



FIZINIŲ IR
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ
CENTRAS

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRO

DOKTORANTŲ IR
JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ
KONFERENCIJA

2020 m. SPALIO 22 - 23 d.

TEZIŲ RINKINYS

10

TURINYS

1	Alina Leščinskaitė. Jaunos žvaigždžių populiacijos netaisyklingoje nykštukinėje galaktikoje Leo A.
2	Marius Čeponis. Nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždėdara.
3	Aidas Sadauskas. Paukščių Tako Fermi burbulų hidrodinaminiai modeliai.
4	Augustinas Povilas Fedaravičius. Sąveikaujančių neuronų tinklo sinchronizacija su minimaliu stimuliuojančiu krūviu.
5	Vincentas Mindaugas Mačiulis. Al_2O_3 ir ZnO nano struktūrų taikymas albuminų aptikimui optinės detekcijos būdu.
6	Vytautas Žutautas. Kopolimero sudaryto iš folio rūgšties ir riboflavino panaudojimas herbicido atrazino nustatymui.
7	Edvinas Navakauskas. Amiloidinių struktūrų, adsorbuotų ties modeliniais paviršiais, tyrimas suminio dažnio generacijos metodu.
8	Gintarė Plečkaitytė. Hidro(solvo)terminė $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ skirto Na-jonų baterijoms sintezė ir charakterizavimas.
9	Davit Tediashvili. Influence of pH buffering on anode performance in aqueous Na-ion batteries.
10	Raminta Stagniūnaitė. AuCeO_2/C - sintezė, charakterizavimas ir taikymas alkoholių oksidacijos ir deguonies redukcijos reakcijoms.
11	Maliha Parvin. Optimization of sol-gel synthesis of WO_3 films towards efficient photoelectrochemical performance.
12	Aliona Kirdeikienė. Elektrochemiškai suformuotų cerio oksido dangų apsauginių ir savaiminio užgijimo savybių tyrimai.
13	Agnė Zdaniauskienė. Savitvarkių monosluoksnių su imidazolo žiedo funkcine ir amido grupėmis grandinėje tyrimas SHINERS metodu.
14	Vaidas Pudžaitis. Savitvarkio monosluoksniu (SAM) ir modelinės membranos (tBLM) formavimosi ant aukso dangos stebėjimas ATR-SEIRAS metodu.
15	Raimonda Bogužaitė. Electrochemical deposition and modifications of polypyrrole.
16	Romuald Eimont. Akies ragenos modelio prototipavimas vaistinių medžiagų pralaidumo tyrimams.
17	Adrián Vicent Claramunt. Understanding of breath VOCs profile variations from healthy volunteers.
18	Kamilė Jonynaitė. <i>Chlorella vulgaris</i> dumblių ir jų mikrobiome dominuojančių bakterijų tarpusavio sąveika, autotrofinio kultivavimo metu.
19	Ernesta Bužavaitė-Vertelienė. Hybrid Tamm-surface plasmon polariton mode for highly sensitive detection of protein interactions.
20	Karolina Maleckaitė. Raudonai fluorescuojančių BODIPY klampos jutiklių fotofizikinės savybės.
21	Algirdas Pabedinskas. Savaiminio Drūkšių ežero valymosi nuo antropogeninės ^{14}C taršos tyrimas.
22	Kirill Skovorodko. $^{99\text{m}}\text{Tc}$ radionuklidinio grynumo nustatymo metodų palyginimas.

23	Evelina Dudutienė. Luminescent properties of GaAsBi quantum wells.
24	Vladislovas Čižas. Netiesinis mikrobangų atsakas GaAs/AlGaAs supergardenelėse.
25	Simona Pūkienė. Influence of A3-B5 QW structures on parameters of NIR light emitting devices.
26	Justinas Jorudas. Investigation of electrical performance of buffer-free AlGaIn/GaN heterostructure on SiC substrate.
27	Daniil Pashnev. Time-domain spectroscopy of two-dimensional plasmons in AlGaIn/GaN heterostructures.
28	Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė. Optinė grafeno sluoksnių moduliacija.
29	Ričardas Norkus. Terahercinės spinduliuotės žadinimo spektroskopija.
30	Andrius Kamarauskas. Plono laidaus sluoksnio įtaka fano rezonanso amplitudei perpjautų rezonansinių žiedelių masyve tyrimas.
31	Giedrius Sinkevičius. Pokelso narvelių dažnių kontrasto charakteristikų tyrimas.
32	Vilius Vertelis. Elektrinės YBCO sluoksnių su CeO ₂ pasluoksniu savybės ir elektromagnetinis disko iš II rūšies superlaidininko greitinimas.
33	Tadas Matijošius. Deposition of nanothin layers of selected elements by magnetron sputtering and ALD on anodized aluminum.
34	Algimantas Lukša. Tiesiogiai ant dielektrinio sluoksnio auginamo nanokristalinio grafeno savybių priklausomybė nuo PECVD technologinių parametrų.
35	Tomas Daugalas. Statmenų 2D plokštumai darinių metalas-grafenas-metalas elektrinių savybių tyrimai.
36	Vladimir Agafonov. 2D-MoS ₂ sluoksnių sintezė ir taikymas IR spinduliuotės detektavimui.
37	Matas Rudzikas. Iš tirpalo formuojamų metalų oksidų sluoksnių optinių savybių priklausomybės nuo technologijos tyrimai ir praktinis taikymas fotovoltiniuose elementuose.
38	Rokas Jasiūnas. From femto to microseconds - dynamic photophysics of nonfullerene organic solar cells.
39	Rokas Gegevičius. Sr ²⁺ jonų įtaka elektronų gaudyklėms MAPbI ₃ perovskituose.
40	Vytautas Vosylius. Lazeriu asistuojamas PC-ABS polimero selektyvus padengimas metalu: terminės akumuliacijos minimizacija spartesniam lazeriniam procesui.
41	Simas Melnikas. Čirpuoti veidrodžiai su porėtu išoriniu sluoksniu grupinio vėlinimo dispersijos osciliacijoms sumažinti.
42	Paulius Mackonis. NIR superkontinuumo impulsų stiprinimas ir spūda, taikant nenuostoviąją priverstinę Ramano sklaidą.
43	Minvydas Marciūnas. PdCo ₃ O ₄ CeO ₂ /C – sintezė, charakterizavimas ir taikymas etilenglikolio oksidacijos reakcijai.
44	Vytautas Žalandauskas. Vibrational structure of the carbon dimer in hexagonal boron nitride: Theoretical study.
45	Mantas Gaidys. Lazerinės abliacijos efektyvumas apdirbant metalus ultratrumpųjų impulsų voromis: gręžimas ir frezavimas.

46

Daria Pashneva. Source apportionment of black carbon aerosol in background environment (Preila, Lithuania).

47

Evelina Griniuk. Hydrothermal synthesis of photoelectrochemically active tungsten oxide layers.

48

Laura Michailova. Influence of EDTA on tungsten oxide formation in sol-gel process.

49

Agnė Minderytė. Wildfires in Ukraine - impact on Vilnius air quality.

50

Rokas Silkinis. Modelling semiconductor alloys using special quasi-random structures.

51

Lena Golubewa. Black Silicon based substrate for Surface-Enhanced Raman Spectroscopy of living cells.

52

Karolis Adomavičius. Ultraspartus tridimensinis (3D) žmogaus tinklainės vaizdinimas su optine koherentine tomografija.

53

Povilas Račkauskas. Optinės gardelės panaudojant šuolius tarp šaltų atomų vidinių būsenų.

54

Laura Tauraