarkable properties. These materials find applications in diverse fields, from aerospace to biomedical engineering. To ensure the structural integrity and performance of these composites, it is crucial to accurately determine their elasticity, including the Young's modulus and damping ratio. In this article, we present a dynamic method for the precise evaluation of these mechanical properties through modal and harmonic analysis.

Principle of Modal Analysis:

Modal analysis is a widely adopted technique for understanding the dynamic behavior of structures. It involves exciting a specimen at various frequencies and recording its response to determine the natural frequencies and mode shapes. The Young's modulus can be obtained from the natural frequencies using the formula:

$$E = \frac{\rho \omega^2}{\varphi^2}$$

where E is the Young's modulus, ρ is the material density, ω is the natural frequency, and φ is the mode shape [1]. Furthermore, modal analysis also offers insights into the damping characteristics of the material, which are crucial in assessing its energy dissipation abilities [2].

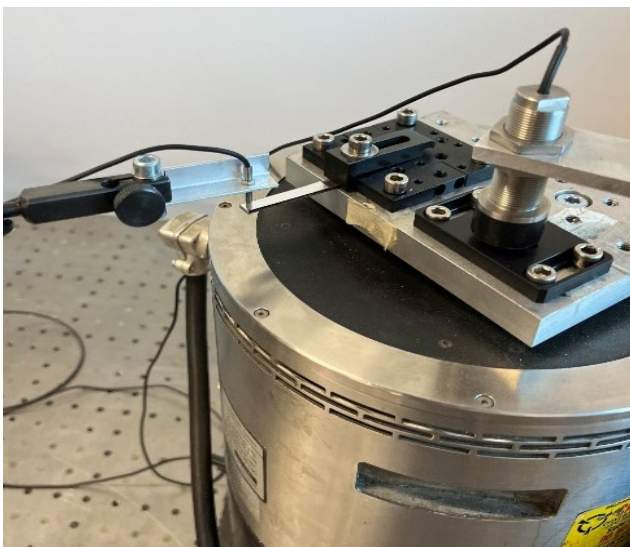


Figure 1. Harmonic analyze setup.

Principle of Harmonic Analysis:

Harmonic analysis complements modal analysis by focusing on the response of a specimen to harmonic excitation at specific frequencies. By applying a known force, we can measure the specimen's displacement response. The Young's modulus and damping ratio can be derived from the amplitude and phase lag of the response, respectively [3].

Conclusion:

The dynamic method presented in this article provides a robust and accurate means of determining the Young's modulus and damping ratio of additively manufactured ceramic composite specimens. By employing modal analysis, we gain insights into the material's natural frequencies and mode shapes, which are essential for predicting its behavior under various loads. Harmonic analysis, on the other hand, offers valuable information about the material's response to specific frequency inputs, helping us understand its elasticity and energy dissipation characteristics.

Understanding these mechanical properties is critical for optimizing the design and performance of ceramic composites, leading to advancements in a wide range of applications. As additive manufacturing continues to evolve, the ability to assess the elasticity of these innovative materials dynamically will be invaluable.

References:

1. Smith, J. R., et al. (2019). Modal Analysis Techniques for Material Characterization. *Materials Science Journal*, 43(4), 567-578.
2. Brown, A. P., et al. (2020). Dynamic Analysis of Additively Manufactured Ceramic Composites. *International Journal of Engineering Research*, 15(2), 123-137.
3. Johnson, K. L. (2018). *Contact Mechanics*. Cambridge University Press.

INFLUENCE OF POWDER PARTICLE SIZE ON THE CHARACTERISTICS OF ALLOYS FORMED BY DIRECT METAL LASER SINTERING

Ada Steponavičiūtė, Ričardas Petkus, Karolis Stravinskas, Genrik Mordas

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

Additive manufacturing (AM) is a manufacturing technology used for 3D object production which opens a pathway to fabricate complex parts due to the high geometrical flexibility of the technology [1]. Direct Metal Laser Sintering (DMLS) is one of the most widely applied metal AM technologies, where, in a layer-by-layer fashion, bulk parts are created by selective sintering and consolidation of thin powder layers using a laser beam [2]. DMLS can be used for part fabrication using different metals and their alloys, but in order to ensure uniform formation of a metal alloy by DMLS it is necessary to understand how the quality of the alloy changes depending on the size distribution of the metal particles used.

In this study, test specimens were produced from 17-4PH stainless steel powder of three different particle size distributions: 0-40 μm , 40-63 μm and 0-63 μm . Powder screening was performed in-house with a laboratory powder screening device. Different volumetric energy density values ranging from 20 to 80 J/mm^3 were applied in the EOSINT M280 DMLS machine for specimen manufacturing.

Specimens were evaluated by performing their density, hardness and surface roughness measurements.

The measurement results have shown that for all three powder mixtures (0-40 μm , 40-63 μm and 0-63 μm) the best density, hardness and surface roughness values are achieved when the volumetric energy density applied during the printing process was in the range from 65 to 75 J/mm^3 . The specimens printed from the powder mixture with a particle size distribution of 0-40 μm had the highest density (7.755 g/cm^3), hardness (98.6 HRB) and surface roughness (7.466 μm) values while specimens printed from the powder mixture with a particle size distribution of 40-63 μm had the lowest: 7.677 g/cm^3 , 93.6 HRB and 15.946 μm accordingly.

References

1. L. Hitzler, M. Merkel et al., A Review of Metal Fabricated with Laser- and Powder-Bed Based Additive Manufacturing Techniques: Process, Nomenclature, Materials, Achievable Properties, and its Utilization in the Medical Sector, Advanced Engineering Materials Volume 20, Issue 5 (2018).
2. B. Song, S. Dong et al., Microstructure and tensile properties of iron parts fabricated by selective laser melting, Optics & Laser Technology 56, 451-460 (2014).

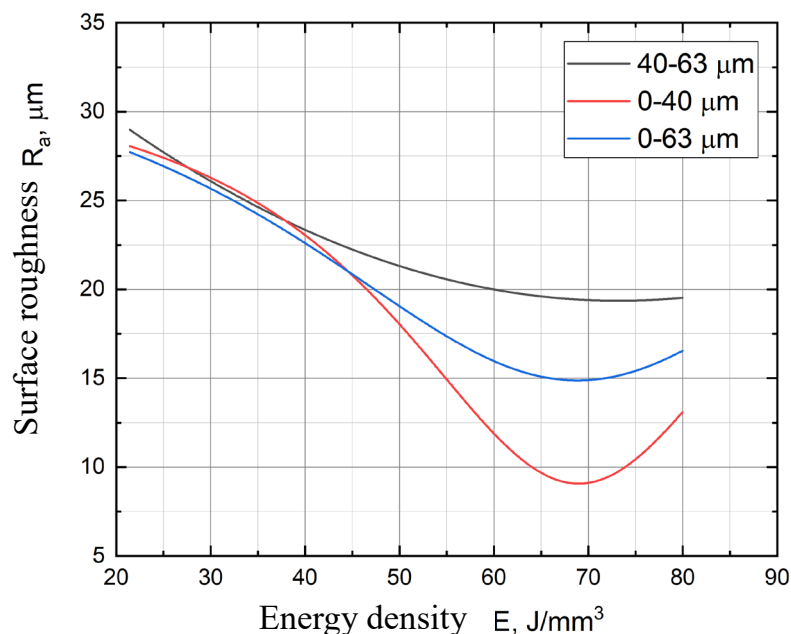


Fig. 1 Surface roughness of samples printed from powder mixtures with a different particle size distribution.

TIMING RESOLUTION OF LOW GAIN AVALANCHE DETECTORS AFTER IRRADIATION UP TO HIGH FLUENCES

Augustė Bielevičiūtė^{1,2}, Erik Brücken² and Timo Hildén²

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

² Helsinki Institute of Physics, P.O Box 64, FI-00014 University of Helsinki, Finland

The high luminosity upgrade of the Large Hadron Collider (LHC) will result in higher particle collision rates, but current equipment is not up to par with this future era of operations. Identification and reconstruction of hard interactions may be hampered by the spatial overlapping of particle tracks and energy deposits from additional collisions, and this often leads to false triggers. In addition, current particle detectors suffer from radiation damage that severely affects the accuracy of results and detector longevity [1]. The new minimum ionizing particle (MIP) timing detector will be equipped with low gain avalanche detectors (LGADs) which have a small timing resolution that helps with accurate particle track reconstruction and their thin design limits radiation damage over time [2].

The aim of this work was to build an experimental set-up to study the timing resolution of these detectors closely. The set-up consisted of two parallel LGADs that recorded signals of incident particles. The time difference between two triggers was used to estimate the timing resolution, which depends on multiple factors: Landau fluctuations, Time-Walk, jitter, distortion and time-to-digital. With this experimental set-up the challenge was to minimize these contributions to get an accurate timing resolution.

Firstly, the experimental set-up was built and characterized using reference samples with known timing resolution. Later the measurements were performed with highly irradiated samples to study how radiation damage impacts the detector accuracy. The bottom sensor was cooled by a Peltier cooler to reduce annealing and noise due to the radiation damage. The results were analyzed using Python and a result of 33 ± 2 ps (Fig. 1) was measured for the reference samples and 62 ± 2 ps for the 8.0×10^{14} proton irradiated sample. This work also included a study of different particle pulse signal analysis techniques, most notably the constant fraction discrimination, which is used to reduce the effects of Time-walk. It was found that a value of 35% provided the most accurate results.

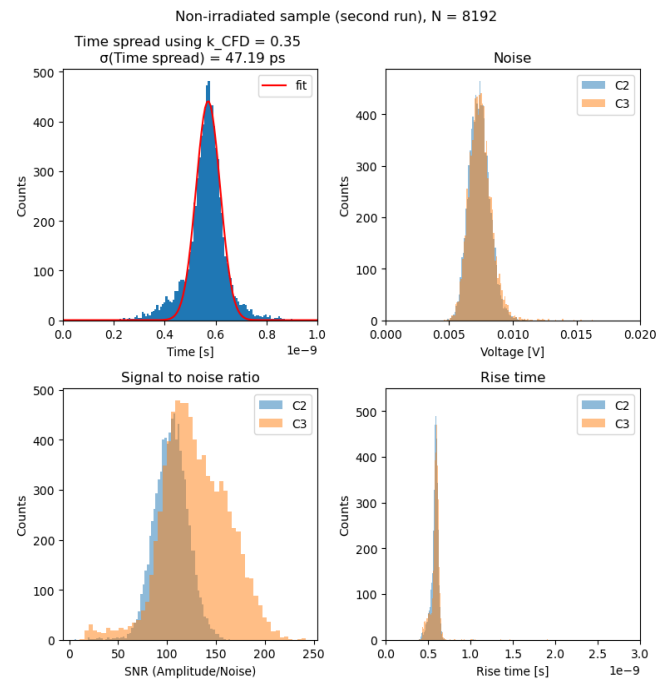


Figure 1. Results of a reference sample, where timing resolution was measured to be 33 ± 2 ps. Top left – Timing difference histogram with a Gaussian fit, top right – noise of both detectors, bottom left – signal-to-noise ratio, bottom right – rise time of signal. C3 indicates the sensor on the bottom of the set-up and C2 the top sensor.

References

1. CMS Collaboration, *A MIP Timing Detector for the CMS Phase-2 Upgrade*. CERN, 2019.
2. Giacomini, Gabriele. "LGAD-Based Silicon Sensors for 4D Detectors." *Sensors*, vol. 23, no. 4, Feb. 2023, p. 2132. Crossref, <https://doi.org/10.3390/s23042132>

AKTYVAUS GALAKTIKOS BRANDUOLIO KURIAMOS TĖKMĖS POVEIKIS ŽVAIGŽDĖDARAI

Martynas Laužikas, Kastytis Zubovas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, fundamentinių tyrimų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: martynas.lauzikas@ftmc.lt

Dauguma masyvių galaktikų centre turi itin masyvią judąją skylę (SMBH). Ji suformuoja didžiausio šviesio, pastoviai šviečiančius objektus Visatoje - aktyvius galaktikų branduolius (AGN), kurie yra neatsiejamas masyvių galaktikų evoliucijos etapas. Aktyvumo epizodai yra būdingi didelę santykinę dujų masę turinčioms galaktikoms, tipiniu atveju tai jaunos diskinės galaktikos.

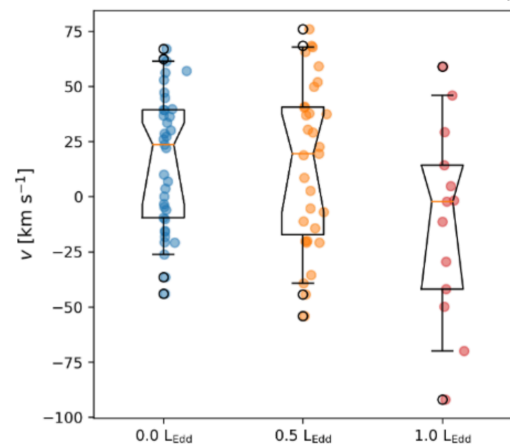
Diskinėms galaktikoms yra būdinga skersė - kelių kpc dinaminė struktūra suformuojanti besisukantį potencialą. Šis potencialas formuoja medžiagos srautus į centrinę galaktikos dalį, kur šios dujos suformuoja kelių šimtų parsekų skersmens žiedines-diskines struktūras apibūdinamas kaip centrinė molekulinė zona (CMZ). Šioje zonoje vyksta žvaigždėdara, o susikaupusios dujos patekusios į SMBH aplinką suformuoja AGN kuris sukuria grįžtamąjį ryšį.

AGN spinduliuotei artėjant prie Edingtono ribos (L_{Edd}), medžiaga efektyviai išstumama iš gravitacinio potencialo, suspaudžia supančias dujas, formuoja smūgines bangas - susiformuoja tėkmės. Būdingi tėkmių greičiai yra keli šimtai, tačiau gali siekti ir tūkstančius km s^{-1} . Šios tėkmės tipinius molekulinis debesis suardo, žvaigždėdara yra slopinama. Tačiau CMZ esantys molekuliniai debesis nėra tipiniai, pasižymi eilėmis didesniu vidutiniu tankiu bei temperatūromis lyginant su žvaigždėdaros regionais galaktikos diske. Šias CMZ esančias tankias dujas AGN suformuotos tėkmės gali suspausti ir inicijuoti ar paspartinti jau vykstančią žvaigždėdarą.

Ne išimtis yra ir mūsų Galaktika, nors šiuo metu ji nėra aktyvi, pasižymi maža spinduliuote iš centrinės SMBH, tačiau virš galaktikos disko esantys kiloparsekų dydžio Fermi burbulai rodo galimą aktyvumo epizodą per kelis pastaruosius mln. metų. Dėl stebėjimų duomenų gausos tikslinga ištirti sistemos artimos mūsų Galaktikos centrinei daliai evoliuciją ir nustatyti AGN aktyvumo epizodo poveikį CMZ esančios dujos, žvaigždėdaros spartai bei susiformavusių žvaigždžių dinamikai.

AGN suformuotos tėkmės ir CMZ sąveikos tyrimui pasirinktas hidrodinaminis modeliavimas. Darbe naudojamas hibridinis SPH/N-kūnų kodas GADGET 4 [1]. Modeliuojama dujų hidrodinamika, gravitacija, šiluminiai procesai, AGN grįžtamasis ryšys ir žvaigždėdara.

Modeliuojama 3 kpc spindulio centrinė galaktikos dalis, kurios savybės artimos mūsų Galaktikai. Centre patalpinta $4 \times 10^6 M_{\odot}$ SMBH, kurią supa 80-160 pc spindulio CMZ, kurį papildo skersės dujų srautas. Modeliuojamos 3 sistemos kurių AGN šviesiai - 0,0; 0,5; 1,0 L_{Edd} .



1 pav. Žvaigždžių spiečių radialiniai greičiai SMBH atžvilgiu. AGN šviesis didėja iš kairės į dešinę.

Pateikti vidurkiai, kvartilai bei individualių spiečių greičiai (spalvoti apskritimai).

Nustatyta, kad AGN aktyvumas pašalina dujas iš centrinių dešimčių pc, suformuodamas asimetrinį tankių dujų žiedą būdingą stebimai Galaktikos CMZ. Šio žiedo morfologija bei dujų savybės mažai priklauso nuo AGN šviesio, tačiau esant vidutiniam 0,5 L_{Edd} šviesiui išauga žvaigždėdaros sparta, o susiformavę spiečiai savo mase yra artimi Galaktikos CMZ būdingiems spiečiams. Bet spiečių orbitos dera su stebėjimų duomenimis tik esant Edingtono šviesiui (1 pav.). Tai rodo, kad dabartinė Galaktikos CMZ būklė yra $\sim L_{\text{Edd}}$ šviesio AGN epizodo įvykusio prieš 5-7 mln. m. rezultatas, o masyvių spiečių dešimčių pc nuo SMBH egzistavimas yra galimas galaktikos aktyvumo indikatorius.

Literatūra

- [1] Springel V., Pakmor R., Zier O., Reinecke M., Simulating cosmic structure formation with the GADGET-4 code, MNRAS (2021).

INFLUENCE OF SILICON CARBIDE ON ALLOYS FORMED BY LASER METAL 3D PRINTING

Karolis Stravinskas

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

17-4 PH stainless steel is one of the most commonly used materials in the SLS process Fig. 1 due to its mechanical properties and corrosion resistance. Despite these advantages, the alloy has a rough surface and is known for its brittleness. Ceramic materials are not suitable for direct laser sintering, but are increasingly being used as a fastening material for a metal matrix. The search for metal-ceramic composite mixtures with thermal conductivity, low expansion coefficient and strength is becoming one of the most important research directions in the field of high technology.

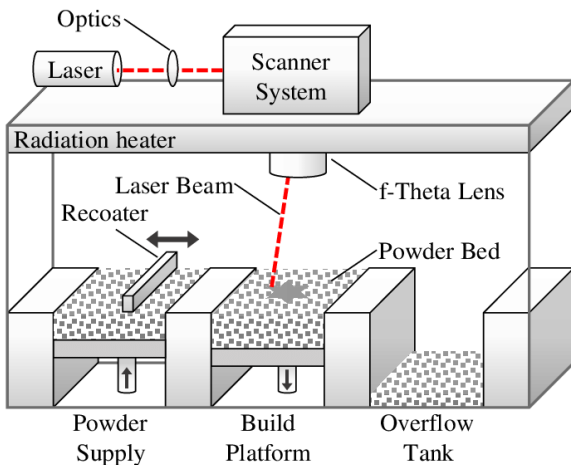


Fig 1. Schematic diagram of Selective Laser Sintering [1]

17-4 PH metal material and metal-ceramic composite mixture of which 94% of the mass consists of 17-4 PH powder and the remaining 6% - SiC ceramic particles are used for the study Fig.2. During the experiment, an EOS M280 laser printing machine is used to form 3D objects. During all printing processes, the powder layer thickness of 40 μm is maintained, as well as the hatching distance of 100 μm and the laser power, which reaches 164 W. The laser scanning speed is changed, obtaining different energy densities, which are selected as 61, 67 and 73 J/mm^3 . The obtained samples were analysed by using SEM EDS, optical profilometer, as well as performing density, strength and hardness measurements.

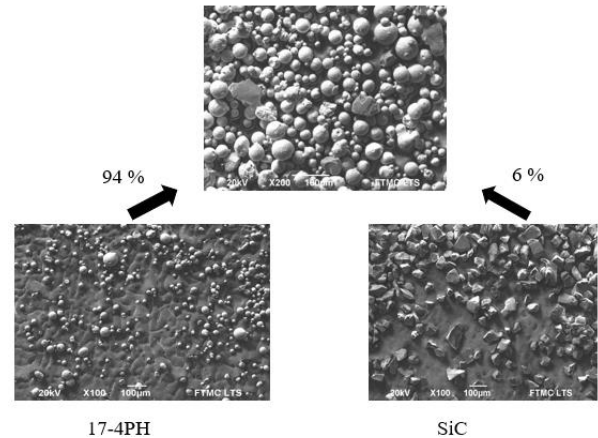


Fig 2. Composite mixture of 17-4PH stainless steel and SiC.

It was found that the surface of the composite alloy has a more uniform surface, the roughness is reduced by 30% and ranges from 8 to 16 μm , and of the 17-4 PH material from 12 to 26 μm depending on the energy density. The mechanical property measurement results showed that the strength limit of the composite material dropped by 20% and reached 766 MPa, while for the 17-4 PH material it was 988 MPa. The hardness of the 17-4 PH + 6% SiC mixture decreased by 8% to 92 HRB, while for the metal alloy it reached 98 HRB. However, the results of the relative elongation showed that value of relative elongation for the composite mixture is 8.5% higher than 17-4 PH.

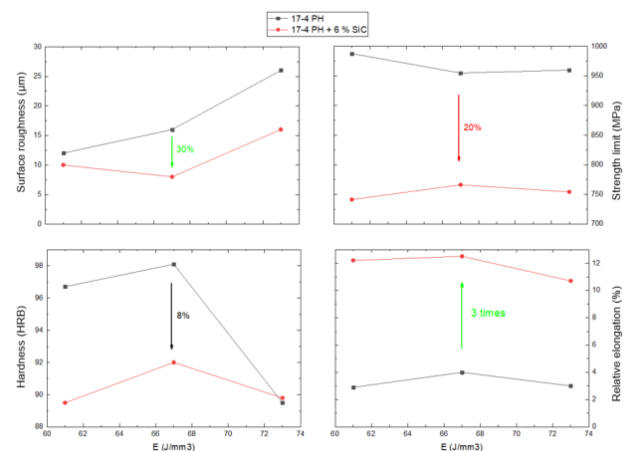


Fig 3. Comparison of properties of SLS printed samples from 17-4 PH and 17-4 PH + 6% SiC mixture.

References

1. C. Reiff, F. Wulle, O. Riedel, V. Onuseit,, On Inline Process Control for Selective Laser Sintering, MCP-CE (2018).

PLASMONIC DIFFRACTION GRATINGS FOR THz EMISSION

Mohammad Esmaeil Daraei and Ignas Nevinskas

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

Terahertz (THz) frequencies refer to the region between the millimeter wave and infrared bands in the electromagnetic (EM) spectrum, typically between 0.1 to 10 THz¹. A lot of research and development work have been conducted in both the microwave and infrared bands over the past 50 years as well as in the THz band, but there were no extraordinary breakthroughs. Many potential applications have been identified which include important areas such as imaging, defence, security, biology and medicine². However, so far very limited applications have been realized – this is largely due to the difficulties to generate THz waves with enough power levels at a reasonable cost although significant progress in the generation of high-power THz signals has been made.

Among various techniques for terahertz generation, photoconductive antennas (PCAs) have been extensively utilized to generate pulsed terahertz radiation³ and are still the most common means of THz generation and detection. A photoconductive terahertz emitter consists of an external optical pump, an antenna located on a photoconductor, and a bias voltage. When a sub-picosecond optical pump is incident on an ultrafast photoconductive material, electron-hole pairs are generated, and these electron-hole pairs move under the applied external bias electric field to generate a photocurrent. The induced photocurrent change in time is directly proportional to the emitter THz radiation pulse.

In recent studies, plasmonic nanostructures have been utilized to increase the THz PCA efficiency. The plasmonic nanostructures interact with the input laser light and enhance optical absorption in the active photoconductive region resulting in higher free carrier concentration and carrier gradients. The wavelengths of the surface plasmons may be much smaller than those of freely propagating electromagnetic waves, making them ideal candidates for high frequency and compact electronic-photonic systems.

The simulation is done based on the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method. Our structure consists of a series of gold diffraction gratings on a Gallium Arsenide (GaAs) layer. The optimized dimensions of gold grating found to be 320 nm width and 120 nm height. The absorption gradient induced by SPPs has been shown in (Fig.1a). Also, the PCA was already

fabricated with FIB milling technique (Fig.1b). The latter device is a semiconductor crystal excited by femtosecond laser pulses. On top of this crystal a fabricated gold nanostructure interacting with a laser pulse would induce the surface plasmons. The plasmons would be absorbed by the semiconductor in a significantly smaller volume than that dictated by the absorption depth. The generated gradient of photoexcited charge carriers would induce ultrafast photocurrents, which in turn would emit a THz pulse.

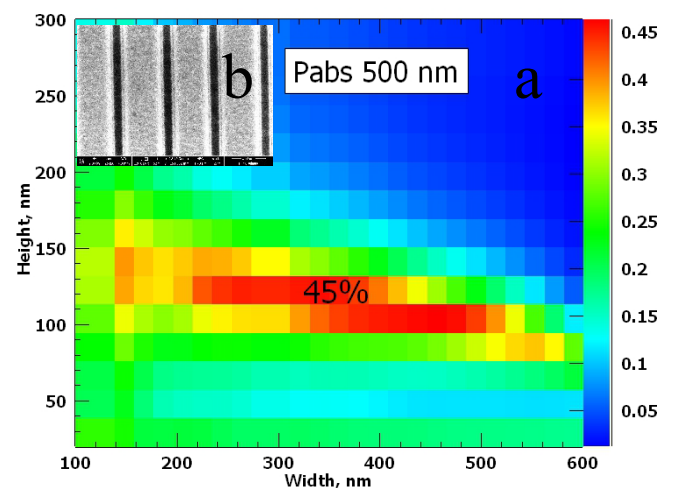


Fig. 1: a) Absorption in 500nm GaAs at wavelength=780 nm, b) SEM image of the fabricated structure with FIB milling technique.

Our simulations show that the absorption rate is about 33 percent without plasmonic grating, while adding a plasmonic grating will result in 45 percent absorption and this enhancement of photo-absorption at the surface of the plasmonic PCA will finally lead to a higher and sharper THz pulse radiation. It is worth to mention that this absorption is achieved in 500 nm GaAs depth.

References

- Huang, Y., Khiabani, N., Shen, Y. & Li, D. Terahertz photoconductive antenna efficiency. in 2011 International Workshop on Antenna Technology (iWAT) 152-156 (IEEE, 2011). doi:10.1109/IWAT.2011.5752384.
- Jooshesh, A. et al. Plasmon-Enhanced below Bandgap Photoconductive Terahertz Generation and Detection. *Nano Lett.* 15, 8306-8310 (2015).
- Zhang, X., Zhan, F., Wei, X., He, W. & Ruan, C. Performance Enhancement of Photoconductive Antenna Using Saw-Toothed Plasmonic Contact Electrodes. *Electronics* 10, 2693 (2021).

FLUORESCENCE CONCENTRATION QUENCHING IN (ZINC)- PHTHALOCYANINE SOLUTIONS

Ivan Halimski¹, Simona Streckaitė¹, Jevgenij Chmeliov^{1,2}, Andrius Gelzinis^{1,2}

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

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

Phthalocyanines (Pc) and metal-containing phthalocyanines (MPc) are molecular complexes of wide interest. Due to spectroscopic properties the complexes may be applied in photodynamic therapy or in organic photovoltaic systems [1,2]. Pc and MPc are also good model systems used in photosynthesis studies [3]. One of the most promising but not fully understood phenomenon observed in Pc and MPc is concentration quenching (CQ) of fluorescence, which is observed as a decrease of fluorescence quantum yield when the material concentration increases.

For photosynthesis applications it is important to study CQ in solutions (CQ in MPc thin films was studied in [1], that is important, e.g., for optoelectronic applications). In this work CQ is studied both in Pc (2,9,16,23-TETRA-TERT-BUTYL-29H,31H-PHTHALOCYANINE, or simply TTB) and MPc (ZINC 2,9,16,23-TETRA-TERT-BUTYL-29 H,31 H-PHTHALOCYANINE, or ZnTTB) solutions. Both complexes were solubilized in CHCl₃ and DCM. The point here is to observe the difference in CQ phenomenon between Pc and MPc. Fluorescence spectra and decay kinetics in combination with single- and multi-exponential fits provide information about CQ phenomenon observed. To avoid reabsorption effects, samples are prepared between two thin glasses. Detailed experimental analysis and discussion will be presented at the conference.

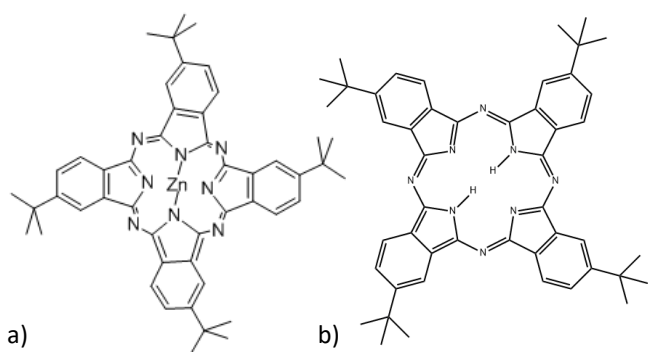


Figure 1. Chemical structure of the studied ZnTTB (a) and TTB (b) molecules

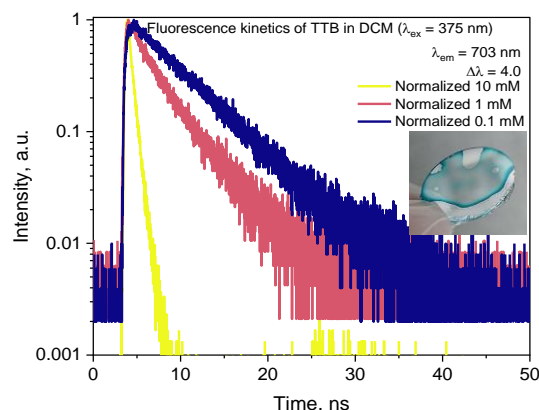


Figure 2. Normalized fluorescence decay kinetics of TTB in DCM at three different molecular concentrations (excitation wavelength $\lambda = 375$ nm, emission wavelength $\lambda = 703$ nm).

Figure 2 shows the CQ phenomenon observed in TTB in DCM. The fastest kinetics here is observed for a sample with a concentration of 10 mM/l, and the slowest for a sample of 0.1 mM/l.

References

1. J. Tamosiunaite, et.al, Chemical Physics 572 (2023) 111949
2. S. Kakade, et.al, J. Phys. Chem. C 116 (2012) 15155
3. M.E. El-Khouly, Spectrochim. Acta A 205 (2018) 508

NON-DESTRUCTIVE INVESTIGATION OF METALLIC WASTE BY USING GAMMA SPECTROMETRIC MEASUREMENTS AND MCNP6 MODELING

Kristina Mikalauskienė, Marina Konstantinova, Darius Germanas, Rita Plukienė,
Elena Lagzdina, Artūras Plukis ir Vidmantas Remeikis

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nuclear Research
Savanoriu ave. 231, LT-02300 Vilnius, email: kristina.mikalauskiene@ftmc.lt

One of the important tasks for a smooth and successful decommissioning process of a nuclear power plant is the optimisation of the management of radioactive waste through its effective characterization, grouping, separation and decontamination [1]. In order to effectively characterize low-activity metal waste, surface contamination should be determined through non-destructive γ -spectrometric measurements or by combining dose rate measurements with γ -spectrometry.

The aim of this study is to investigate the γ -spectra of sources of ^{60}Co (corrosion product, a radionuclide mainly produced by neutron activation) and ^{137}Cs (a fission product characteristic of surface contamination) under different shielding conditions of metallic waste to identify parameters that could be used to distinguish between surface and volume activity using gamma spectra measurements and MCNP6 modelling [2].

The study performed using different detectors: two high-purity germanium (HPGe) and a cerium bromide (CeBr_3) scintillation detector. HPGe detectors are known for their high relative efficiency (over 25%) and excellent energy resolution (2.0 keV at 1.332 MeV). While the energy resolution of CeBr_3 detectors may not match HPGe detectors, but they are lightweight and portable, suitable for identifying ^{60}Co and ^{137}Cs radionuclides and other radiological monitoring tasks.

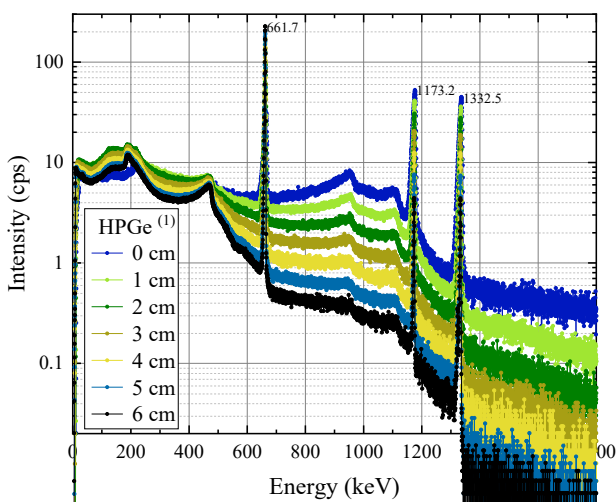


Fig. 1. Comparison of spectra of ^{137}Cs and ^{60}Co sources shielded by the different thickness of metal plates (HPGe detector case)

Experiments using ^{60}Co and ^{137}Cs shielded by metal plates of different thicknesses show the possibility to distinguish between a surface source and an internally activated (volume) source. Compton scattering to the photo-peak ratio changes with increasing metal layer thickness as shown in Figure 1, 1 cm thickness of the shield results increases of the Compton/photo-peak ratio by 5-10 %.

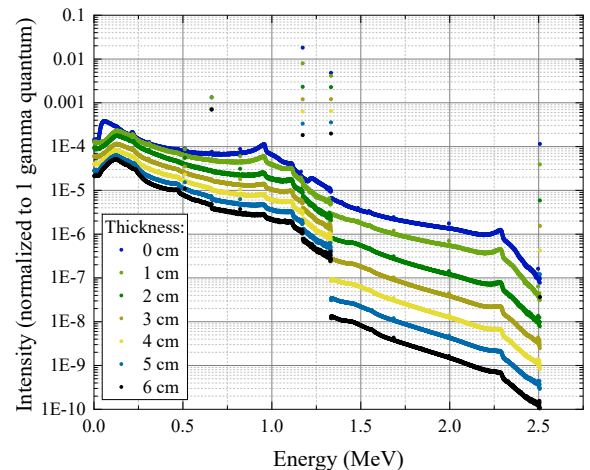


Fig. 2. Modelled gamma spectra of ^{60}Co and ^{137}Cs sources at different conditions of metal shielding between mentioned sources for HPGe detector

Comparison of the measured and simulated data of gamma spectra (see Figure 2) of shielded point sources of ^{60}Co and ^{137}Cs shows that there is a good agreement between the experimental and the simulated results, the same is valid for the ratio of the Compton scattering edges to the photopeak. That means, that analysis of the intensity and Compton /photo-peak ratio along with modeling can help to determine unknown ^{137}Cs and ^{60}Co sources distribution in the metal waste. This technique can be effectively applied for the sorting of radioactive waste and for the assessment of nuclide vectors for final disposal sites.

This research was partly funded by the 2019-2020 Euratom Research and Training Programme under grant agreement No 945098.

References

1. V. Remeikis et al. (2009) Study of the nuclide inventory of operational radioactive waste for the RBMK-1500 reactor, Nuclear engineering and design 239 (4), p. 813-818.
2. D.B. Pelowitz, MCNP6 User's Manual (2013), Version 1.0, Report LA-CP-13-00634, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.

AEROSOL OPTICAL PROPERTIES AND BLACK CARBON SOURCE APPORTIONMENT IN VILNIUS AND WARSAW DURING THE WARM SEASON OF 2022

Agnė Minderytė¹, Emeka A. Ugboma², Fatima F. Mirza Montoro²,
Iwona S. Stachlewska², Steigvilė Byčėnienė¹

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

²Institute of Geophysics, Faculty of Physics, University of Warsaw email: agne.minderyte@ftmc.lt

Our research was motivated by the necessity to investigate aerosol optical characteristics, namely absorption, scattering and single scattering albedo (SSA), and black carbon (BC) source contribution and mass concentration in two neighbouring capitals: Vilnius and Warsaw.

The measurement sites in urban (Warsaw) and urban background (Vilnius) environments were equipped with Aethalometers (AE33) and Nephelometers (TSI model 3563 in Vilnius and Aurora 4000 in Warsaw). The measurements took place simultaneously from May to August 2022. BC source apportionment was performed using the Aethalometer model to assess the contribution of fossil fuel combustion and biomass burning [1].

Using data from measurements of light absorption and scattering, aerosol types were classified via the Absorption Ångström Exponent (AAE) and Scattering Ångström Exponent (SAE) optical division scheme suggested by Cappa et al. (2016). The results revealed that the “BC-dominated” aerosol type was the most prevailing (92% in Vilnius and 88% in Warsaw) throughout the warm season in both sites. Meanwhile, the second most abundant mixing state was “Large particle/BC mix” which comprised 6% in Vilnius and 11% in Warsaw. Mostly during May, both in Vilnius and in Warsaw, 1% of particles were attributed to “Mixed BC, BrC” type which also correlated with the higher contribution of biomass-burning-related BC (up to 30%).

BC source apportionment results showed that fossil fuel combustion contributed the most to BC pollution at both sites (84% in Vilnius and 86% in Warsaw), despite the different proximity to major roads. Observed BC mass concentration patterns were similar at the two sites throughout the campaign. Although, differences were observed in the absolute level of the values: a 40% higher BC mass concentration was observed in Warsaw (1.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) compared to Vilnius (0.7 $\mu\text{g}/\text{m}^3$).

The study provides a better understanding of aerosol optical characteristics, prevailing aerosol types and black carbon source contribution during the warm season in urban environments in the capitals of Poland and Lithuania.

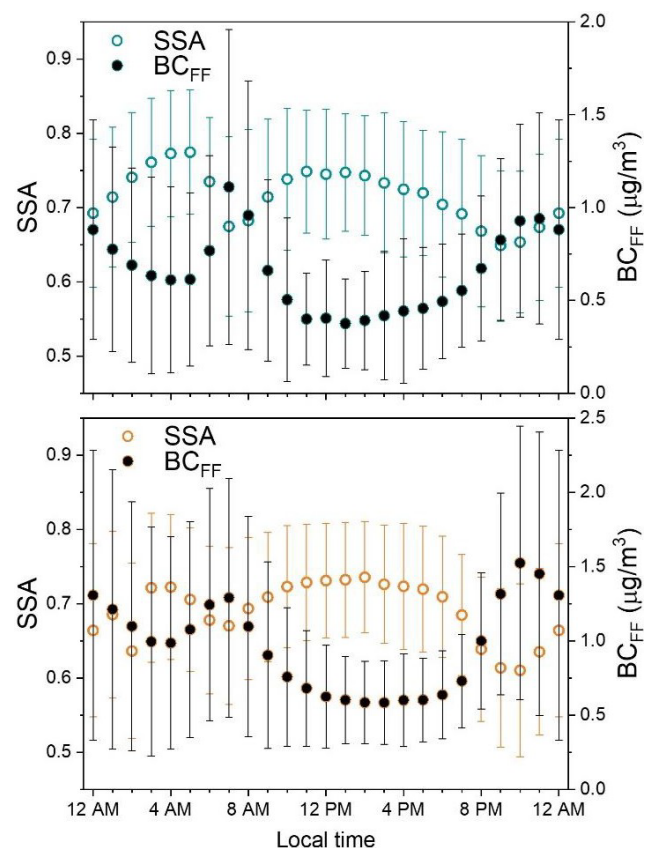


Fig.1. Diurnal cycles of SSA and BC from fossil fuel combustion (BC_{FF}).

References

- [1] J. Sandradewi, A. S. H. Prévôt, E. Weingartner, R. Schmidhauser, M. Gysel, and U. Baltensperger, *Atmos. Environ.* **42**, 101 (2008).
- [2] C. D. Cappa, K. R. Kolesar, X. Zhang, D. B. Atkinson, M. S. Pekour, R. A. Zaveri, A. Zelenyuk, Q. Zhang, *Atmos. Chem. Phys.* **16**, 6511 (2016).

COBALT-PHOSPHORUS CATALYSTS FOR HYDROGEN GENERATION REACTION

Huma Amber, Karina Vjunova, Zita Sukackiene, Irena Stalnioniene,
Loreta Tamasauskaite-Tamasiunaite, Eugenijus Norkus

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

Hydrogen (H₂) is regarded as one of the most promising and cleanest renewable energy resources due to its high efficiency, nontoxicity, pollution-free nature, sustainability, and value as a long-term replacement to fossil fuels [1]. Nowadays, hydrogen storage is a major issue. Among chemical hydrides, sodium borohydride (NaBH₄) provides safe and practical means of hydrogen storage and production at an economical cost. NaBH₄ has a high hydrogen storage density of up to 10.8 wt.%, and can produce hydrogen by a hydrolysis reaction [2]. In this work, cobalt-phosphorus (Co-P) catalysts with different compositions have been deposited on the copper sheet substrate using the electroless metal deposition method. The reducing agent was sodium hypophosphite (NaH₂PO₂). The microstructures of the as-prepared Co-P catalysts and their catalytic activities for hydrolysis of NaBH₄ are analyzed in relation to pH value and NaH₂PO₂ concentration. Scanning electron microscopy (SEM) and Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX) were used for the characterization of the surface

morphology, structure and composition of prepared catalysts. The catalytic activity of the Co-P coatings for hydrogen generation from an alkaline NaBH₄ solution was examined. In particular, the Co-P (5%P) catalyst formed using the plating bath operated at pH 10 at a temperature of 80°C exhibits the highest hydrogen generation rate of 5.75 ml min⁻¹ in 5 wt% NaBH₄ + 0.4 wt% NaOH solution at 343 K. Meanwhile, the lowest activation energy was determined to be 78.04 kJ mol⁻¹.

References

1. Zhai, W., Ma, Y., Chen, D., Ho, J. C., Dai, Z., & Qu, Y. (2022). Recent progress on the long-term stability of hydrogen evolution reaction electrocatalysts. *InfoMat*, 4(9), e12357.
2. Eom, K., Cho, K., & Kwon, H. (2008). Effects of electroless deposition conditions on microstructures of cobalt-phosphorous catalysts and their hydrogen generation properties in alkaline sodium borohydride solution. *Journal of power sources*, 180(1), 484-490.

APPLICATION OF COMPUTATIONAL METHODS IN THE DESIGN OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMERS

Enayat Mohsenzadeh, Vilma Ratautaite, Arunas Ramanavicius

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

Molecularly imprinted polymers (MIPs) are synthetic receptors fabricated by polymerizing functional monomers in the presence of an analyte to form tailor-made cavities for the target molecules [1,2]. Thus, MIP synthesis includes a) Selection of reagents e.g. monomer, crosslinker, solvent b) Polymerization c) Template removal d) Selective recognition through rebinding steps [3]. The rapid development of computational methods such as molecular mechanics, molecular dynamics, Monte Carlo, quantum mechanics, and statistical simulations finds extensive applications in the design of molecularly imprinted polymers (MIPs). These computational methods have been applied to help researchers in the stepwise process of MIP preparation. Calculations are applied for the selection of reagents e.g., monomer, crosslinker, and solvent for the MIP formation and finding the optimal ratios. It is also represented that the polymerization step has been successfully

modelled, and as a result, promising MIPs fabricated. This made the analysis of polymer and binding mechanism plausible. Then, simulated MIP-template complex for evaluating recognition of specific targets and binding affinities is itemized. The reviewed papers confirmed the significance of computations in the MIP design.

References

1. Ramanavičius, S. et al. Electrochemically Deposited Molecularly Imprinted Polymer-Based Sensors. *Sensors* 22, 1282 (2022).
2. Pilvenyte, G. et al. Molecularly Imprinted Polymers for the Determination of Cancer Biomarkers. *International Journal of Molecular Sciences* 24, 4105 (2023).
3. Ratautaite, V. et al. Molecular Imprinting Technology for Determination of Uric Acid. *International Journal of Molecular Sciences* 22, 5032 (2021).

STUDY OF POLYURETHANE COMPOSITION WITH BETAINE-BASED DEEP EUTECTIC SOLVENTS

Paulina Nemaniūtė, Dalia Bražinskienė, Asta Grigucevičienė, Svajus Asadauskas

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

Deep eutectic solvents (DES) were described by Abbott and co-workers in 2003 [1] which are an example of such solvents. DES can be formed from two or more compounds without the need for chemical reaction or ionic exchange and that upon mixing at a certain ratio undergo a high melting point reduction, when compared to their individual component [2]. Frequently, one solid compound acts as a hydrogen bond donor, while another solid behaves as a H-bond acceptor. At least one must be a solid, otherwise there would be no eutectic effect. After mixing, they can eventually liquefy due to H-bond transformations and decrystallization.

This green and sustainable solvents is promising in their applications in polyurethane (PU) formulations. The addition of DES can improve additional properties of the polyurethanes, such as thinning the production blend, improving curing rates and liquefying solid components.

In this work polyurethanes containing betaine/glycerol and betaine/xylitol DES were characterized in terms of viscosity change during polyaddition reaction, hydrolysis, swelling tests and 3D optical profilometer morphology study. Formulations of betaine with xylitol and glycerol as H-bond donors were prepared, in which ratio of betaine and glycerol/xylitol was at 1:2 wt. The component's heating duration was set at 3 hrs., at 130°C, periodically shaken to ensure the dissolution of all components. Viscosity was measured by Lamy CP-2000 Plus rheometer at 50°C with cone spindle RM100 system. The procedures were described previously in detail [3]. Four different PU adhesive formulations were synthesized with betaine-based DES: DES43, DES44, DES47 and DES66.

Swelling tests were used to measure the crosslink density of elastomers. The amount of solvent imbibed and the degree of swelling is dependent upon the crosslink density of polymer networks; the greater the crosslink density, the less swelling. Adhesive film specimens were placed in toluene for 48 h. The swollen specimens were then removed from the solvent. Calculations have been carried out according to the article [4].

Hydrolysis tests were carried out, in order to evaluate the stability and resistance of the PU adhesives to hydrolytic attack. Resistance to hydrolysis was estimated by water absorption test according to ASTM570-98. PU samples were

weighed before and some samples were placed in 25°C and some in 70°C deionized water for 7 days. The percentage of water absorbed by the PU samples was calculated using the following equation:

$$W_{\%} = \left[\frac{W_w - W_d}{W_d} \right] \cdot 100 \quad (1)$$

The results in Table 1 support basic theoretical principle that an elastomer's crosslink density affects how well it can absorb solvent: the higher the crosslink density, the less solvent the polymer network can absorb. Water absorption tests showed different values for different PU adhesive formulations. These results might be explained by the fact that during curing process, microvoids formed in the polymer matrix that improved water penetration. The higher value of W% may indicate that the polymer has more voids. 3D optical profilometer morphology study confirmed these findings. DES44 and DES66 PU adhesives had more microvoids and crosslink density were smaller compared to DES43 and DES47 PU adhesive formulations.

Table 1 Water absorption and crosslink density of different PU adhesives.

PUR formulation	Percentage of water absorption, W%	Crosslink density, mol/m ³
DES43	5.72	6.43·10 ⁻³
DES44	23.03	4.69·10 ⁻³
DES47	3.65	10.4·10 ⁻³
DES66	31.37	2.87·10 ⁻³

Keywords: PUR, DES, viscosity, swelling tests, crosslink density

Acknowledgment: This study was carried out under project TERMINUS, funded by the European Union under Horizon 2020. Call: H2020-MBP-ST-IND-2018. Grant Agreement: 814400.



References

1. A.P. Abbott, G. Capper, D.L. Davies, R.K. Rasheed, V. Tambyrajah, Chem. Commun., 1, pg. 70-71 (2003).
2. C.J. Clarke, W.-C. Tu, O. Levers, A. Bröhl, J.P. Hallett, Chem. Rev. 118 (2), pg. 747-800 (2018).
3. P. Nemaniūtė, S. J. Asadauskas, D. Bražinskienė, Proc. 25th Int. Conf "Advanced Materials and Technologies", pg. 116 (2023).
4. N.M. Zain, S.H. Ahmad, E. S. Ali, J. Appl. Polym. Sci., 131, pg. 41151 (2014).

DEVELOPMENT OF ELECTROCHEMICAL SENSOR ARRAYS FOR AGRICULTURE 4.0 APPLICATIONS

Pamela Rivera

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanoengineering
Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania, email: pamela.rivera@ftmc.lt

Agriculture 4.0, often referred to as "AgroTech" or "Smart Agriculture," is a term that represents the application of modern information and communication technologies to agriculture and farming practices. It leverages advanced technologies, data analytics, and automation to improve various aspects of the agricultural sector [1].

Agriculture 4.0 relies on the collection of extensive data from various sources, such as sensors, satellites, and drones. This data is then analyzed to make informed decisions about crop management, resource allocation, and more.

The primary goal of Agriculture 4.0 is to increase farm efficiency, productivity, and sustainability while minimizing input costs.

Role of sensors in Agriculture 4.0

Sensors provide real-time data on soil and crop conditions, allowing farmers to adjust the application of inputs like water, fertilizers, and pesticides on a per-acre or even per-plant basis. This ensures that resources are used efficiently and reduces waste. Additionally, sensors can be deployed in fields to detect early signs of disease or pest infestations. These sensors can identify changes in plant physiology or the presence of specific pests, enabling farmers to take timely action to mitigate the damage.

Finally, sensors can help monitor and manage water quality, carbon emissions, and soil erosion, aiding in sustainable agricultural practices.

Electrochemical sensors in Agriculture 4.0

Electrochemical sensors exhibit a number of adventitious properties that make them particularly suitable for in situ applications, such as:

- High measurement accuracy
- High sensitivity
- Low power consumption
- Rapid detection
- Small sample size required [2][3].

A case study: Sensor-based assessment of the effects of different types of zinc nanoparticles on beetroot.

Our aim is to develop an electrochemical sensor that can detect changes in Zn(II) in beetroot leaves, fabricated by laser processing of polymers to produce carbon nanomaterials and a Bi-film that is sensitive to Zn(II) concentrations at trace levels.

During the sensor development stage, the electrode fabrication conditions and their effects on the morphology and analytical performance will be studied.

Cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy would be applied for the characterization of the synthesized electrodes. The effect of the electrolyte solution, pH, and a presence of interferences on analytical performance will be investigated.

Finally, the developed sensor would be applied to real systems to perform Zn(II) uptake studies. The measurement results obtained with the developed sensor will be used to:

- Monitor the nutritional environment and plant changes.
- Study the effect of different concentrations and nature of nanoparticles on beetroot leaf grown in hydroponics.
- Correlate changes on leaf surfaces of beetroot leaves with the changes in the mineral elemental composition of these plants.
- Monitor changes in the hydroponic media as a consequence of the addition of Zn nanoparticles.

References

1. S. O. Araújo, R. S. Peres, J. Barata, F. Lidon, and J. C. Ramalho, "Characterising the Agriculture 4.0 Landscape—Emerging Trends, Challenges and Opportunities," *Agronomy*, vol. 11, no. 4, p. 667, Apr. 2021, doi: 10.3390/agronomy11040667.
2. M. Y. Kim and K. H. Lee, "Electrochemical Sensors for Sustainable Precision Agriculture—A Review," *Frontiers in Chemistry*, vol. 10. 2022. doi: 10.3389/fchem.2022.848320.
3. Seymour et al., "Advanced solid state nano-electrochemical sensors and system for agri 4.0 applications," *Sensors*, vol. 21, no. 9, 2021, doi: 10.3390/s21093149.

SYNTHESIS AND CHARACTERISATION OF NICKEL AND ITS ALLOYS

Gitana Valeckytė, Z. Sukackienė, V. Kepenienė, G. Stalnionis, J. Vaičiūnienė,
L. Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, E. Norkus

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

Electroless metals plating systems are based on autocatalytic reduction of metals by using reducing agent. The most important research was carried out in 1946, when scientists A. Brenner and G. E. Riddell managed to obtain a NiP coating by electroless nickel plating using sodium hypophosphite as a reducing agent [1]. Typically, the nickel plating solution consists of nickel ions, a reducing agent, appropriate complexing agents and stabilizers. Sodium hypophosphite and morpholine borane are the most reducing agents used in electroless nickel plating baths. This electroless deposition method has proven successful due to its low initial investment, simple coating conditions and good results. This method made it possible to obtain a uniform metallic coating with excellent properties on various shape and size substrates such as Ni foam, stainless steel mesh, aluminum oxide membranes, carbon materials, Cu sheet or foam [2, 3].

The aim of this work was to use a simple method for preparation of an effective catalyst for hydrogen generation from an alkaline sodium borohydride solution. For this purpose Ni, NiMn, NiMo, NiCo, NiCoMn, NiCoMo, NiCoMoMn were deposited on the Cu sheets by a simple electroless deposition method using morpholine borane as a reducing agent obtaining catalysts with a ~ 1 μm thickness coating. The morphology and particle size of the prepared catalysts were estimated by FESEM. Fig. 1 represents FESEM images of catalysts of different composition.

It is clearly seen that all formed coatings are compact and crack-free with characteristic multilayer cauliflower-like structure (Figure 1a-g). As well as the FESEM images reveal that all prepared coatings Ni/Cu, NiMn/Cu, NiMo/Cu, NiCo/Cu, NiCoMn/Cu, NiCoMo/Cu, and NiCoMoMn/Cu (Fig. 1 a-g) consist of different sizes particles, which coalesce into oval-shaped agglomerates. It can be seen, that the Ni/Cu surface is the most smooth (Fig. 1a). Adding additional metal causes the growth of agglomerates on the surface in an average size from 40 nm to 1.6 μm.

The amounts of metals in prepared catalysts calculated from ICP-OES data are presented in Table 2. As can be seen from the presented data, when Ni and Co are co-precipitated the cobalt deposition rate is much faster. There remain about 10-20 % of Ni amount in the coatings if compare with pure Ni/Cu. The quantity of Co in the prepared catalyst varies in the range 77.39 - 90.18 wt.%. The amount of Mo of ca. 14.54, 10.1 and 7.33 wt.% were incorporated in the NiMo, NiCoMo, and NiCoMoMn coatings, respectively. In the case of NiMn/Cu, NiCoMn/Cu, and NiCoMoMn/Cu catalysts, the quantity of Mn is significantly small and equal to ca. 0.16, 0.01 and 0.01 wt.%, respectively. It should be mention, that it is difficult to deposit bigger quantity of manganese because the redox potential for Mn²⁺ to

become Mn⁰ (Mn²⁺ + 2e⁻ → Mn⁰) is very negative (-1.185 V) therefore it is delicate to reduce Mn²⁺ into Mn⁰ through a redox reaction.

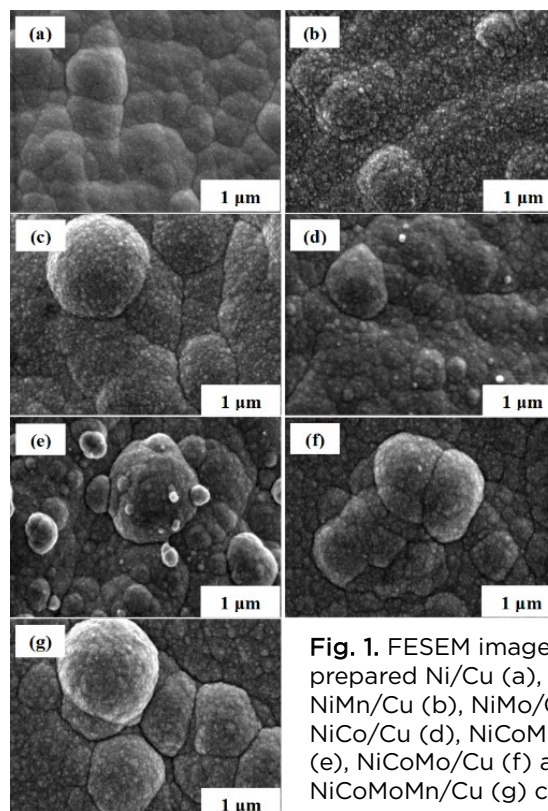


Fig. 1. FESEM images of prepared Ni/Cu (a), NiMn/Cu (b), NiMo/Cu (c), NiCo/Cu (d), NiCoMn/Cu (e), NiCoMo/Cu (f) and NiCoMoMn/Cu (g) catalysts.

Table 2. Element composition of the prepared coatings deposited on Cu surface analyzed by ICP-OES.

Catalysts	Element, wt %			
	Ni	Mn	Mo	Co
Ni/Cu	100	-	-	-
NiCo/Cu	22.61	-	-	77.39
NiMn/Cu	99.84	0.16	-	-
NiMo/Cu	85.46	-	14.54	-
NiCoMn/Cu	9.81	0.01	-	90.18
NiCoMo/Cu	8.01	-	10.1	81.89
NiCoMoMn/Cu	7.95	0.01	7.33	84.71

References

1. M. Baboria, A. S. Pathania. World Journal of Advanced Research and Reviews **17**, 291-301 (2023).
2. L. Wang, D. Liu, Z. Zhang, Y. Li, J. Liu, Y. Yang, B. Xue, F. Li. Journal of Alloys and Compounds **934**, 1-10 (2023).
3. A. Kytysya, V. Berezovets, Y. Verbovytsky, L. Bazilyak, V. Kordan, I. Zavaliy, V. A. Yartys. Journal of Alloys and Compounds **908**, 1-9 (2022).

LAZERIU GENERUOJAMŲ AUKSO, SIDABRO IR HIBRIDINIŲ KOLOIDINIŲ NANODALELIŲ STABILUMO IR SERS SUSTIPRINIMO KONTROLIAVIMAS NAUDOJANT KCl VANDENINIUS TIRPALUS

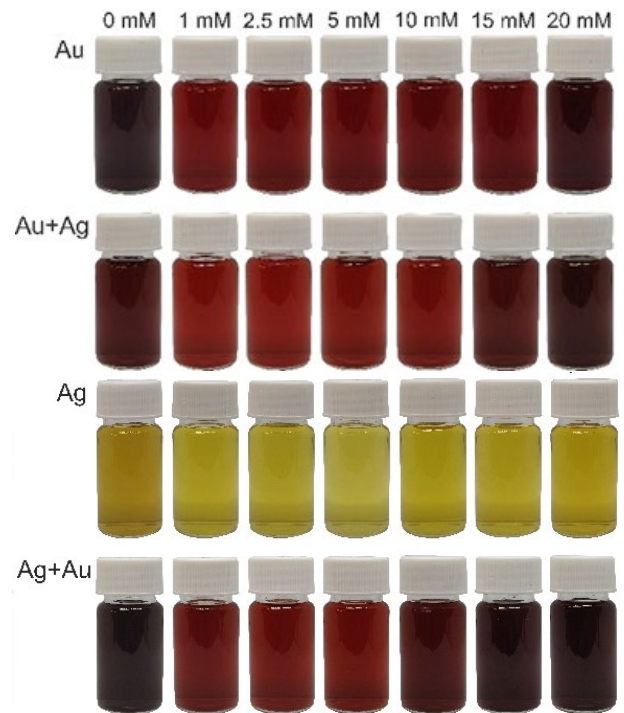
Vita Petrikaitė, Evaldas Stankevičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių per. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: vita.petrikaite@ftmc.lt

Aukso ir sidabro metalų nanodalelės dėl savo unikalių lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso (LPPR) savybių plačiai naudojamos jutikliuose, katalizatoriuose, paviršiaus sustiprintoje Ramano sklaidoje (SERS), ženklinime ir optiniuose-elektroniniuose komponentuose [1, 2]. Nanodalelės turi įvairių sintezės metodų, tokių kaip cheminė redukcija, sol-gelio procesai, elektrocheminis nusodinimas ir lazerinė abliacija [2, 3]. Bet iš ekologiškų metodų išsiskiria lazerinė abliacija dėl greito, švaraus ir stabilaus proceso, kuris nereikalauja papildomo valymo nuo toksiškų medžiagų. Tačiau naudojant lazerinės abliacijos metodą, išlieka nanodalelių agregavimo problema, kuri riboja tolimesnį ilgalaikį panaudojimą. Ši problema sprendžiama papildomomis medžiagomis, kurios užteršia švarų metodą. Todėl tyrimo metu išbandyta biologiškai suderinama medžiaga – kalio chloridas (KCl). Nors yra žinoma, kad druska greitina agregaciją [4], tyrimais pastebėta, kad tam tikros KCl koncentracijos gali sulėtinti šį procesą [5]. Ribinės KCl koncentracijos buvo analizuojamos darbe.

Tyrimo metu buvo stebimi skirtingose KCl koncentracijose (0 mM–20 mM) lazeriu generuotų aukso, sidabro ir jų mišinių nanodalelių agregacijos greitis ir ekstinkcija per 8 savaites. Analizuoti ekstinkcijos spektrai, TEM vaizdai, SERS signalo stiprumas ir zeta potencialas. Nanodalelių generacijai buvo naudoti tūriniai taikiniai, kurie apdorojami fokusuotu Nd:YAG lazeriu ("Ekspla Baltic1064 HP", 1064 nm, 10 ns impulso trukmė). Hibridiniai tirpalai buvo generuojami iš skirtingų tūrinių taikinių, iš pradžių abliuojant vieną metalinį taikinį, o paskui kitą. Buvo keičiama metalinių taikinių seka ir stebima jos įtaka. Bendras generavimo laikas ir plotas buvo toks pat kaip ir monokoloidų atveju. Kiekvieną savaitę registruojami gautų koloidinių tirpalų ekstinkcijos spektrai ir nuotraukos. Tirti bandiniai pateikti 1 pav., druskos koncentracija nurodyta virš buteliukų.

Rezultatai parodė, kad lazerinės abliacijos metu vandenyje ir druskų tirpaluose iš lazeriu abliuojamo taikinio susidaro sferinės formos nanodalelės su neigiamu zeta potencialu (nuo -16 mV iki -58,8 mV). Taip pat, nustatyta optimali kalio chlorido druskos koncentracija kiekvienam taikiniui, kuri išlaiko tirpalo stabilumą ir sumažina ekstinkcijos smailės nuokrypius.



1 pav. Au, Au+Ag, Ag, ir Ag+Au koloidinių tirpalų nuotraukos pirmąją dieną. Virš buteliukų nurodyta KCl molinė koncentracija vandeniniame tirpale (0–20 mM).

Padėka:

Šį projektą finansavo Europos regioninės plėtros fondas (projekto Nr. 01.2.2-LMT-K-718-03-0078) pagal sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Literatūra

1. N. Li, P. Zhao, D. Astruc, Anisotropic gold nanoparticles: synthesis, properties, applications, and toxicity, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 53, 1756–1789 (2014).
2. E. Stankevičius, I. Ignatjev, V. Petrikaitė, A. Selskis, G. Niaura, Gold Nanoparticles Generated Using the Nanosecond Laser Treatment of Multilayer Films and Their Use for SERS Applications, *ACS Omega*, 6, 33889–33898 (2021).
3. V. Petrikaitė, M. Skapas, E. Stankevičius, Generation of gold and silver nanoparticles using laser ablation of thin bimetallic films and bulk targets in water, *Opt. Mater.*, 137, 113535 (2023).
4. G. Wang, W. Sun, Optical limiting of gold nanoparticle aggregates induced by electrolytes, *J. Phys. Chem. B*, 110, 20901–20905 (2006).
5. H. Kang, J.T. Buchman, R.S. Rodriguez, H.L. Ring, J. He, K.C. Bantz, C.L. Haynes, Stabilization of silver and gold nanoparticles: preservation and improvement of plasmonic functionalities, *Chem. Rev.*, 119, 664–699 (2018).

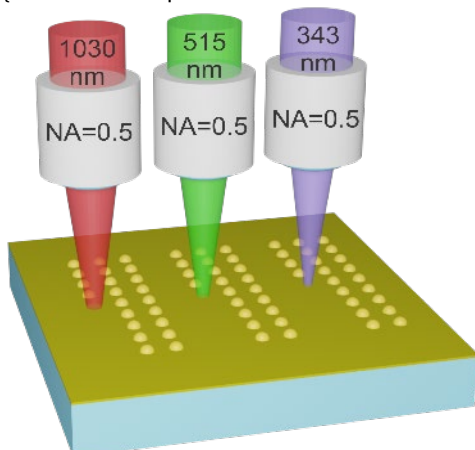
AUKSO NANODARINIŲ GAMYBA, NAUDOJANT SKIRTINGAS FEMTOSEKUNDINIO LAZERIO HARMONIKAS

Kernius Vilkevičius, Evaldas Stankevičius

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

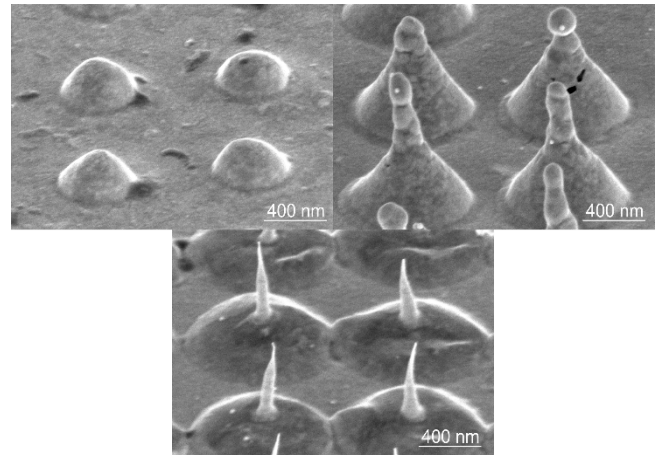
Tauriųjų metalų nanodariniai plačiai tyrinėjami dėl jų sąveikos su šviesa ir plazmoninių savybių atsiradimo. Paveikus pavienes nanodaleles elektromagnetine spinduliuote, sužadinami laisvųjų elektronų svyravimai – lokalizuoti paviršiniai plazmonai (LPP). Suformavus tokių nanodarinių periodinę gardelę, nuo jos difragavusi spinduliuotė sąveikauja su atskiruose dariniuose pasireiškiančiais LPP ir sužadina hibridinius plazmonus, pasižyminčius paviršiniu gardelės rezonansu (PGR) [1]. Šis hibridinis rezonansas yra itin siauras, didelio kokybės faktoriaus bei pasižymi dispersinėmis savybėmis. Dažnai periodinės nanodarinių 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 gardelėms suformuoti yra tiesioginis lazerinis rašymas (TLR), kai metalo paviršius tiesiogiai paveikiamas sufokusuotu lazerio pluoštu [2]. Naudojant vieną lazerio impulsą, suformuojami auksiniai nanodariniai (gumbeliai, kūgiai, antenos), kurių morfologija stipriai priklauso nuo impulso energijos [3].

Tyrimo metu buvo tiriama aukso nanodarinių formavimosi, jų morfologijos bei plazmoninių savybių priklausomybė nuo formavimo spinduliuotės bangos ilgio [4]. Dariniai buvo gaminami TLR metodu, naudojant aštriai sufokusuotą 1030 nm, 515 nm bei 343 nm bangos ilgio lazerinę spinduliuotę (1 pav.), keičiant impulso energiją ir gardelės periodą. Masyvai buvo ištirti naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą ir buvo nustatytos suformuotų darinių formos bei pastebėtos kelios tendencijos.



1 pav. Aukso nanodarinių formavimas TLR metodu skirtingomis harmonikomis.

Nustatyta, jog nuo skirtingai sugeriamo bangos ilgio priklauso susiformavusių nanodarinių diametras bei suformuojamas minimalus periodas tarp struktūrų. Taip pat keičiantis harmonikai ir mažėjant bangos ilgiui, mažėja aukso sluoksnio modifikacijos ribinis energijos tankis bei didėja tokių darinių formavimosi energijos tankio diapazonas. Didėjant impulso energijai keičiasi struktūros morfologija (2 pav.), kuri taip pat priklauso ir nuo naudojamo bangos ilgio. Tuo tarpu ištyrus gumbelių matricų plazmonines savybes (plazmonų rezonansą), stipri harmonikos įtaka nebuvo pastebėta. Tad formavimo spinduliuotės bangos ilgio parinkimas leidžia tiksliau kontroliuoti nanodarinių gamybą.



2 pav. Skirtingos morfologijos aukso nanodariniai, suformuoti naudojant 343 nm bangos ilgį.

Nanodarinių masyvai, žadinantys hibridines plazmonines modas, gali būti naudojami bežymeniuose biologiniuose jutikliuose, pritaikomi netiesinėje optikoje bei lazeriavimui [5].

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. K. Vilkevičius, A. Selskis, E. Stankevičius, Appl. Surf. Sci. **617**, 156629 (2023).
5. A. D. Utyushev, V. I. Zakomirnyi, I. L. Rasskazov, Rev. Phys. **6**, 100051 (2021).

TITANO PASLUOKSNIO ĮTAKA PLAZMONINIAM SUŽADINIMUI PLONOJE AUKSO DANGOJE NAUDOJANT TIESIOGINĮ LAZERINĮ RAŠYMĄ MIKROGUMBELIŲ FORMAVIMUI

Rodrigas Liudvinavičius, Evaldas Stankevičius

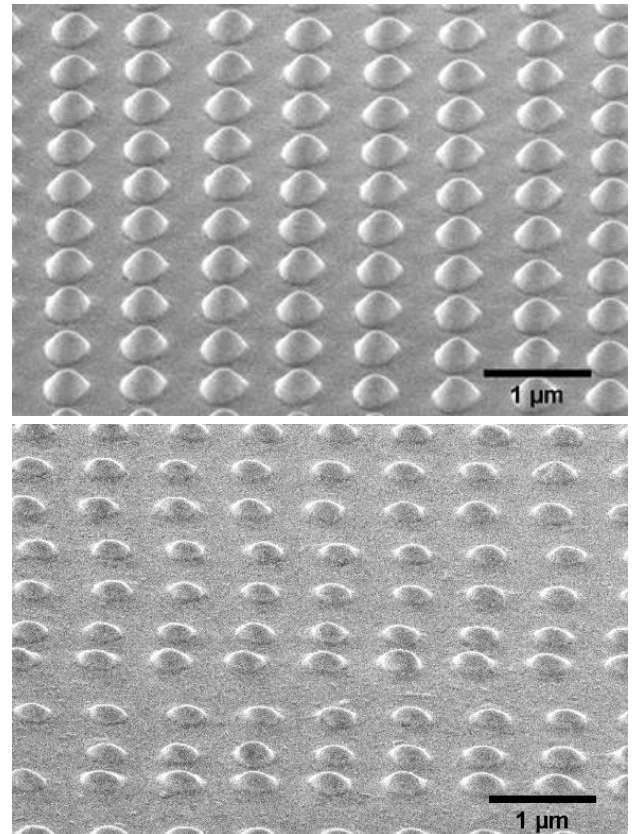
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių per. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: rodrigas.liudvinavicius@ftmc.lt

Dažną periodinių mikrodalelių ar jų struktūrų pritaikymą daugelyje sričių lemia šviesos ir metalo mikro-struktūrų sąveika, plazmoninis efektas. Visa plazmonikos sritis vis daugiau sulaukia dėmesio, dėl perspektyvių panaudojimų kuriant naujus optinius prietaisus, grindžiamus plazmonų sužadinių ir hibridinės gardelės plazmonų rezonansu (HLPR). HLPR yra kolektyviniai elektronų svyravimai, susieti su išoriniu elektromagnetiniu lauku, sklindančiu metalo ir dielektriko sąsaja. Tačiau, yra reikalingi nauji tyrimai, norint pagerinti rezonanso kokybę ir išplėsti sąveikos pritaikymų sritis.

Šiame darbe, HLPR efektas yra pasiekiamas remiantis difrakciniu reiškiniu [1], kur periodiškai išdėstytos aukso mikro-struktūros veikia kaip difrakcinė gardelė, generuojanti plazmoninį signalą, kaip atsaką į krentančią šviesą. Kuomet mikro-struktūros yra išdėstytos taisyklingai, plazmonas yra sėkmingai sužadinti krentančiu fotonu, kuris yra sugeriamas. Toks plazmonų sužadimas ir fotonų sugertis lemia sugerties smailės atsiradimą atspindžio spektre.

Atliktame tyrime, periodinės mikrogumbelių struktūros buvo suformuotos plonoje 50 nm aukso dangoje su skirtingo storio (nuo 0 iki 10 nm) titano pasluoksniais naudojant tiesioginį lazerinio rašymo būdą. Titano tarp sluoksnis buvo naudojamas adhezijos gerinimui tarp aukso dangos ir stiklo pagrindo ir lokaliai šilumos mažinimui lazerinio rašymo metu [2]. Mikro-struktūrų formavimas buvo atliktas pasitelkiant pavienius 0,4 nJ ir 0,45 nJ energijos femto-sekundinius impulsus. Gautų struktūrų masyvai buvo analizuojami pasitelkiant spektrofotometrą ir skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM).

Eksperimentiniai darbo rezultatai parodė, kad HLPR (hibridinės gardelės plazmonų rezonansas) nėra vien priklausomas nuo pagrindinių parametrų: gardelės periodas, šviesos poliarizacija, šviesos kritimo kampas, bandinio pasukimo kampas, bet taip pat priklauso ir nuo adhezinio titano tarp sluoksnio. Atlikus lipnios juostos adhezijos vertinimo testą, gauti rezultatai parodė sukibimo tarp paviršių, kas ir lemia HLPR rezultatą.



1 pav. Aukso mikrogumbelių gardelės SEM mikrografija, be papildomo adhezinio sluoksnio. Gumbeliai suformuoti naudojant 0,5 nJ ir 0,45 nJ impulso energiją. Nuotraukos atliktos esant 52° bandinio pasukimo kampui.

Adhezinio pasluoksnio poveikis buvo įvertintas analizuojant bandinio atspindžių grafikus ir vertinant rezonanso smailių parametrus, įskaitant gylį, pilną plotį pusės maksimumo lygyje (FWHM), Q faktorių ir MQ faktorių.

Literatūra

1. 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.
2. Q.Jiang et al., Nanoscale 12(4) p. 2524-2531 (2020).

CP29 FOTOSINTETINIS KOMPLEKSAS: CHLOROFILŲ GEOMETRIJA IR ELEKTRONINĖS BŪSENOS

Sandra Barysaitė^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Jevgenij Chmeliov^{1,2}, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekuliųjų darinių fizikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

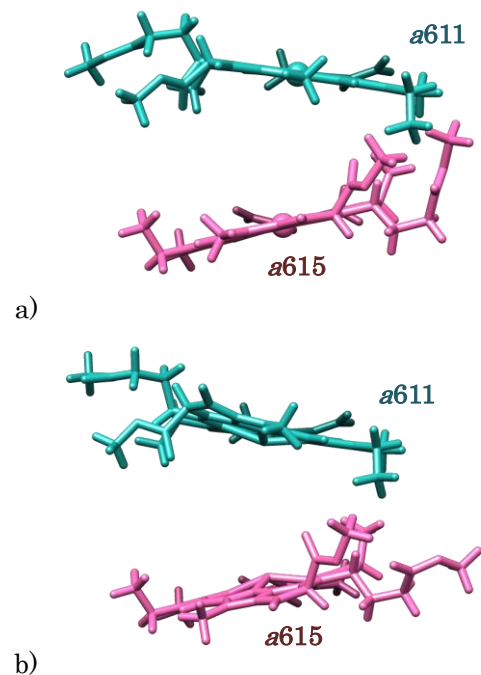
el. p.: sandra.barysaite@ftmc.lt

Antroji fotosistema (PSII, angl. *photosystem II*), esanti chloroplastų tilakoidų membranose, vykdo šviesos surinkimą bei vandens oksidaciją, dėl kurios gali susidaryti fotosistemai itin žalingas singuletinis deguonis [1]. Dėl šios priežasties augalai yra išvystę savisaugos mechanizmus, tokius kaip nefotocheminis gesinimas (NPQ, angl. *non-photochemical quenching*), kurio metu yra gesinami pertekliniai chlorofilų sužadainimai [2]. Nors ir tikslus NPQ veikimo mechanizmas iki šiol nėra aiškus, yra manoma, kad LHClI komplekse NPQ gali būti susijęs su krūvio pernašos (CT, angl. *charge-transfer*) būsenomis tarp chlorofilų [3]. Tokį reiškinį yra verta tyrinėti ir CP29 komplekso atveju, kadangi jis yra išsidėstęs tarp išorinių PSII anteninių kompleksų ir reakcijų centro.

Šiame darbe buvo optimizuojamos CP29 komplekso chlorofilų geometrijos ir skaičiuojamos jų sužadintų būsenų savybės keletu kvantinės mechanikos metodų įskaitant ir neįskaitant aplinkos įtaką, siekiant suprasti CT būsenų vaidmenį CP29 komplekse vykstančiuose procesuose. Skaičiavimams naudota CP29 komplekso PDB struktūra buvo gauta Rentgeno kristalografijos metodu [4].

Visų pirma buvo optimizuotos chlorofilų monomerų geometrijos bei suskaičiuotos sužadintų būsenų savybės monomerams ir dimerams tankio funkcionalo teorijos (DFT, angl. *density functional theory*) metodu vakuume fitilo uodegą pakeitus metilo grupe, o pagal sužadintų būsenų skaičiavimų rezultatus dimerams buvo identifikuotos CT būsenos. Skaičiavimai vakuume buvo pakartoti naudojant tankio funkcionalu paremtą stipriojo ryšio artinį (DFTB, angl. *density functional based tight binding*). Analogiški skaičiavimai DFTB metodu atlikti chlorofilams įskaitant aplinkines molekules bei nepašalinant fitilo uodegos. Lygintos abiem metodais gautos optimalios chlorofilų geometrijos ir jų sužadintų bei CT būsenų energijos. Rezultatai parodė, kad vakuume optimizuotos geometrijos chlorofilams abiem metodais gaunamos sužadintų būsenų energijų vertės yra artimos ir dažniausiai galima identifikuoti analogiškas CT būsenas, tačiau DFTB metodu atlikti skaičiavimai užtruko trumpiau negu DFT metodo atveju. Ir monomerų, ir dimerų atveju, įskaitant aplinkos įtaką geometrijai, sužadainimo energijų vertės gaunamos mažesnės arba lygios vakuume

optimizuotos geometrijos atveju. Be to, įskaitant aplinkos įtaką optimizuojant chlorofilų dimero a611–a615 geometriją, išvengiama per didelio chlorofilų molekulių dalių suartėjimo, kuris įvyksta vakuume atliekant monomerų geometrijos optimizaciją ir lemia netiksliai sužadainimo energijų vertes (1 pav.). Konferencijos metu taip pat bus pristatomi kombinuotais kvantinės mechanikos/molekulių mechanikos (QM/MM) metodais atliktų skaičiavimų rezultatai.



1 pav. Dimero a611–a615 struktūra dviem atvejais: a) abu chlorofilai optimizuoti DFTB metodu vakuume; b) dimeras optimizuotas DFTB metodu įskaitant aplinkinių molekulių įtaką geometrijai.

Literatūra

1. A. Krieger-Liszka, C. Fufezan, A. Trebst, *Photosynthesis Research* **98**, 551–564 (2008).
2. P. Müller, X.-P. Li, K. K. Niyogi, *Plant Physiology* **125**, 1558–1566 (2001).
3. Y. Miloslavina et al., *FEBS Letters* **582**, 3625–3631 (2008).
4. X. Pan et al., *Nature Structural & Molecular Biology* **18**, 309–315 (2011).

SYNTHESIS AND APPLICATION OF NANOCOMPOSITE OF LIGNIN OBTAINED FROM SECONDARY WOOD RAW MATERIALS FOR MICROPLASTIC REMOVAL

Austėja Burbulytė¹, Ieva Uogintė², Vaidas Pudžaitis³

¹ Faculty of Fundamental Sciences, Vilnius Gediminas Technical University, Saulėtekio Ave. 11, LT-10223 Vilnius

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

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

email: austėja.burbulyte@stud.vilniustech.lt

Nowadays, plastic production amount is increasing every year. According to the latest data, production reached 390.7 million tons per year. Only a relatively small amount of plastic is recycled or made into bioplastic [1].

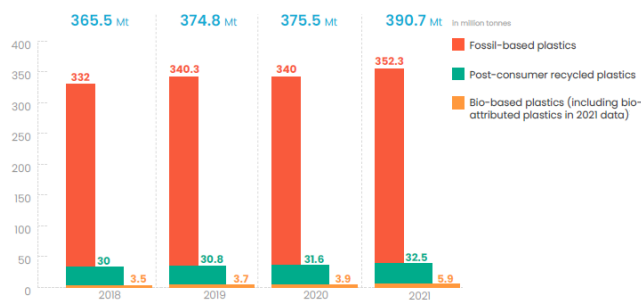


Figure 1. Plastic production rates [1].

One type of plastic is microplastic, whose particles size ranges from 5 mm to 1 μ m. In the environment, microplastic causes various ecological and health protection problems. This is due to the small size of these particles, their ability to attract toxic pollutants and enter in other organisms. The majority of microplastic particles are found in water systems, another part on land and atmosphere. Every year million tons of microplastics dumped into freshwater systems, rivers, seas and oceans [2]. In this key, it is important to find new microplastic removal technologies. One strategy is applying sorption process by using natural materials such as lignin. This biopolymer can be found in plants and extracted from biomass. According to eco-friendly, planet safe and nontoxic technologies, in this work lignin is extracted from industrial wastes. Synthesized nanocomposite from lignin and magnetite can be used as a sorbent. Microplastic particles are removed from water with external magnetic field.

The principal aims of this study: 1. Prepare wood sawdust and extract lignin. 2. Synthesize lignin nanocomposite. 3. Investigate and describe microplastic sorption from water capabilities of prepared lignin nanocomposite.

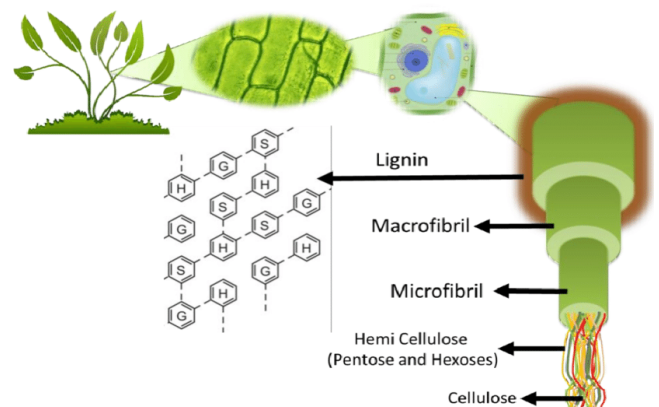


Figure 2. Lignin in plants [3].

During the study, lignin was isolated from softwood sawdust using an alkaline extraction method. Magnetic iron oxide nanoparticles (Fe_3O_4) and lignin solution are used for the synthesis of nanocomposite. In sorption process was used 100 μ m low-density polyethylene. The efficiency and kinetic studies were determined by sorbing microplastic particles in the selected time interval from 2 min to 4 h. The results show that the synthesized lignin- Fe_3O_4 nanocomposite has sorption capabilities for sorbing low-density polyethylene particles.

References

1. *Plastics-the Facts 2022* OCTOBER 2022. (n.d.).
2. Koutnik, V. S., Leonard, J., Alkidim, S., DePrima, F. J., Ravi, S., Hoek, E. M. V., & Mohanty, S. K. (2021). Distribution of microplastics in soil and freshwater environments: Global analysis and framework for transport modeling. In *Environmental Pollution* (Vol. 274). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.116552>
3. Thota, S. P., Bag, P. P., Vadlani, P. V., & Belliraj, S. K. (2022). Plant Biomass Derived Multidimensional Nanostructured Materials: A Green Alternative for Energy Storage. *Engineered Science*, 18, 31–58. <https://doi.org/10.30919/es8d664>

IMPACT OF ANNEALING TEMPERATURE FOR THE FORMATION AND STRUCTURE CHANGES FOR TIN SULFIDE FILMS

¹Asta Bronusiene, ¹Ieva Barauskiene, Boldizsár Zsiros², Attila Farkas², ¹Ingrida Ancutiene

¹Department of Physical and Inorganic Chemistry, Kaunas University of Technology, Radvilenu str. 19, LT-50254 Kaunas, Lithuania, email: astbak@ktu.lt

²Department of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Hungary

In recent years, nanostructured semiconductors have gained significant interest due to their high potential application in electronic, optical, and semiconductor devices. The fundamental properties of these nanostructured materials depend on their architectures, including geometry, morphology, and hierarchical structures [1,2]. Controlling the shapes and sizes of semiconductors to get better properties is one of the most challenging issues. In particular, many efforts have been made to develop novel methods for the preparation of thin metal chalcogenide films [3]. In addition, chalcogenide nanomaterials have been extensively studied due to their unique physical and chemical properties and potential applications in diverse areas [4].

Metal sulfides are one of the most important semiconductor materials that can be made using many different synthesis routes. Solution based synthesis has many advantages, such as being inexpensive, having short duration, etc. Moreover, the application of abundant non-toxic components allows to reduce energy consumption indirectly through a simpler waste treatment or more efficient processing of raw materials with less CO₂. A successive ionic layer adsorption and reaction (SILAR) method is one of the chemical methods for making uniform films where different substrates, having different sizes, can be used. In this paper, a SILAR synthesis route for thin tin sulfide film fabrication is reported. The obtained thin films were characterized using X-Ray diffraction, Raman, scanning electron microscopy (SEM), and ultraviolet-visible (UV-Vis) spectroscopy. The effect of annealing temperature on the morphology and phase of tin sulfide has been investigated.

In this work, ascorbate stabilized tin sulfide on the fluorine doped tin oxide (FTO) glass slides was synthesized by an eco-friendly and low-waste SILAR process. The main aim of the process is to immerse the substrate into two separately placed precursor solutions, then wash with distilled water in order to wash loosely bounded ions. This is a gentle reaction route when aqueous solutions react at a low temperature (40 °C) to form tin sulfide and the uses of organic solutions are not needed. To improve the solubility of tin(II) chloride in distilled water, environmentally-safe and biodegradable

L-ascorbic acid was used as a reducing and capping agent [5].

X-Ray diffraction results showed change in the phasic composition of the deposited films. Non-annealed films consist of SnS and Sn₂S₃, where SnS (mineral Herzenbergite) is the dominant [5]. Thermal treatment gives a two-fold view. After annealing at 200 °C and 400 °C the most intensive peaks were assigned to orthorhombic SnS, but due to very close d-spacing values, these peaks were assigned to SnO₂, which is on the top of the FTO glass. Annealing at 200 °C leads to formation of SnS and Sn₂S₃, while 400 °C shows the formation of SnS₂.

Moreover, Raman spectroscopy, together with X-Ray diffraction patterns, confirms phasic changes for non-annealed and annealed samples.

Ultraviolet-visible spectroscopy was done to calculate bandgap values of the films obtained. The bandgap values were calculated using the Tauc's plot. Before annealing values were higher and lie between 1.3-1.4 eV, after annealing values decreased and lie between 1.2-1.3 eV. The obtained values are close to the SnS and Sn₂S₃ values.

In this current work, a facile, eco-friendly technique to synthesize L-ascorbate acid stabilized tin sulfide thin films is described. This material is fairly cheap, environmentally clean and has interesting properties.

References

- [1] M. Salavati-Niasari, D. ghanbari, F. Davar, Shape selective hydrothermal synthesis of tin sulfide nanoflowers based on nanosheets in the presence of thioglycolic acid, *J Alloys Compd.* 492 (2010) 570–575. <https://doi.org/10.1016/J.JALLCOM.2009.11.183>.
- [2] M.S. Fuhrer, J. Nygard, L. Shih, M. Forero, Young-Gui Yoon, etc., Crossed Nanotube Junctions, *Science* (1979). 288 (2000).
- [3] A.P. Alivisatos, *Semiconductor Clusters, Nanocrystals and Quantum Dots*, Plenum, 1993. <https://www.science.org>.
- [4] Y. Zhao, Z. Zhang, H. Dang, W. Liu, Synthesis of tin sulfide nanoparticles by a modified solution dispersion method, *Materials Science and Engineering: B*. 113 (2004) 175–178. <https://doi.org/10.1016/J.MSEB.2004.08.003>.
- [5] A. Bronusiene, A. Popov, I. Barauskiene, I. Ancutiene, Effect of ascorbic acid on the properties of tin sulfide films for supercapacitor application, *Surfaces and Interfaces*. 25 (2021). <https://doi.org/10.1016/J.SURFIN.2021.101275>.

BALTYMINĖS APLINKOS ELEKTROSTATINĖ ĮTAKA ŠVIESORANKOS KOMPLEKSŲ PIGMENTŲ SUŽADINTOSIOMS BŪSENOMS

Gabrielė Rankelytė^{1,2}, Jevgenij Chmeliov^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekuliųjų darinių fizikos skyrius

Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: gabriele.rankelyte@ftmc.lt

²Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas

Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius

Fotosintezė yra vienas iš svarbiausių Žemėje vykstančių procesų. Patys našiausi šį procesą vykdančios organizmai yra sausumos augalai [1]. Jų chloroplastuose esančioje tilakoido membranoje išsivystė dvi fotosintezę vykdančios sistemos – pirmoji (PSI) ir antroji (PSII) fotosistema, kiekviena su savo šviesorankos antena (atitinkamai LHCI ir LHCI). Pirmoji fotosistema yra pats našiausias šviesos pavertimo į energiją aparatas. Beveik visa fotonų energija yra panaudojama krūvių atskyrimo procesui reakcijos centruose vykdyti, taigi PSI kvantinis našumas yra beveik lygus vienetui [2]. Viena iš būtinų sąlygų tokiam aukštam našumui pasiekti yra labai greita sužadavimo energijos pernaša tarp pigmentų šviesorankos antenoje. LHCI antenoje sužadavimo energijos pernašai didelę įtaką turi tarp dviejų arba daugiau pigmentų susidaranti krūvio pernašos (CT) būsenos [3]. Keletas krūvio pernašos būsenų padėčių yra žinoma, tačiau jos ne iki galo paaikškina pirmosios fotosistemos sugerties ir emisijos spektruose stebimus reiškinius [4] (pvz. antrosios smailės susiformavimas antenos fluorescencijos spektre).

Pirmoji fotosistema sugeria ir fluorescuoja šviesą prie ilgiausių bangos ilgių, lyginant su kitais šviesorankos kompleksais. Augaluose PSI šviesorankos antena susideda iš keturių subkompleksų, kurie pasižymi panašia erdvine struktūra, tačiau demonstruoja skirtingas spektrines savybes. Labiausiai į raudonąją spektro pusę pasislinkusi (ties 733 nm) minėtoji antroji smailė yra stebima Lhca4 subkomplekso fluorescencijos spektre [5].

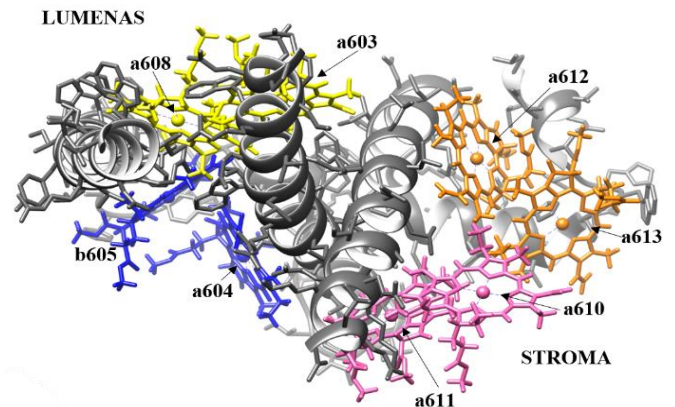
Pigmentai šviesorankos antenoje yra apsupti kitų pigmentų bei baltymo. Norint nuodugniai išanalizuoti tiek eksitoninę, tiek ir krūvio pernašos būsenas lemiančią sąveiką tarp chlorofilo molekulių, yra būtina įskaityti aplinkos molekulių daromą įtaką pigmentų sužadintosioms būsenoms. Panašių tyrimų, kurie nagrinėtų aplinkos įtaką eksitoninėms pigmentų būsenoms LHCI arba FMO struktūrose, gausu, tačiau tyrimų, kurie nagrinėtų krūvio pernašos būsenas ir LHCI aplinkos kuriamą įtaką joms, trūksta.

Lhca4 erdvinė struktūra (1 pav.) buvo gauta kaip PSI superkomplekso ketvirtoji grandinė, kuri yra laisvai prieinama baltymų duomenų bazėje PDB [6]. Atsižvelgiant į sužadintųjų būsenų

savybes vakuume, buvo nustatytos pasirinktų chlorofilo dimerų krūvio pernašos būsenos. Siekiant įskaityti aplinkos molekulių įtaką šioms būsenoms, baltymas bei pigmentai buvo aprašyti daliniais atominiais krūviais. Energijos poslinkis dėl aplinkos elektrosstatinės įtakos buvo apskaičiuotas CDC metodu [7] pagal (1) formulę:

$$\Delta E_m = \frac{1}{\epsilon_{\text{eff}}} \sum_l \sum_{\eta, j} \frac{(q_l^{(m)}(s, s) - q_l^{(m)}(0, 0)) q_j^{(\eta)}(0, 0)}{|R_l^{(m)} - R_j^{(\eta)}|}. \quad (1)$$

Čia ϵ_{eff} yra aplinkos efektinė dielektrinė skvarba, m žymi tiriamąjį dimerą, $q_l^{(m)}(s, s)$ ir $q_l^{(m)}(0, 0)$ yra šio dimero atitinkamai sužadintosios ir pagrindinės būsenos daliniai krūviai. $q_j^{(\eta)}(0, 0)$ yra tiriamąjį dimerą supančių pigmentų ir baltymo daliniai krūviai. $R_l^{(m)}$ ir $R_j^{(\eta)}$ yra atitinkamai tiriamojo dimero ir aplinkos dalelių koordinatės.



1 pav. Lhca4 erdvinė struktūra. Pilkai pavaizduotas baltymas, spalvotai – keturi iš dvylikos tiriamųjų dimerų. Karotenoidai nepavaizduoti.

Literatūra

1. A. Larkum, *Curr. Opin. Biotechnol.* **21**, 271–276 (2010).
2. R. Croce and H. Van Amerongen, *Photosynth. Res.* **116**, 153–166 (2013).
3. M. Tros, V. I. Novoderezhkin, R. Croce, R. van Grondelle, and E. Romero, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 25720–25729 (2020).
4. T. Morosinotto, M. Mozzo, R. Bassi, and R. Croce, *J. Biol. Chem.* **280**, 20612–20619 (2005).
5. R. E. Blankenship, *Molecular mechanisms of photosynthesis* (John Wiley & Sons, 2021).
6. X. Qin, M. Suga, T. Kuang, and J.-R. Shen, *Science* **348**, 989–995 (2015).
7. J. Adolphs, F. Müh, M. E.-A. Madjet, and T. Renger, *Photosynth. Res.* **95**, 197–209 (2008).

STUDY OF MICROPLASTIC PARTICLES IN LITHUANIAN RIVERS - PLASTIC PIRATES PROJECT

Tomas Stonkus¹, I. Uogintė¹, S. Byčėnienė¹, V. Pudžaitis², R. Markevičiūtė³

¹ Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research,
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: tomas.stonku@gmail.com

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

³Nature Research Centre, Akademijos str. 2, LT-08412 Vilnius, Lithuania

Microplastic is a plastic polymer with a size less than 5 mm. Microplastics can be primary and secondary. Primary microplastics are the particles that are produced in micro-size. Secondary microplastics come from the degradation of larger plastic waste by physical, chemical, and biological processes in the environment. [1] The ecological risk associated with environmentally relevant microplastic pollution is unclear; however, some field observations and laboratory studies have shown that microplastics are likely to threaten the life and development of biota via direct and indirect pathways, including ingestion, adherence and transfer throughout food chains [2]. Microplastics are a pervasive environmental problem that can harm aquatic ecosystems and have potential health implications for both marine life and humans [3]. Citizen science has long been used in environmental monitoring research due to its ability to collect large amounts of data simultaneously on a global scale. The Plastic Pirates project is an international citizen science project in which teachers and students work together with scientists to investigate plastic pollution on river banks and in their waters. Eleven European countries are currently participating in the project. Lithuania joined this project in 2022. 66 Lithuanian schools are already participating in this project. It is very important to understand that educating children at a young age about environmental issues can create a strong foundation for a responsible and sustainable state. In this study, together with the Plastic Pirates, we aim to: 1) investigate microplastic contamination in river samples; 2) present the methods applied for MP analysis, including sampling, processing, identification, characterization, and quantification; and 3) evaluate the abundance and characteristics

of microplastics. Three rivers were investigated and the presence of microplastics was confirmed. Microplastics were examined and characterized by microscopic and spectroscopic analysis methods. Shapes, sizes, colors, and chemical compositions of particles were described. This investigation allowed us to identify what type of microplastics is mostly found in the rivers of Lithuania. The results indicated that something needs to be done to decrease the amount of microplastics in rivers. Researching the properties of microplastics could be the first step in improving our aquatic ecosystem and finding new, innovative methods for removing this pollution source.

Acknowledgment: We would like to thank the schools, teachers, and students who participated in the Plastic Pirates project and helped collect data on litter pollution along the Lithuanian riverbanks. Also, we would like to thank the Lithuanian non-formal education agency for the opportunity to join the Plastic Pirates Lietuva project.



LINEŠA
Lietuvos
neformaliojo
švietimo
agentūra

References

1. Firdha Cahya Alam, Emenda Sembiring, Barti Setiani Muntalif, Veinardi Suendo 2019. Microplastic distribution in surface water and sediment river around slum and industrial area (case study: Ciwalengke River, Majalaya district, Indonesia)
2. Wenya Luo, Lei Su, Nicholas J. Craig, Fangni Du, Chengxi Wu, Huahong Shi, 2019 Comparison of microplastic pollution in different water bodies from urban creeks to coastal waters
3. Karen Duis, Anja Coors 2016. Microplastics in the aquatic and terrestrial environment: sources (with a specific focus on personal care products), fate and effects.

HYDROTHERMAL SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF PRUSSIAN BLUE ANALOGUES FOR AQUEOUS SODIUM ION BATTERIES

Adolfas Žukauskas^{1,2}, Nadežda Traškina¹, Gintarė Gečė¹, Jurgis Pilipavičius^{1,2},
Linus Vilčiauskas^{1,2}

¹Vilnius University Faculty of Chemistry and Geosciences, Naugarduko st. 24, LT-03225 Vilnius
e-mail: adolfas.zukauskas@chgf.stud.vu.lt

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

Aqueous sodium-ion batteries are an attractive alternative to stationary lithium batteries because they are relatively inexpensive and environmentally friendly. One of the most promising electrode materials used in this technology are Prussian blue analogues (PBA). [1] PBAs show rather attractive electrochemical properties, such as high capacity, high cycling efficiency and stability. They are also non-toxic and easily synthesizable from abundant precursors via coprecipitation method. [2] Yet the optimal synthesis parameters such as synthesis temperature, pH, amount of sodium precursor is not known. Therefore, this study focuses on finding various optimal synthesis parameters in order to obtain high capacity, electrochemically stable PBA cathode.

The aim of this study was to hydrothermally synthesize $\text{Na}_2\text{Fe}[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ particles and investigate the effects of synthesis parameters on the morphology and phase purity. The electrochemical properties of selected samples were investigated by Cyclic Voltammetry, Galvanic Charge - Discharge cycling. The material synthesis was carried out in temperatures ranging from 60°C to 140°C, with varying synthesis time, amount of additional NaCl, and ascorbic acid. These parameters were selected to alter the particle morphology, size, and phase composition. The particle morphology and size were analyzed using SEM, the sodium content in material was determined through ICP-MS and phase composition evaluated using XRD. The study showed that particles synthesized with additional ascorbic acid and NaCl were more likely to be in the shape of rectangular prisms. The additional NaCl resulted in more sodium in the crystal lattice, while additional ascorbic acid had the opposite effect - amount of Na decreased in final product. XRD results revealed formation of a cubic structure at synthesis

temperatures higher than 100 °C and monoclinic if the temperature was below 100 °C. Based on the obtained data, potential candidates for the sodium ion battery were identified.

Particles synthesized at 140°C and 80°C without additives, and particles synthesized at 80°C with large amount of ascorbic acid and NaCl were selected for further electrochemical investigation. The materials prepared without additives exhibited high initial capacities of 72.8 mAh/g, which decreased to 67.1 mAh/g after 100 cycles. The initial capacity recorded for materials synthesized at 80°C with added ascorbic acid was 78.6 mAh/g and 45.1 mAh/g after 100 cycles, 67.56 mAh/g and 60.3 mAh/g for materials synthesized at 80°C with added NaCl, and 25.4 mAh/g and 47.3 mAh/g for materials synthesized at 140°C without additives. Based on further analysis of the data, the optimal synthesis method for the Prussian white cathode was determined to be the one conducted at 80°C without additional additives. This method exhibited a high capacity with minimal capacity fade and a relatively moderate yield.

References:

- [1] Zao, L, Zhang, T, Engineering of sodium-ion batteries: Opportunities and challenges. Proc Est Acad Sci Eng.
- [2] Linden D, Reddy T. Handbook of Batteries. McGraw Hill Professional; 2001.

UŽŠALDYTOS MODOS KLASIKINĖSE SISTEMOSE

Justina Vaičaitytė^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas

Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

El. p.: justina.vaicaityte@ff.stud.vu.lt

Artutiniai metodai yra plačiai paplitęs būdas fizikos ir matematikos uždaviniams bei lygtims spręsti. Vienas iš tokių metodų privalumų yra tai, kad jie gali būti pritaikyti įvairiems uždaviniams, kurių analitiniai sprendiniai yra sudėtingi arba iš viso neegzistuoja. Dėl šios priežasties artutinių metodų taikymas yra plačiai naudojamas daugelyje fizikos sričių, ypač kvantinėje ir klasikinėje mechanikoje. Vis dėlto, dažnai tokie metodai nėra pakankamai tikslūs, todėl paprastai ieškoma įvairių alternatyvų klasikiniam trikdžių teorijos metodams siekiant patikslinti sprendinius.

Fizikoje itin plačiai nagrinėjamos klasikinės ir kvantinės osciliatorių sistemos. Tokiu atveju alternatyvus artutinis metodas galėtų būti užšaldytų modų artinys. Nustatyta, jog nagrinėjant atvirąsias kvantines sistemas užšaldžius lėtus aplinkos laisvės laipsnius ir pritaikius įprastą Redfildo teoriją kitiems laisvės laipsniams rezultatų tikslumas ženkliai išauga. Parodyta, jog toks artinys ne tik padidina rezultatų tikslumą nemarkoviniuose režimuose, bet ir iš esmės turi panašias skaičiavimo sąnaudas [1]. Be to, užšaldytų modų artinį galima pritaikyti ne tik kvantinėms, bet ir klasikinėms sistemoms.

Šiame darbe buvo tiriama klasikinė daugelio sukabintų osciliatorių sistema, kurioje nagrinėjamas vienas pagrindinis osciliatorius, o kiti sąveikaudami su juo sudaro jam aplinką. Pakeitus visus parametrus į bedimensius ir darant prielaidą, kad sąveikos koeficientai tarp osciliatorių yra maži, bei naudojantis kelių skalių metodu paremta trikdžių teorija buvo gauta per aplinkos osciliatorių pradinės sąlygas (koordinatės ir judesio kiekius) suvidurkinta kvadratinio nuokrypio nuo pradinės padėties išraiška pagrindiniam osciliatoriui $\langle D(t) \rangle = \langle (X(t) - X_0)^2 \rangle$. Kaip ir buvo galima tikėtis, gautas sprendinys su tikslu skaitiniu sprendiniu gerai sutapo tik esant mažiems sąveikos tarp osciliatorių koeficientams, todėl, siekiant patikslinti sprendinį, trikdžių teorija buvo taikoma tik aukšto dažnio modoms, o žemo dažnio modos buvo užšaldytos, t.y. buvo laikoma, jog jų koordinatės ir judesio kiekiai laikui bėgant nekinta (užšaldžius dalį modų galima gauti analizinę sprendinio išraišką). Buvo apibrėžta tokio pavidalo spektrinio tankio funkcija:

$$I(\omega) = \frac{\lambda\pi\omega}{\omega_c} e^{-\frac{\omega}{\omega_c}}, \quad (1)$$

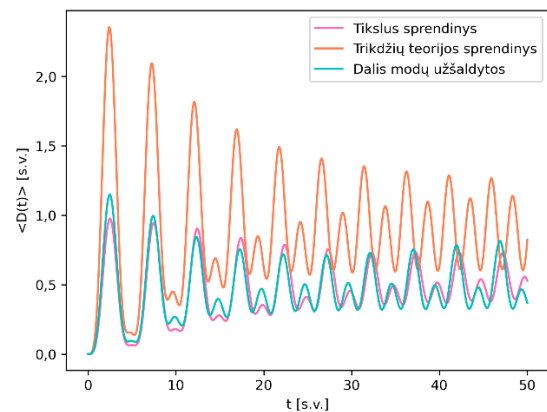
čia λ - reorganizacijos energija, apibrėžianti suminį sistemos osciliatoriaus sąveikos su aplinkos oscilatoriais stiprį, ω - dažnis, ω_c - ribinis dažnis. Siekiant išskirti lėtas modas spektrinis tankis buvo padalintas į dvi dalis naudojant tokią išskiriančią funkciją:

$$S(\omega, \omega^*) = \left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega^*}\right)^2\right)^2, \quad (2)$$

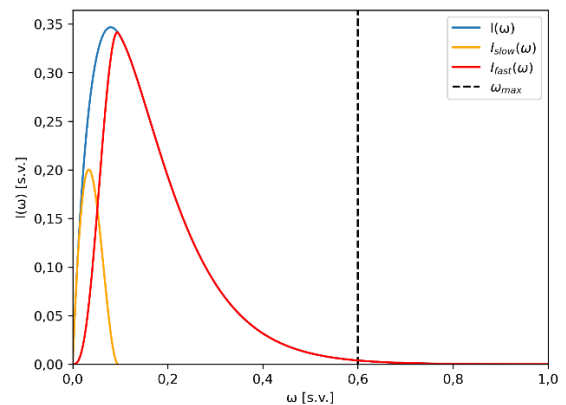
čia ω^* - parametras, apibrėžiantis užšaldytų modų skaičių. Tuomet lėtą spektrinio tankio dalį galima užrašyti taip:

$$I_{slow}(\omega) = S(\omega, \omega^*)I(\omega). \quad (3)$$

Tinkamai parinkus ω^* buvo lyginamas užšaldytų modų artinys su tikslu skaitiniu sprendiniu bei trikdžių teorijos sprendiniu keičiant parametrų vertes plačiuose intervaluose. Nustatyta, jog užšaldytų modų artinys gali ženkliai patikslinti trikdžių teorijos sprendinį įvairioms λ vertėms. Patikslinto sprendinio pavyzdys ir jį atitinkantis spektrinis tankis yra pateikiami atitinkamai 1 ir 2 pav.



1 pav. Užšaldytų modų artinio palyginimas su tikslu skaitiniu sprendiniu ir kelių skalių metodu gautu sprendiniu. Čia $\lambda=0,3$, $\omega_c=0,08$, užšaldyta 14% modų.



2 pav. Spektrinis tankis. Čia $\lambda=0,3$, $\omega_c=0,08$, $\omega^*=0,096$

Literatūra

1. A. Montoya-Castillo, T. C. Berkelbach, D. R. Reichman, *The Journal of Chemical Physics* **143**, 194108 (2015)

STUDY OF MXENES INTERACTION WITH ORGANIC MOLECULES IN THE AQUEOUS ENVIRONMENT

Germantė Paulikaitė¹, Martynas Talaikis², Gediminas Niaura², Simonas Ramanavičius²

¹Department of Physical Chemistry, Vilnius University Faculty of Chemistry and Geoscience, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius, e-mail: germante.paulikaite@chgf.stud.vu.lt

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

MXenes are a novel 2D material class discovered at Drexler University in 2011 and attracted the attention of many scientists due to their unique electrical, plasmonic, hydrophilic, and mechanical properties. [1]. Nevertheless, these nanostructures are distinguished for their complex surface chemistry, significantly impacting their properties. MXenes are a broad material class, although $T_3C_2T_x$ structures are the most studied as it was the first MXenes discovered. The most common synthesis method is by using $T_3C_2T_x$ precursor and selectively etching using HF acid. This way, a sheet-like structure is synthesized, which, compared to other MXene structures, is the most stable in various conditions and is more favorable for practical use.

MXenes are being investigated not only for their unique properties but also for their wide range of applications. These days, MXenes are used in surface Raman spectroscopy [2], biofuel elements [3], lithium and sodium ions batteries [4], and many other applications. Interaction with other organic molecules can be vastly adaptable in various sensors and adsorbents, attributed to the complex MXene surface structure. More and more research is being conducted to develop various surface plasmon resonance based sensors using MXene plasmonic properties.

In this research, MXenes were synthesized by selectively etching Ti_3AlC_2 precursor in concentrated HF acid - this way, synthesized nanostructures have a large surface area, which is favorable for molecular interaction and feature analysis. Methylene blue was chosen as a model molecule to study the interaction between organic molecules and MXenes. Since MXenes are great at cation adsorption in aqueous solutions - a study was performed using a constant sodium ion concentration solution at pH 3-6. This leads to stationary conditions and a change in adsorption capacity, which is in relation to pH. To calculate adsorption capacity - the spectrophotometric method was used to indicate methylene blue absorption intensity peak change (Fig. 1). To evaluate the functional group ability to adsorb molecules on MXene surface - azure A, containing similar to Methylene blue structure was used.

It was established that the surface of maxenes synthesized in concentrated HF acid is suitable for adsorbing organic molecules of methylene blue.

This property of MXenes can be widely applied in various types of sensors and water treatment technology.

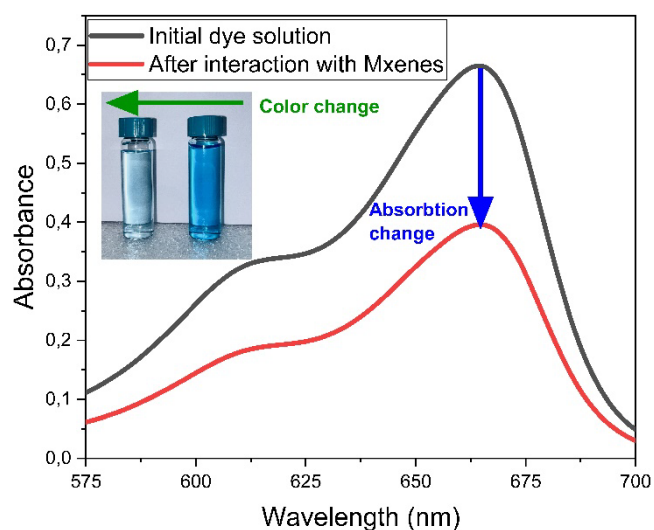


Fig. 1 Visible light absorption of methylene blue before and after interaction with MXenes.

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No PD-22-155.

References

- [1] Gogotsi Y, Anasori B. The Rise of MXenes. *ACS Nano* 2019; 13: 8491-4. <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b06394>.
- [2] Adomavičiūtė-Grabusovė S, Ramanavičius S, Popov A, Šablinskas V, Gogotsi O, Ramanavičius A. Selective enhancement of SERS spectral bands of salicylic acid adsorbate on 2D $Ti_3C_2T_x$ -based MXene film. *Chemosensors* 2021;9:223.
- [3] Ramanavicius S, Ramanavicius A. Progress and Insights in the Application of MXenes as New 2D Nano-Materials Suitable for Biosensors and Biofuel Cell Design. *Int J Mol Sci* 2020; 21. <https://doi.org/10.3390/ijms21239224>.
- [4] Li X, Huang Z, Shuck CE, Liang G, Gogotsi Y, Zhi C. MXene chemistry, electrochemistry and energy storage applications. *Nat Rev Chem* 2022; 6: 389-404. <https://doi.org/10.1038/s41570-022-00384-8>.

INVESTIGATION OF PHOTOLUMINESCENCE EFFICIENCY OF GaAsBi/GaAs QUANTUM WELL STRUCTURES

Aistė Butkutė, Aivaras Špokas, Andrea Zelioli, Bronislovas Čechavičius, Sandra Stanionytė, Evelina Dudutienė, Renata Butkutė

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

There is high demand for light sources operating in the near infrared (NIR) range. Due to favorable properties, GaAsBi quantum wells (QWs) could be used as an active area in such emitters [1]. The bandgap of GaAsBi shifts to a longer wavelength and becomes less temperature sensitive with increasing Bi content. Thus, the use of the GaAsBi quantum structures as the active medium, would allow to create a tunable laser on a well-developed GaAs platform that operates at room temperature without additional cooling.

Unfortunately, the growth of GaAsBi quantum structures with high photoluminescence (PL) intensity is difficult. Bismuth is a large atom and its insertion into the GaAs lattice requires extremely low growth temperatures, which leads to a high concentration of defects, resulting in low luminescence intensity. To reduce the defect density in bismide structures, various methods are used, such as thermal annealing of the structures at temperatures above the growth temperature [2], growth under ultraviolet light [3], different designs of quantum structures [4], etc. All of these technological modifications affect the emission of GaAsBi quantum wells in different ways. Although there are several groups in the world investigating photoluminescence properties of GaAsBi, none of them has so far attempted to quantitatively evaluate the QW emission efficiency of GaAsBi.

There are different ways of determining the internal quantum efficiency (IQE) of an active region, some of which include temperature-dependent relative measurements, excitation power dependent measurements, absolute techniques, etc. In this work, a detailed optical study of GaAsBi QWs is presented: the photoluminescence efficiency of a twelve GaAsBi/GaAs multiple quantum well structures under resonant excitation (excited by a laser with a wavelength of 910 nm) is investigated.

Due to the extremely low efficiency of the sample, an absolute quantum efficiency measurement with an integrating sphere was not possible to conduct. As a result, alternative methods were employed to assess IQE. At first, the efficiency investigation of GaAsBi/GaAs quantum wells was performed using a temperature dependent (3-300 K) PL measurement (Fig. 1), where IQE is estimated by measuring the ratio of PL intensities at room and low temperatures and assuming that the nonradiative recombination at low temperatures is negligible. Also, the IQE of GaAsBi/GaAs quantum wells was evaluated by the

room temperature PL measurements, varying the excitation power and employing the Shockley-Read-Hall model [5]. In addition, temperature-dependent PL measurements of the GaAsBi/GaAs QW were carried out under various excitation power regimes and employing laser power-normalized temperature-dependent PL intensity dependency measurements [6].

All in all, the IQE in this work was determined using several methods and all of them gave similar, but very low IQE values. The extremely low efficiencies were associated with the low growth temperature, resulting in a high density of point defects in the material.

Quantitatively assessed emission efficiency allows not only to compare structures grown and characterized in different laboratories, but also to evaluate both radiative and non-radiative mechanisms, which could enhance the optimization of GaAsBi structure growth.

This work was supported by Research Council of Lithuania under the grant No. P-SV-23-316 (LMTLT).

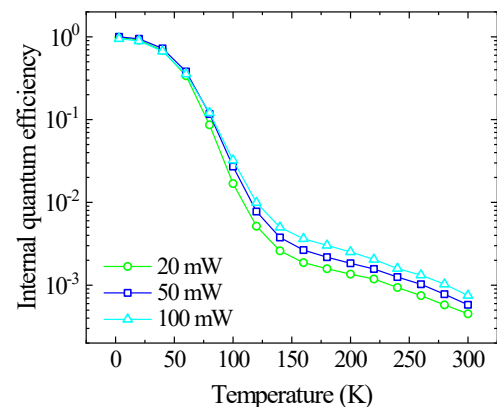


Fig. 1. IQE evaluation of a 12 GaAsBi/GaAs MQW structure at three different excitation powers using temperature-dependent photoluminescence measurement.

References

1. R. D. Richards et al. *physica status solidi (b)* **259(2)**, 2100330 (2022).
2. S. Mazzucato et al. *Semiconductor science and technology* **28(2)**, 022001 (2013).
3. P. M. Mooney et al. *Semiconductor Science and Technology* **31(8)**, 085014 (2016).
4. S. Pūkienė et al. *Nanotechnology*, **30**, 455001 (2019)
5. Z. Bryan et al. *Appl.Phys. Let.* **106**, 142107 (2015).
6. A. Hangleiter et al. *phys. stat. sol (a)* **201(12)**, 2808-2813 (2004).

TEMPERATURE - DEPENDENT PHOTOLUMINESCENCE AND PHOTOREFLECTANCE STUDY OF GaAsBi LAYERS

Patricija Šleiniūtė^{1,2}, Evelina Dudutienė¹, Simona Pūkienė¹, Sandra Stanionytė³,
Bronislovas Čechavičius¹, Renata Butkutė^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics,
Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lithuania

²Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Photonics and Nanotechnology,
Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lithuania

³Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterization of Materials Structure,
Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lithuania
patricija.sleiniute@ff.stud.vu.lt

Gallium arsenide bismide (GaAsBi) has emerged as a promising material within the field of optoelectronics operating in near infrared spectral range. Research has shown that the incorporation of bismuth (Bi) into the GaAs induces a decrease in the bandgap of the material within the range of 42 to 90 meV per percentage of Bi present [1, 2]. Additionally, the introduction of Bi decreases the temperature dependence of the bandgap in the range of 0.1 to 0.3 meV K⁻¹ [3]. These properties render GaAsBi applicable for near - infrared light sources, photodetectors and devices operating in terahertz frequency range.

In this work a series of almost completely strained 100 nm thick GaAsBi pseudomorphic layers were investigated. These samples were grown and analyzed to ascertain layer characteristics when employing an ultra - thin buffer layer. The Bi content varied from 0.97% to 11.2%. The growth process involved the deposition of GaAsBi layers on top of a 20 nm GaAs buffer layer, employing two molecular beam epitaxy (MBE) systems: STV - A MBE and Veeco GENxplor for different sample series, indicated with letters B or VGA respectively. The GaAs buffer layer was grown at 650°C, afterwards the temperature was reduced for growing GaAsBi. To increase Bi incorporation, buffered substrates were exposed to pure Bi flux for 10 s, creating a Bi wetting layer that partially covers the buffer layer, thereby acting as a surfactant. This investigation performed on optical properties of GaAsBi layers included the use of photoluminescence (PL) and photoreflectance (PR) spectroscopies. Room - temperature PL spectra of all examined samples (see fig.1.) were measured. In the B series samples, PL spectra reveal the presence of two distinct PL bands: one associated with optical transitions in GaAs, the other corresponding to GaAsBi. In contrast, the VGA series samples exhibit three PL bands. Further exploration is required to understand the origin of the third band, although it may be linked to the Bi wetting layer utilized during sample growth. Layers with lower Bi content emitted light up to room temperature, however, GaAsBi layer with 11.2% of Bi showed no luminescence at 300K. Therefore, PR spectroscopy was used and optical transitions

from temperature - dependent PR spectra (see fig.2.) were seen in the range of 3 to 300K. The obtained data were analyzed with the use of Varshni law [4] and Aspnes function [5]. As expected, in the measured temperature interval the bandgap of the material decreased. The incorporation of 11.2 % Bi shifted the bandgap of the sample towards lower energies by ~ 56 meV/%Bi. Furthermore, the nature of optical transition was observed to change from excitonic to band-to-band with increasing temperature.

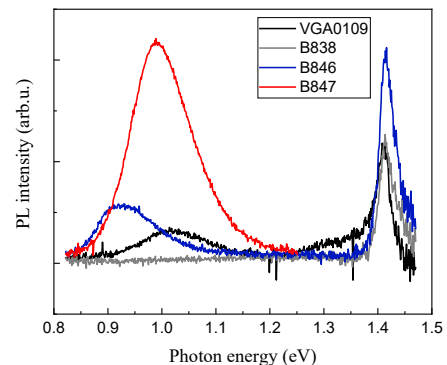


Fig. 1. Room temperature PL spectra of all grown GaAsBi layers with varying Bi content [6].

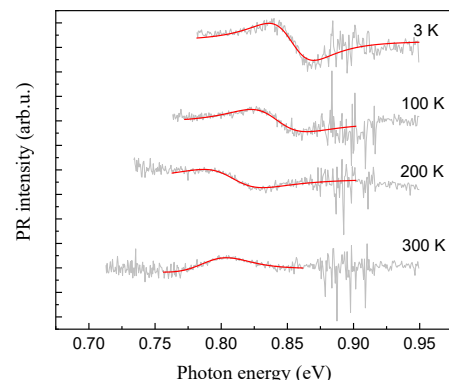


Fig. 2. MBE grown GaAs_{0.888}Bi_{0.112} layer (B838) PR spectra in the 3 - 300 K temperature range fitted with Aspnes function.

References:

- [1] Z. Chine et al., *Semicond. Sci. Technol.* 25, 065009 (2010).
- [2] K. Alberi et al., *Appl. Phys. Lett.* 91, 051909 (2007).
- [3] S. Tixier et al., *Appl. Phys. Lett.* 82, 2245 (2003).
- [4] Y. P. Varshni, *Physica*, 36 (1), 149-154 (1967).
- [5] D. E. Aspnes, *Surface Science*, 37, 418-442 (1973).
- [6] S. Pūkienė et al., *Lith. J. Phys.* 62, 93-100 (2022).

FEMTOSEKUNDINIŲ LAZERIŲ FORMUOJAMI PLAZMONŲ ŽADINANTYS MASYVAI

Kipras Čepaitis, Kernius Vilkevičius, Evaldas Stankevičius

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: kipras.cepaitis@ff.stud.vu.lt

Įvairūs taurieji metalai (tokie kaip auksas, sidabras, platina) yra plačiai tyrinėjami dėl jų pritaikymo saulės panelėse [1], biologiniuose ir cheminiuose sensoriuose [2], bei paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje [3]. Taurieji metalai ypatingai sąveikauja su elektromagnetine spinduliuote, o jų nanodaleles paveikus šviesa, sužadina laisvųjų elektronų svyravimai. Šie svyravimai, vadinami lokalizuotais paviršiaus plazmonais (LPP), pasižymi išskirtinėmis optinėmis savybėmis. Tokius darinius tvarkingai formuojant tam tikru periodu gardelėje, į metalą krentanti šviesa ne tik kiekviename jų sužadina LPP, tačiau metalo dangoje papildomai sužadina kitą plazmoninę modą – sklindančius paviršinius plazmonus. Šios dvi vienu metu sužadintos modos gali hibridizuotis bei metalo paviršiuje sužadinti hibridinius plazmonus, kurie pasižymi paviršiniu gardelės rezonansu (PGR). Šis rezonansas išsiskiria tuo, kad yra itin siauras ir turi didelį kokybės faktorių bei pasižymi dispersinėmis savybėmis.

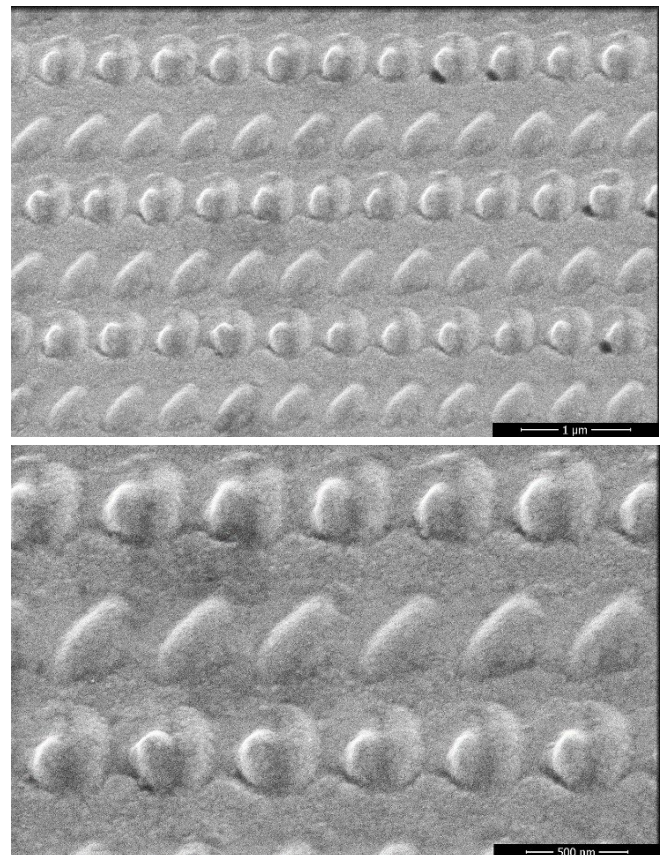
Nors tokios struktūros dažniausiai formuojamos pasitelkiant fotolitografiją [4], tokie metodai yra brangūs, nelankstūs ir sunkiai pritaikomi stambesnio masto gamyboje. Tiesioginis lazerinis rašymas yra patraukli ir pigesnė alternatyva, leidžianti lengvai pakeisti formuojamų darinių bei gardelių parametrus. Sufokusuotu lazerio impulsu suformuojamų darinių morfologija bei savybės priklauso nuo naudojamos impulso energijos [5]. Tyrimo metu buvo suformuojamos nanodarinių matricos (1 pav.), veikiančios kaip vienmatės gardelės, bei tiriamos aukse sužadintame paviršinio gardelės rezonanso savybės. Nustatyta jo priklausomybė nuo į bandinį krentančios šviesos poliarizacijos bei kampo. Gaunama rezonansą galima teoriškai apskaičiuoti pagal gardelės formules [5]:

$$\lambda_{res} = \frac{d}{m} \left(\pm \sqrt{\frac{\epsilon_{Au}}{1+\epsilon_{Au}} - \sin^2 \theta} \right) \quad (1)$$

$$\lambda_{res} = -\frac{d}{m} \left(\sin \theta \mp \sqrt{\frac{\epsilon_{Au}}{1+\epsilon_{Au}}} \right) \quad (2)$$

čia d - gardelės periodas, m - difrakcijos eilė, θ - krintančios šviesos kampas, ϵ_{Au} - aukso dielektrinė konstanta. (1) formulė naudojama, kai į bandinį krenta s - poliarizacijos šviesa, (2) - kai krenta p - poliarizacijos šviesa.

Dariniai buvo formuojami 343 nm bangos ilgio šviesa, PGR savybės buvo tiriamos spektrofotometru, o morfologija - skenuojančiu elektroniniu mikroskopu.



1 pav. Nanodarinių nuotrauka, padaryta skenuojančiu elektroniniu mikroskopu.

Literatūra

1. P. Yu, Y. Yao, J. Wu, X. Niu, A. L. Rogach, and Z. Wang, Sci. Rep., **7**, 7696 (2017).
2. Q. Duan, Y. Liu, S. Chang, H. Chen, and J. Chen, Sensors, **21**, 5262 (2021).
3. J. Langer et al., ACS Nano, **14**, 28-117 (2019).
4. X. Luo and T. Ishihara, Opt. Express, vol. **12**, 3055-3065 (2004).
5. E. Stankevičius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, and Z. Balevičius, Adv. Opt. Mater., **9**, 2100027 (2021).

GRAFENO KVANTINIŲ TAŠKŲ IR DOKSORUBICINO AGREGATŲ STABILUMAS, ĮVERTINTAS OPTINIAIS METODAIS

Martynas Zalieckas^{1,2}, Renata Karpič²

¹Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fundamentinių mokslų fakultetas, Saulėtekio al. 11 LT-10223 Vilnius, martynas.zalieckas@stud.vilniustech.lt

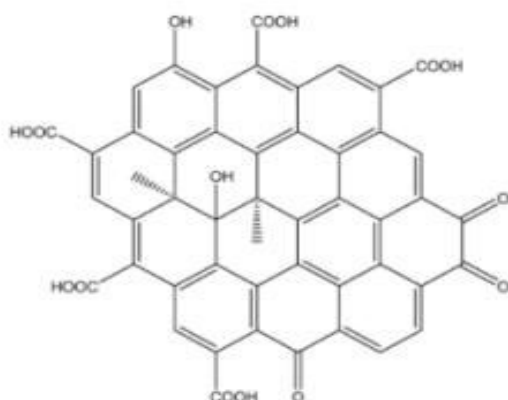
²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: renata.karpicz@ftmc.lt

Doksorubicinas (DOX) yra antraciklinų klasės antibiotikas, plačiai naudojamas vėžio chemoterapijoje. Šis vaistas sėkmingai slopina vėžinių ląstelių dauginimąsi, tačiau jo veiksmingumą riboja nepakankamas įsiskverbimas į audinius ir didelis toksiškumas. Šią problemą bandoma spręsti kuriant ir nanotechnologijų pagalba tobulinti įvairius nešiklius, kurie padeda vaistui efektyviai pasiekti vėžines ląsteles, sukelti kuo mažiau šalutinių poveikių.

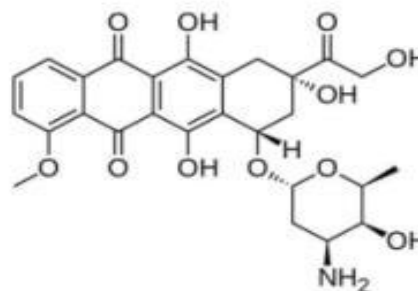
fluorescencijos spektrui, aplinkos pH reikšmingos įtakos neturi. Grynų GQD ir DOX fluorescencijos gesinimo kinetikos priklausomai nuo pH nesikeičia.

GQDs/DOX komplekso stabilumas buvo įvertintas optinės spektroskopijos metodais, esant skirtingiems tiriamų medžiagų santykiams (1:1, 1:2 ir 2:1) per 10 dienų laikotarpį. Atsižvelgiant į tai, kad GQD ir DOX absorbcijos ir fluorescencijos spektrai persidengia, DOX kvantinė išėiga yra eilės

A



B



1 pav. Grafeno kvantinių taškų (A) ir doksorubicino (B) cheminė struktūra.

GQD yra grafeno nanodalelės, pasižyminčios unikalėmis savybėmis, tokiomis kaip itin mažas toksiškumas, cheminis stabilumas, biologinis suderinamumas ir puiki fotoluminescencija [1-3]. Taip pat dėl itin mažo dydžio, lengvai prasiskverbia pro biologines membranas. Dėl šių savybių GQD turi didelį potencialą biomedicinoje, pvz., biojutiklių kūrime, biovaizdinime, o svarbiausia, jie yra geri vaistų nanonešėjai. GQD savybės, ypač sąveika su doksorubicinu, vis dar yra tiriamos.

tvarka mažesnė ir tai, kad sunku išlaikyti lygiai tokią pačią medžiagų koncentraciją tirpaluose esant skirtingam aplinkos pH, absorbcijos ir fluorescencijos spektrų intensyvumas nėra tinkamas parametras komplekso stabilumui įvertinti. GQDs/DOX komplekso stabilumą galima įvertinti pagal fluorescencijos gesinimo kinetiką. Matavimo laikotarpiu nustatyta, kad visi tirti kompleksai išlieka stabilūs, nepastebėta jų degradacija. laikui bėgant ir esant aukštesniam aplinkos pH.

Šiame darbe buvo tiriami žalia spalva fluorescuojantys GQD ir DOX molekulės bei šių junginių kompleksai bei analizuojamas GQDs/DOX kompleksų stabilumas stacionarios spektroskopijos metodais. Fluorescencijos spektrai ir relaksacijos trukmių kinetikos buvo matuoti naudojant fluorescencinį gyvavimo trukmės spektrometrą su pikosekundine laikine skyra.

PADĖKA

Finansinę paramą suteikė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-ST-23-202.

Literatūra

- [1] X. Wu et al. "Fabrication of highly fluorescent graphene quantum dots using L-glutamic acid for in vitro/in vivo imaging and sensing" *J. Mater. Chem. C. NIH Public Access*, 2013. Vol. 1, P. 4676-4684.
- [2] G. Rajender, P.K. Giri "Formation mechanism of graphene quantum dots and their edge state conversion probed by photoluminescence and Raman spectroscopy" *J. Mater. Chem. C*. 2016. Vol. 4, P. 10852-10865.
- [3] L. Golubewa et al. "Visualizing hypochlorous acid production by human neutrophils with fluorescent graphene quantum dots" *Nanotechnology*, 2022, Vol. 33, P. 095101.

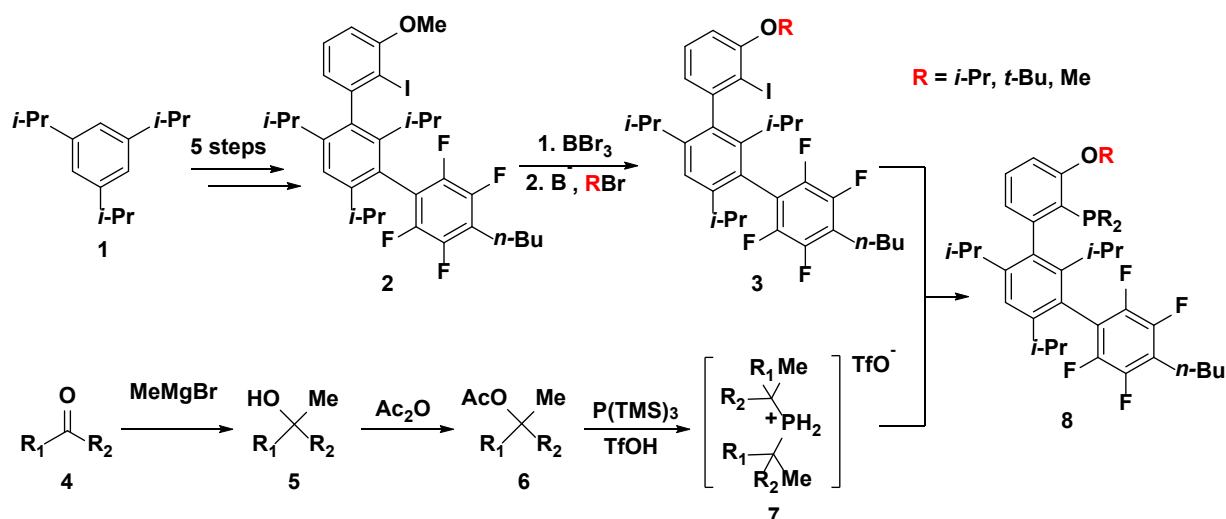
Grynojo DOX absorbcijos ir fluorescencijos spektrų forma nesikeičia esant aplinkos pH. Stebimas tik nedidelis fluorescencijos spektro intensyvumo pokytis, kurį galima priskirti nežymiam medžiagos koncentracijos pokyčiui. Tačiau, gryną GQD absorbcijos spektras kinta esant skirtingam aplinkos pH, t.y., esant žemesniam aplinkos pH, pastebimas sugerties juostos sumažėjimas ties 600 nm. Gryną GQD

SYNTHESIS AND COUPLING OF FUNCTIONALISED TERPHENYLS WITH AIR-STABLE DI-ALKYL PHOSPHINE SALTS

Jonas Paukštys^{1,2}, Kristupas Volbikas^{1,2}, Tomas Paškevičius¹,
Ringailė Lapinskaitė¹, Linas Labanauskas¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry
Akademijos st. 7 LT-08412 Vilnius

²Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences
Naugarduko st. 24, LT-03225 Vilnius, email: jonas.paukstys@gmc.stud.vu.lt, kristupas.volbikas@chgf.stud.vu.lt



Fluorinated aromatic substances are widely used in medicine¹ and agriculture². However, their synthesis remains complicated, with common methods being non-selective, done under harsh conditions and resulting in modest yields when more sensitive substrates are used. The application of transition-metal catalysis could help to solve these problems, although its application in C-F bond formation remained elusive until relatively recently, requiring more research to be done³. Thus, our team is developing new ligands, based on the structure of AlPhos⁴, for palladium (0/II) catalysed C-F cross-coupling reactions. We aim to expand the (hetero)aromatic substrate range by varying the electronic and steric properties of these phosphine ligands. Our work consists of two parallel studies:

- i) The synthesis and modification of the terphenyl backbone **2** and **3**.
- ii) The synthesis of di-*tert*-alkyl phosphine triflate salts **7**.

Our approach to the synthesis of the terphenyl backbone **2** makes use of a widely available starting material **1** and is done in 5 steps. For further modification deprotection of the methyl ether **2** was performed and procedures were developed for the introduction of new substituents. These substituents impact the steric and electronic properties of the ligand backbone, which, theoretically, should influence the efficiency and selectivity of the palladium catalyst in C-F cross-coupling reactions. These properties are further altered by using different di-*tert*-alkyl phosphines **7**. However, methods used in di-*tert*-alkyl

phosphine synthesis involve multiple steps and toxic, highly reactive reagents⁵. Our approach partially overcomes this by using a phosphine nucleophile, that is generated *in situ* by reacting tris(trimethylsilyl)phosphine with triflic acid, which then attacks a carbon electrophile generated from a tertiary acetate **6**. This umpolung (P⁻/C⁺) reaction offers a simpler approach, yielding easy to isolate, air-stable products that can be directly used in preparation of ligands. Palladium (0/II) catalysed C-P cross-coupling between the terphenyl backbone **3** and di(*tert*-alkyl) phosphine **7** will be performed to obtain the final ligands **8**. These ligands will then be tested in palladium catalysed fluorination reactions using a variety of substrates.

References

1. Inoue, M.; Sumii, Y.; Shibata, N. Contribution of Organofluorine Compounds to Pharmaceuticals. *ACS Omega* **2020**, *5* (19), 10633-10640.
2. Jeschke, P. The Unique Role of Fluorine in the Design of Active Ingredients for Modern Crop Protection. *ChemBioChem* **2004**, *5* (5), 570-589.
3. Hollingworth, C.; Gouverneur, V. Transition Metal Catalysis and Nucleophilic Fluorination. *Chemical Communications* **2012**, *48* (24), 2929.
4. Sather, A. C.; Hong Sik Lee; De, V. Y.; Yang, Y.; Müller, P. E.; Buchwald, S. L. A Fluorinated Ligand Enables Room-Temperature and Regioselective Pd-Catalyzed Fluorination of Aryl Triflates and Bromides. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137* (41), 13433-13438.
5. Thomas Barber, Stephen P. Argent, and Liam T. Ball Expanding Ligand Space: Preparation, Characterization, and Synthetic Applications of Air Stable, Odorless Di-*tert*-alkylphosphine Surrogates *ACS Catalysis* **2020**, *10* (10), 5454-5461

GROWTH AND OPTICAL PROPERTIES OF MULTIPLE GaAsBi QUANTUM WELLS WITH PARABOLIC AlGaAs BARRIERS

Monika Jokubauskaitė, Gustas Petrusevicius, Aivaras Špokas, Evelina Dudutienė, Bronislovas Čechavičius, Renata Butkutė

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

A semiconductor material GaAsBi has recently gained prominence in the field of optoelectronics due to its attractive properties. By introducing bismuth atoms in the lattice of GaAs the band gap of the compound could be significantly reduced. The band gap of GaAsBi itself exhibits smaller sensitivity to temperature. The engineering of the bandgap of bismides allows this compound to be applied as an active medium in the fabrication of optoelectronic devices designed to operate within the infrared (IR) spectrum, such as infrared light-emitting diodes [1], photodetectors [2], solar cells [3], etc. However, to fully implement these opportunities, it remains crucial to continue studying GaAsBi and the impact of the quantum structure design on optical properties. Thus, a lot of attention is given to growth conditions and technological details.

It was already shown by our group [4], that GaAsBi quantum wells (QWs) with parabolically graded AlGaAs barriers (PGBs) have demonstrated a photoluminescence (PL) intensity at room temperature that is 50 times stronger compared to traditional rectangular quantum wells. This notable outcome can be attributed to the improved trapping of carriers within the GaAsBi quantum wells and more remarkable impact of carrier localization. Significantly, this boost in PL intensity is consistently reproducible under growth conditions for parabolic quantum wells (PQWs).

In this work different designs of multiple quantum well structures with AlGaAs PGBs were grown by molecular beam epitaxy (MBE) and investigated: double AlGaAs parabolic quantum wells with a single rectangular GaAsBi QW (DPQW) and single parabolic AlGaAs quantum well with multiple (2 and 3) rectangular GaAsBi QWs inside (2inPQW and 3inPQW, respectively). To estimate optical properties photoluminescence measurements were carried out for DPQW, 2inPQW and 3inPQW quantum structures. Room temperature photoluminescence (RTPL) (shown in Fig. 1 a)) revealed higher intensity of DPQW structure compared to 2inPQW. Nevertheless, growing three GaAsBi QWs in one PQW (obtaining 3inPQW structure) significantly improves PL intensity. Moreover, temperature-dependent PL measurements showed more homogenous QWs in this design of QW structure. This can be expected since the growth time between GaAsBi QWs is

shorter. PL peak positions for all quantum well structures are graphed (Fig. 1 b)) as a function of temperature. It is evident that a distinctive red-blue-red shift pattern (S-shape) in the PL peak positions occurs in the structures under investigation. This shift in peak positions can be attributed to the distribution of carriers among localized states at varying temperatures with structure DPQW exhibiting the strongest effect, which is likely responsible for higher PL intensity at room temperature for this structure.

This work is supported by Research Council of Lithuania under the grant No. S-ST-23-199.

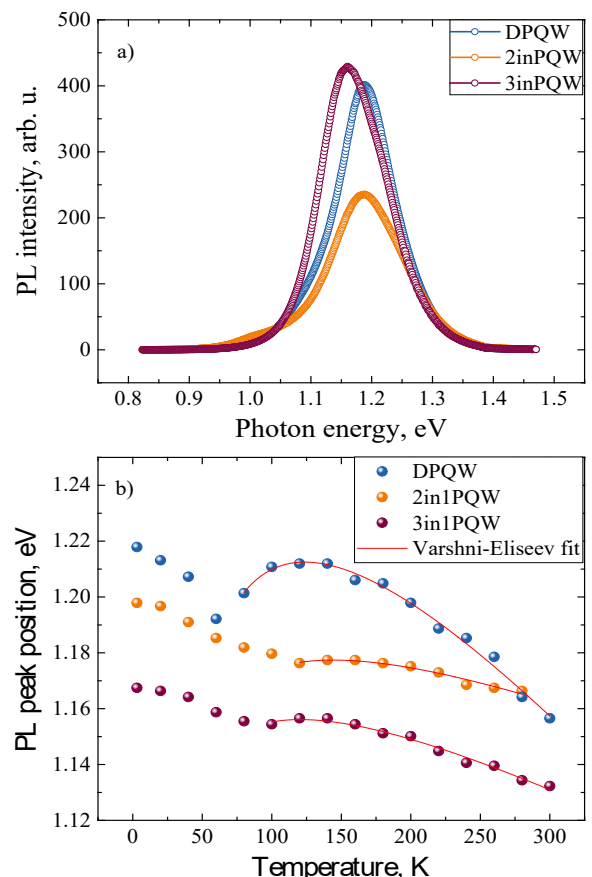


Fig. 1 a) PL spectra of multiple GaAsBi QWs with AlGaAs PGBs measured at room temperature. b) Temperature dependence of the PL peak energy.

References

1. P.K. Patil *et al.*, *Nanotechnology* **28**, 105702 (2017).
2. C. J. Hunter *et al.*, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **24**, 2191-2194 (2012).
3. R. N. Kini *et al.*, *J. Appl. Phys.* **106**, 043705 (2009).
4. S. Pūkiienė *et al.*, *Nanotechnology* **30**, (2019).

HIGH SYSTEM KINETICS OF PHOTOELECTROCHEMICAL (PEC) WATER SPLITTING USING PLASMONIC NANOCOMPOSITES OF BiVO₄

Muhammad Haris^{1,2}, Syeda Ammara Shabbir², Rabia Ajmal², Hamid Latif²,
Kaiser Abbas³, Haseeb Qadir⁴, Faizan Abaid⁴

¹Kaunas University of Technology, Faculty of Mathematics and Natural Sciences,
Studentų str. 50, LT-51368 Kaunas, email: muhhar@ktu.lt

²Forman Christian College, University(ACharteredUniversity), Faculty of Physics
Lahore 54600,Pakistan.

³ GC University ·The Centre for Advanced Studies in Physics,
Lahore, Punjab 54000, Pakistan.

⁵LMDC, Faculty of Radiology, Lahore 53400, Pakistan

Carbon-free fuel or green hydrogen production by photoelectrochemical water splitting is a promising way to replace the usage of fossil fuels on a large scale. However, green hydrogen is not cost-friendly in comparison with fossil fuels due to the average energy efficiency[1-2]. In this project, photoanodes based on nanocomposites of monoclinic BiVO₄ by incorporating the nanoparticles of plasmonic metals (Au & Ag), reduced graphene Oxide (RGO), and carbon nanotubes (CNT) were fabricated for photoelectrochemical water splitting. Four different photoanodes were prepared by using drop-casting and electrochemical deposition techniques. Scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), and Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) analysis confirmed the surface morphology, structural details, and concentration of carbon nanotubes, graphene sheet, and BiVO₄, Au, and Ag nanoparticles in photoanodes. Ultraviolet-Visible spectroscopy revealed the increasing trend in absorption edge, for RGO/CNT/BiVO₄, RGO/CNT/Ag/BiVO₄, RGO/CNT/Au/BiVO₄, and RGO/CNT/Ag/Au/BiVO₄, photoanodes respectively. The photoelectrochemical (PEC) catalytic response of these fabricated photoanodes was determined through linear sweep voltammetry (LSV) during oxygen evolution reaction (OER) and hydrogen evolution reaction (HER). The incorporation of reduced graphene oxide and carbon nanotubes revealed an increasing trend in current density through fast transportation of electrons.

RGO/CNT/Ag/Au/BiVO₄ photoanode exhibited high system kinetics with the lowest over-potential of 200 mV with the great ABPE% of 6.62%.

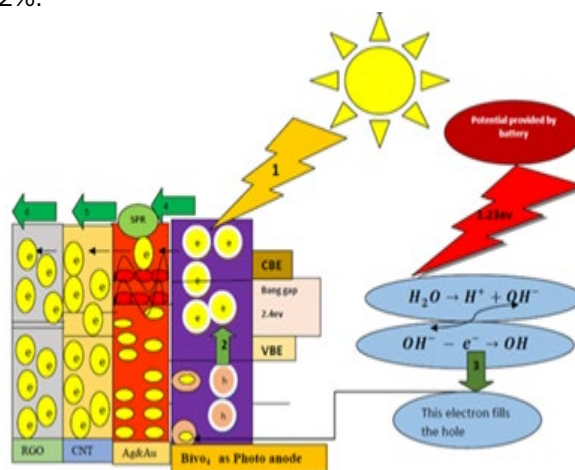


Fig. 1. Working principle of Photoelectrochemical water splitting.

Key words: photoelectrochemical, water splitting; hydrogen evolution reaction, oxygen evolution reaction.

References

1. Marschall, R.. 50 years of materials research for photocatalytic water splitting. European Journal of Inorganic Chemistry (2021).
2. Thakur, A., Ghosh, D., Devi, P., Kim, K. H., & Kumar, P. Current progress and challenges in photoelectrode materials for the production of hydrogen. Chemical Engineering Journal(2020).

LAZERINIS TEKSTŪRAVIMAS PAVIRŠIAUS VILGUMO SAVYBĖMS KEISTI

Saulė Steponavičiūtė, Andrius Žemaitis, Paulius Gečys, Mindaugas Gedvilas

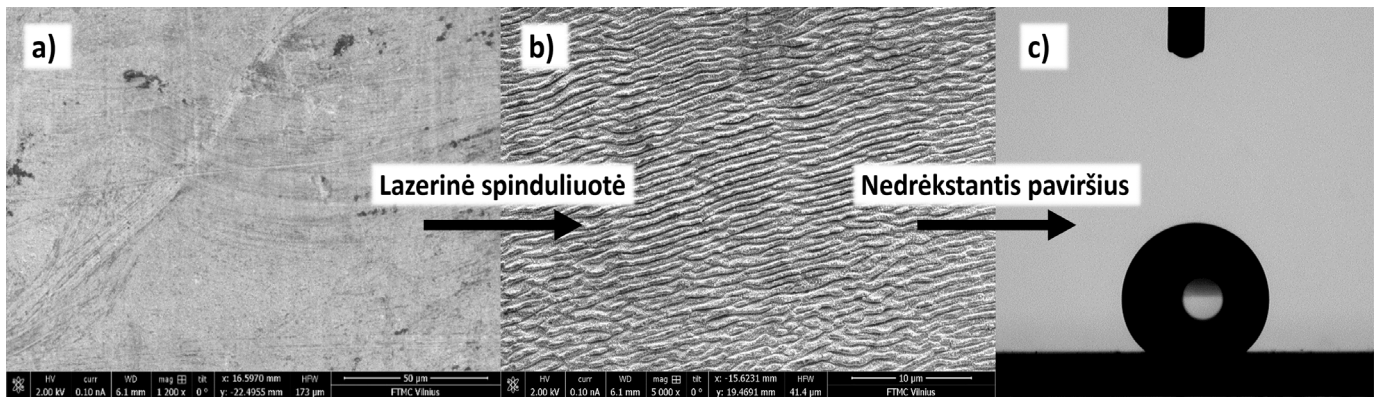
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300, Vilnius, el. p.: saule.steponaviciute@ftmc.lt

Lazerinis tekstūravimas yra patraukli technologija įvairių medžiagų paviršiams modifikuoti, kadangi yra papildomų priemonių ar etapų nereikalaujantis procesas. Lazerinio apdirbimo galimybės lemia trumpų bei ultratrumpų impulsų lazerių taikymą funkciniais paviršiams, pasižymintiems specifinėmis naudingomis savybėmis, kurti [1]. Šiuos tyrimus įkvepia gamtoje randami organizmai, tokie kaip lotosas, kurio lapai superhidrofobiški ir pasižymi savaiminio nusivalymo efektu, bei Namibo dykumos vabalai, kurių skirtingo vilgumo regionais padengtas kiautas leidžia jiems surinkti vandenį iš rūko. Paviršiai su modifikuotomis vilgumo savybėmis – tiek hidrofobiniai, tiek hidrofiliniai – gali būti pritaikomi daugybėje sričių, tad daug dėmesio sulaukia tiek jų gamybos, tiek charakterizavimo būdai, tyrinėjamos ir kitos jiems būdingos savybės [2].

Šiame darbe buvo tiriama nerūdijančio plieno bei vario paviršių vilgumo savybių kitimas, juos tekstūruojant nano- ir pikosekundiniu lazeriais. Vilgumas buvo charakterizuojamas statinio kontaktinio kampo matavimais, o paviršiuje lazeriu suformuoti dariniai užfiksuoti skenuojančiu elektroniniu mikroskopu. Abiejų metalų atveju originaliai hidrofiličius paviršius pavyko paversti superhidrofobiniais. Eksperimento eigoje buvo stebimas hidrofiličių savybių stiprėjimas laikui bėgant.

Literatūra

1. E. Stratakis, J. Bonse, J. Heitz, J. Siegel, G. D. Tsibidis, E. Skoulas, A. Papadopoulos, A. Mimidis, A.-C. Joel, P. Comanns, J. Krüger, C. Florian, Y. Fuentes-Edfuf, J. Solis, and W. Baumgartner, *Mat. Sci. Eng. R.* **141**, 100562 (2020).
2. D. Ahmad, I. van den Boogaert, J. Miller, R. Presswell, H. Jouhara, *Energ. Source Part A* **40**(22), 2686–2725 (2018).



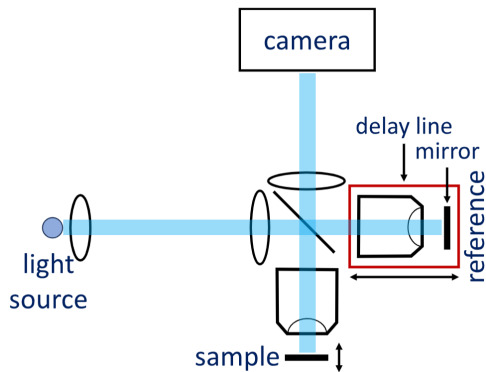
1 pav. (a) Nerūdijančio plieno pradinis paviršius, (b) dėl lazerinės spinduliūtės poveikio susiformavę periodiniai paviršiaus nanodariniai, (c) ant lazeriu tekstūruoto, superhidrofobinio paviršiaus užlašintas 3 μ l vandens lašas, kontaktinis kampas 147°.

PILNOJO LAUKO OPTINĖ KOHERENTINĖ MIKROSKOPIJA SU SKAITMENINE ABERACIJŲ KOREKCIJA

Austėja Trečiokaite, Karolis Adomavičius ir Egidijus Aukorius

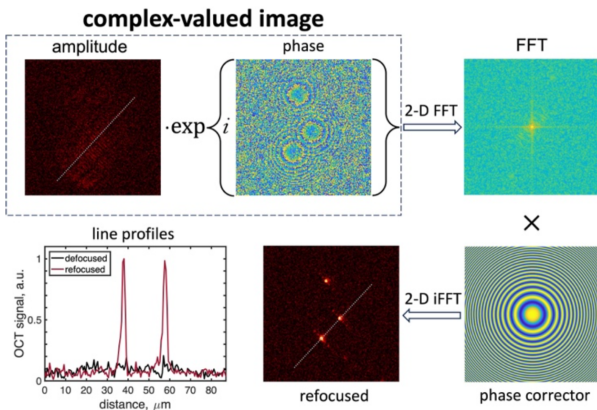
Fizinių ir technologijos mokslų centras, optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: austeja.treciokaite@ftmc.lt

Pilnojo lauko optinė koherentinė tomografija (OKT) yra interferometrinis metodas, leidžiantis registruoti didelės raiškos OKT vaizdus XY plokštumose giliai biologiniuose bandiniuose. Tam pasiekti dažnai naudojamas mažo erdvinio koherentiškumo plataus spektro šviesos šaltinis - LED šviestukas, interferometras ir kamera (1 pav.). Tačiau, optinės aberacijos bei fokuso ir koherentinės plokštumų išsiderinimas gali stipriai iškreipti gaunamą vaizdą ir riboti efektyvaus vaizdinimo gylį [1, 2].



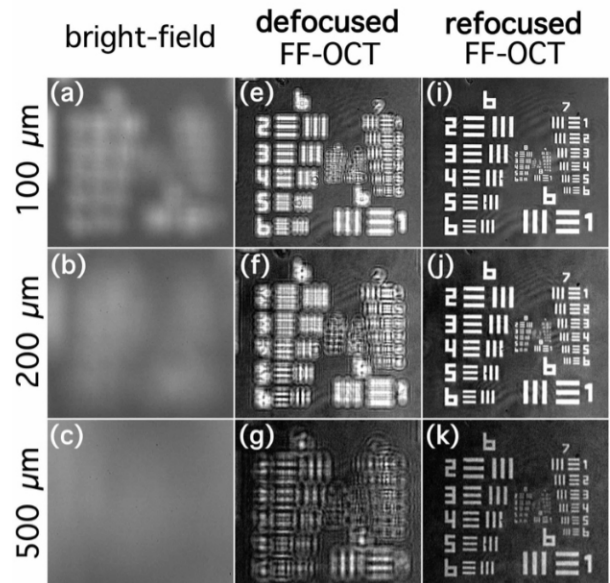
1 pav. Principinė OKT sistemos schema.

Interferometrui naudoti du vienodi, x10 vandens imersiniai mikroskopo objektyvai ($NA=0,3$). Bandinio ir atraminės atšakos kontrolei buvo naudojami 3D pozicionavimo staliukai. Skaitmeninė aberacijų korekcija įgyvendinama naudojant kompleksinį OKT vaizdą ir kvadratinę fazės funkciją.



2 pav. Defokuso skaitmeninės korekcijos algoritmas. Užregistruotas defokusuotas FeO nanodalelių, suspenduotų poliuretane, OKT kompleksinis vaizdas yra Furje transformuojamas ir padauginamas iš kvadratinės funkcijos. Atlikus atvirkštinę Furje transformaciją gaunamas refokusuotas dalelių vaizdas.

Kaip parodyta 2 pav., kompleksiniam OKT vaizdai visu pirma yra atliekama Furje transformacija. Gautas rezultatas dauginamas iš fazės funkcijos (fazės korekcijos) ir tuomet, atlikus atvirkštinę Furje transformaciją gaunamas refokusuotas vaizdas, kai kvadratinės funkcijos amplitudė pasirinkta teisingai. Pav. 3 parodyta skaitmeninė defokuso korekcija ant USAF taikinio (*angl. United States Air Force target*), kurio mažiausias elementas yra 137 nm dydžio. Taikinyus buvo mechaniškai defokusuotas 100 μm , 200 μm ir 500 μm . Taip pat buvo pastumta ir atraminė atšaka per tokį patį atstumą, kad išlaikyti tokį pat optinį kelią bandinio ir atraminėje atšakoje. Skaitmeninės defokuso korekcijos būdu USAF taikys buvo refokusuotas net ir prie 500 μm defokuso.



3 pav. Defokusuoti USAF taikinio OKT vaizdai ir jų skaitmeninė defokuso korekcija.

Iš gautų rezultatų pastebime, jog OKT vaizdai ir taip mažiau jautrūs defokusui, tačiau pasitelkus skaitmeninę aberacijų korekciją atkurama kur kas daugiau informacijos. Apibendrinant - pademonstruota skaitmeninė aberacijų korekcija pilnojo lauko optinės koherentinės mikroskopijos sistemoje pasitelkiant fazinę informaciją.

Literatūra

1. P. Xiao, M. Fink, and A. C. Boccara, Opt. Lett. 41, 3920-3923 (2016).
2. V. Barolle, J. Scholler, P. Mecê, J.-M. Chassot, K. Groux, M. Fink, A. C. Boccara, and A. Aubry, Opt. Express 29, 22044-22065 (2021).

PRECISE CONTROL OF EMISSION WAVELENGTH IN GaAsBi MQW STRUCTURES DURING MBE GROWTH

Aivaras Špokas¹, Andrea Zelioli¹, Gustas Petrusevičius¹, Mikas Paulius Iršėnas², Augustas Vaitkevičius^{1,2}, Sandra Stanionytė¹, Aurimas Čerškus¹, Bronislovas Čechavičius¹, Evelina Dudutienė¹, Renata Butkutė¹

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

²Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University,
Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania email: aivaras.spokas@ftmc.lt

Near infrared (NIR) range is widely used in a variety of everyday applications, such as telecommunications, environmental and biological sensing. Although, the sensors working in this wavelength range are already well developed, there is still a need for more efficient and stable laser operation. GaAsBi emerges as a good candidate for use as the active media in NIR light emitting devices. Currently, indium-based semiconductor structures are generally used for fabrication of NIR lasers, nevertheless bismides show a number of possible advantages over their counterparts:

(1) good temperature stability, and operation in room temperature, mitigates the need for cooling in low power laser diode applications [1]; (2) rapid band gap reduction of up to 90 meV per 1% of Bi enables reaching longer wavelengths without introducing large concentrations of large diameter atoms into the lattice, resulting in better strain management; (3) suppression of non-radiative Auger recombination due to the spin-orbital splitting energy becoming larger than the energy bandgap at ~11% of Bi concentration, could make the final devices more efficient [2].

Production of highly selective sensing systems requires laser devices operating at a particular wavelength corresponding to absorption of certain molecules, for example the 940nm emission necessary for blood oxygen sensing is achievable with just 2.4% of Bi content in a 5.5 nm rectangular quantum well (RQW), while sensors for environmental pollutants such as: CO₂, CO, CH₄, operate in the range from 1000 - 1200 nm, corresponding to 4-9% of Bi in an RQW.

This work focuses on enhancing the precision of the emission wavelength control during molecular beam epitaxy growth of semiconductor light emitting devices. Structures presented were grown using a solid-state Veeco GENxplor R&D MBE system equipped with high purity metallic sources. Such system enables low temperature growth (400°C and less), and precise control of As flux required to reach an As/Ga beam equivalent pressure ratio (BEPR) close to stoichiometry. These are the two crucial conditions that must be achieved to enable Bi introduction into the GaAs lattice.

Two main parameters responsible for the emission wavelength are the thickness of the QW and Bi content. In this work the QW thickness was set to be constant at 5.5 nm in aims to investigate how

different growth conditions, namely: As/Ga BEPR, Bi flux, and substrate temperature influence the changes in emission wavelength related to Bi content in the QW. During the investigation change in Bi flux did not show a significant influence on the PL spectrum, hinting at a temperature limited growth regime. Consequently, attention was focused to the influence of substrate temperature. Band-edge thermometry was used to monitor substrate temperatures during bismide growth. Temperatures in the range from 320°C to 400°C were selected, with an obvious trend of higher emission wavelengths observed for samples grown in lower temperatures. Additionally, variation in As/Ga BEPR also resulted in a change of emission energy, although this dependence was way less sensitive than the substrate temperature. Finally, the influence of the structures capping layer was investigated in terms of its growth temperature.

Room temperature photoluminescence (PL) measurements were performed for all grown samples to evaluate the shifts in emission energy and change in intensity, which can be related to Bi content. Additionally X-ray diffraction was performed to confirm the Bi concentration estimations from PL and provide information on the QW thicknesses. Finally, PL intensity mappings were made, to investigate the homogeneity of grown samples, and roughly evaluate the presence of lattice mismatch dislocations.

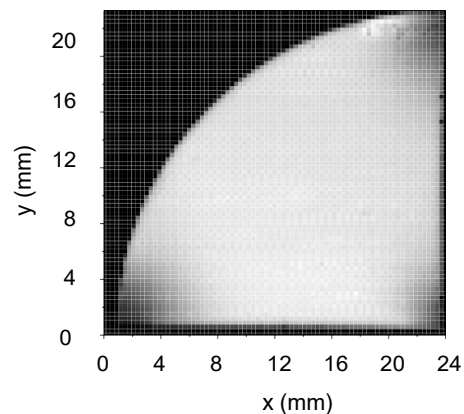


Fig. 1. PL intensity mapping of GaAsBi 5xRQW test structure

References

1. P. Ludewig, N. Knaub, N. Hossain, S. Reinhard, L. Nattermann, P. Marko, S.R. Jin, K. Hild, S. Chatterjee, W. Stolz, S. J. Sweeney, K. Volz, Appl. Phys. Lett. 17 June 2013; 102 (24): 242115.
2. K. Alberi, O.D. Dubon, W. Walukiewicz, K.M. Yu, K. Bertulis, A. Krotkus. Appl. Phys. Lett. 91(5):89-92, (2007).

INVESTIGATION OF OPTICAL PROPERTIES OF GaAsBi MQW NIR LED GROWN ON AIAs SACRIFICIAL LAYER

Gustas Petrusevičius¹, Aivaras Špokas¹, Andrea Zelioli¹, Evelina Dudutienė¹, Augustas Vaitkevičius^{1,2}, Bronislovas Čechavičius¹, Andrius Bičiūnas¹, Sandra Stanionytė¹, Renata Butkutė^{1,2}

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

²Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius
gustas.petrusevicius@ftmc.lt

A classical and well-known material, gallium arsenide (GaAs), is used to manufacture various optical devices such as light emitting diodes (LEDs), laser diodes (LDs) operating in the IR spectral range. The performance of optoelectronic devices can be improved via incorporation of bismuth (Bi)^{1,2}. The unique gallium arsenide bismide (GaAsBi) features are much faster bandgap reduction, increased temperature stability of the bandgap, as well as suppressed Auger recombination for higher concentrations of Bi.

This work explores the growth procedure and the optical properties of GaAsBi/GaAs LED, emitting in the near infrared range (NIR), containing multiple quantum wells (MQW) and a sacrificial aluminum arsenide (AIAs) layer for integration on silicon platform. The sacrificial AIAs layer is intended to be removed via wet etching, which allows the LED structure to be integrated on Si substrate.

GaAsBi/GaAs MQW LED was grown using molecular beam epitaxy (MBE) technology. MBE is a well-known method to grow structures, based on GaAs. The growth of high-temperature (HT) layers was performed at 665 °C, while the low-temperature (LT) layers were grown at 435 °C. Firstly, 500 nm of AIAs sacrificial layer was grown

on n-GaAs:Si substrate. Such AIAs thickness creates enough surface area for wet etchant to efficiently react. The n-GaAs:Si layer (n-type region) was grown at 665 °C, reaching Si concentration of about $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. 5 GaAsBi QWs were grown at 435 °C with LT-GaAs spacer on top. Low temperature was selected to avoid Bi redistribution in the quantum wells. Lastly, the p-GaAs:Be (p-type region) was grown on top by doping with a Be concentration of $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ at 550 °C. The entire growth procedure was optimized to obtain an LED structure emitting at 1.1 μm wavelength.

The LED structure was characterized via x-ray diffraction (XRD), atomic force microscopy (AFM), and electroluminescence measurements (EL) both at room temperature (300K) and at 80K. To carry out the electroluminescence measurements, the structure was wet etched in order to expose its' n-type region and allow for application of indium (In) contacts. The room temperature electroluminescence results, demonstrating the central spectral wavelength at 1.15 eV (corresponds to 1078 nm), are depicted in Figure 1. The LED was cooled down to 80K via liquid nitrogen. Its' measured electroluminescence is visible in Figure 2.

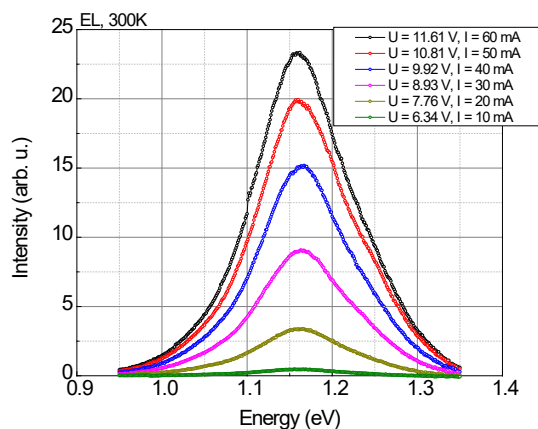


Figure 1. EL spectrum of GaAsBi/GaAs MQW LED measured at room temperature, with different excitation voltages and currents.

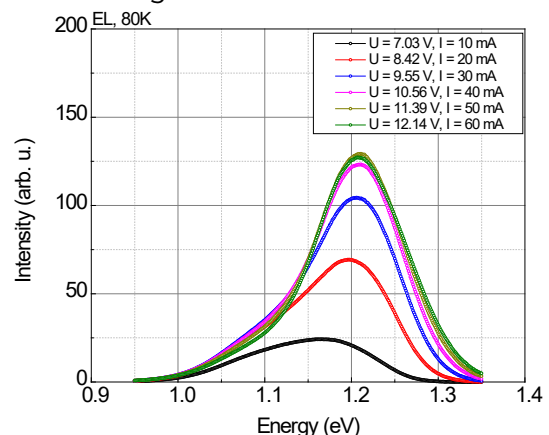


Figure 2. EL spectrum of GaAsBi/GaAs MQW LED measured at 80K, with different excitation voltages and currents.

References

1. R. D. Richards, C. J. Hunter, F. Bastiman, A. R. Mohmad, and J. P. R. David, "Telecommunication wavelength GaAsBi light emitting diodes," *IET Optoelectron.*, 2016, doi: 10.1049/iet-opt.2015.0051.
2. P. K. Patil et al., "GaAsBi/GaAs multi-quantum well LED grown by molecular beam epitaxy using a two-substrate-temperature technique," *Nanotechnology*, 2017, doi: 10.1088/1361-6528/aa596c.

MXene-BASED COLORIMETRIC SENSOR FOR THE DETECTION OF SILVER IONS

Julija Pronckutė, Martynas Marozas, Martynas Talaikis,
Gediminas Niaura, Simonas Ramanavičius

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: julija.pronckute@chgf.stud.vu.lt

Silver ions found in drinking and surface water significantly threaten the health and well-being of humans and other species. The Environmental Protection Agency (EPA) suggests that the silver ion concentration in drinking water should not exceed 1.142 mg/L for short-term exposure [1]. Potential techniques for silver and other metals ions detection include but are not limited to - atomic absorption/emission spectrometry (AAS/AES), inductively coupled plasma-mass spectrometry (ICP-MS), fluorometry, electrochemical methods, and colorimetry. Among all these methods, colorimetry is the most user-friendly, does not require sophisticated equipment, and is easily employable for real sample analysis on the spot. Moreover, the smartphone can work as a device to detect analytes accurately, helping colorimetric sensors spread widely [2].

MXenes, which are recently found 2D materials, might be one of inexpensive, simple, effective and selective methods for detecting metal ions in water samples. MXenes are a broad family of 2D materials described by the general formula $M_{n+1}X_nT_x$, where M stands for transition metal (Ti, V, Cr, etc.), X represents carbon or nitrogen, and T_x represents the surface terminations, such as O, OH, F, and/or Cl, which are bonded to the outer M layers. Major applications of MXenes are energy storage and conversion, environment and catalysis, separation membranes, medicine, optics, and electronics. MXenes have unique properties, making them great for applications mentioned above and for our research. Some of these unique properties include functionalized surfaces that make MXenes hydrophilic and ready to bond to various species; high negative zeta potential, enabling stable colloidal solutions in water. In addition, it is essential to note that MXenes have a large surface area, making them excellent adsorbents for various molecules and ions [4].

This research aims to test $Ti_3C_2T_x$ MXenes as 2D nanomaterials suitable for detecting metal ions in aqueous solutions. Silver ions were chosen as a model ion, which is also an important analyte in drinking water. Silver ions are adsorbed onto MXene surface, which creates visually noticeable change in color and spectra (Fig.1). MXenes in this study were synthesized by the MILD etching method, as it is the primary method to collect high surface area 2D nanostructures. As MXenes possess the ability to adsorb ions, experiments

were done in buffer solutions, trying to have as stationary conditions as possible. The main part of the experiments was done in citrate buffer. Experiments were done in a broad pH range from 3 to 8, and the changes of UV-Vis absorbance were registered with a spectrophotometer at 403-440 nm wavelength, depending on pH value. From these measurement data, the limit of detection and linear silver ions detection range was determined.

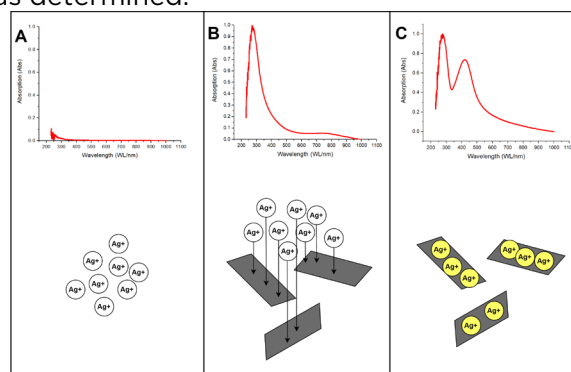


Fig. 1. Principal scheme of Ag^+ ions detection by MXenes. UV-Vis Spectra of: A – silver ions, B – Ti_3C_2 MXenes, and C – MXene-Ag composite.

In conclusion, it was determined that Ti_3C_2 MXenes possess strong reductive properties and can be employed in designing colorimetric sensors for metal ions detection in aqueous solutions. Experiments show that MXenes concentration and pH are the main factors affecting the performance of sensors. The calculated limit of detection and linear silver ions detection range is from 3 to 150 $\mu\text{mol/L}$, promising for further development of MXene-based colorimetric metal ions sensors.

Acknowledgments: This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No PD-22-155.

References

- 1 Integrated Risk Information System (IRIS) Chemical Assessment Summary NCFEA, US Environmental Protection Agency; Silver: CASRN 7440-22-4. Last revised December 1, 1991. https://cfpub.epa.gov/ncea/iris/iris_documents/documents/subst/0099_summary.pdf.
- 2 Y. Wang, S. Wang, N. Dong, W. Kang, K. Li, and Z. Nie, *Analytical Chemistry* 2020 92 (6), 4623-4629. <https://doi.org/10.1021>
- 3 S. Ramanavicius, A. Ramanavicius, *IJMS* 2020 21 (23), 9224. <https://doi.org/10.3390/ijms21239224>
- 4 Y. Gogotsi, B. Anasori, The Rise of MXenes. *ACS Nano* 2019;13:84914. <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b06394>

TITANIUM SUBOXIDES APPLICATION AS A PHOTOCATALYST FOR THE DECOMPOSITION OF RHODAMINE B DYE UNDER VISIBLE LIGHT IRRADIATION

Martynas Marozas¹, Milda Petrulevičienė², Arnas Naujokaitis³, Arūnas Jagminas¹, Simonas Ramanavičius¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Electrochemical Material Science, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: martynas.marozas@chgf.stud.vu.lt

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

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

Increasing water pollution all over the world, mainly due to rapid industrialization, is becoming an increasingly significant and challenging problem to solve. One of the frequently encountered types of pollutants is organic dyes, which are widely used in textile, paper, publishing, and many other industries. These pollutants are characterized by high diffusion, due to which they spread particularly widely, have a stable structure, and are highly toxic. Organic dyes reduce water's permeability to light, harming aquatic ecosystems, destroying the aquatic environment's biological activity, and threatening the safety of drinking water and human health [1]. One of the promising methods for water purification is the photocatalytic decomposition of organic pollutants using sunlight (Fig. 1.). To make this process efficient, the main challenge is finding materials cheaply preparable on a large scale and the material's ability to absorb visible light and produce various radicals responsible for the decomposition of various organic compounds [2]. Black titania is a term describing titanium suboxide (TiO_x) phases, which are primarily attractive due to their optical properties [3]. Titanium suboxides, especially TiO and Ti_2O_3 phases, possess the ability to efficiently absorb visible light. Moreover, the preparation of this titanium suboxide powder is a scalable process. There are several methods for large-scale synthesis, but the most common is the reduction of TiO_2 in a hydrogen atmosphere or the annealing of amorphous TiO_2 in a vacuum. This kind of pretreatment leads to the formation of defects in the structure, which are favorable for light-initiated radical formation. Such a process can be exploited for the wastewater treatment and degradation of organic pollutants. There are several studies overviewing the photocatalytic effects of black titania, and in some cases, the efficiency is high enough for application in a real-life sample. However, the main challenge is these photocatalysts' cheap and large-scale production and the enhancement of their active surface area [4].

This research's main aim is to show that commercially available and easily preparable in a large scale

TiO and Ti_2O_3 microsize powder can find application as a photocatalyst for visible light-initiated photocatalytic degradation of organic dyes such as Rhodamine B. The experiments were performed by dispersing TiO and Ti_2O_3 powders in the aqueous medium with organic dye and illuminating with a visible light Xenon lamp. After photocatalysis experiments, the absorbance spectra of samples before and after illumination were recorded by UV-Vis spectrophotometer. Together with photodegradation, the adsorption on particles was evaluated to have precise results of how much of the dye was decomposed. Moreover, the photocatalytic decomposition was improved by ultrasonic bath pretreatment of powders.

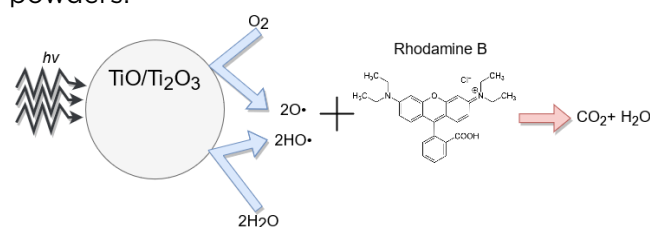


Fig. 1. Principal scheme of $\text{TiO}/\text{Ti}_2\text{O}_3$ application in photocatalytic decomposition of Rhodamine B dye.

In this research, TiO and Ti_2O_3 powders were tested as materials suitable for photocatalytic wastewater treatment. Large-scale production powders showed promising results for developing TiO and Ti_2O_3 photocatalysts. The main issue related to these powders is low active surface area, partially solved by pretreatment in the ultrasonic bath.

References

1. A. Thirunavukkarasu et. al. *Rev Environ Sci Biotechnol* 2020, 19, 751-778. <https://doi.org/10.1007/s11157-020-09548-8>
2. R. Daghrir, P. Drogui, D. Robert, *Ind. Eng. Chem. Res.* 2013 52 10, 3581-3599. <https://doi.org/10.1021/ie303468t>
3. M. Ivanovskaya, K. Chernyakova, E. Ovodok, S. Poznyak, D. Kotsikau, I. Azarko, *Materials Chemistry and Physics* 2022 278, 125703. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2022.125703>
4. A. Jagminas, S. Ramanavicius, V. Jasulaitiene, M. Simenas, *RSC Advance* 2019 9 40727-40735. <https://doi.org/10.1039/C9RA08463K>

COST-EFFECTIVE PRODUCTION AND EXAMINATION OF PARAFFIN LENSES DESIGNED FOR THz RADIATION

Kasparas Stanaitis^{1,2} Matas Bernatoniš^{1,2}, Karolis Redeckas^{1,2}, Linas Minkevičius^{1,2}

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

² Vilnius University, Faculty of Physics
Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius

The promising field of terahertz radiation research offers exciting opportunities for visualizing and analyzing a wide range of materials [1]. It comes as no surprise that this field demands a significant amount of pricy equipment. The solution to this problem could be a lot less complicated than anticipated. Paraffin lenses are a promising solution for improving the performance of THz imaging systems due to their low cost and ease of manufacturing [2].

The aim of this work was to manufacture three paraffin lenses for 0.1 THz frequency electromagnetic waves with focal lengths of 2 cm, 3 cm, and 4 cm. It was achieved by parametrizing the mentioned optical components using 3D FDTD (Finite-Difference Time-Domain) method and observing how the EM radiation propagates after reaching the lens. Obtained dimensional characteristics were used to print lens moulds using 3D extrusion printing method. The molds were subsequently filled with melted paraffin, which was then removed after it solidified.

Manufactured optical components were characterized and compared to theoretical simulations. The lenses behaved similarly as in simulations - terahertz radiation was successfully focused at around 2 cm, 3 cm and 4 cm distance from the lens (Fig. 1). Beam profiles were successfully evaluated and the obtained, FWHM (Full width at half maximum) ranged from 3.5 mm to 4.7 mm. Unfocused beam exhibited the same parameter of magnitude 28 mm, which allows to make a conclusion, that the THz radiation was compressed around 7 times. Finally, the lenses were successfully used to perform terahertz imaging on a credit card placed in an envelope. The edges of the card and certain metal components can be clearly distinguished.

To conclude, the outcomes of this research are highly satisfactory. The theoretical simulations closely match the practical measurement results.

Furthermore, at the focus distance, the beams exhibit uniform focusing capabilities. The lenses can be successfully used in terahertz imaging with the main advantage being cheap and simple manufacturing process. This research is on track to pave the path for cheap and easily accessible terahertz optics, that can be used for numerous everyday applications.

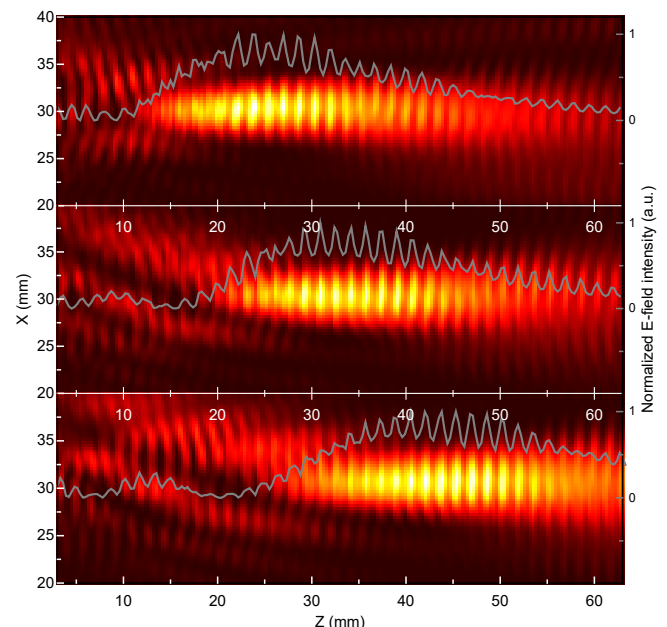


Figure 1. Experimental observations of E-field intensity of paraffin lenses along the optical axis. 2 cm, 3 cm, and 4 cm from top to bottom.

References

1. E. Castro-Camus, et al. Recent advances in terahertz imaging: 1999 to 2021. *Appl. Phys. B* 128(1) p. 12 (2022). <https://doi.org/10.1007/s00340-021-07732-4>
2. S. Agnieszka, et al. Paraffin Diffractive Lens for Subterahertz Range-Simple and Cost Efficient Solution. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology* 11(4) p. 396-401 (2021)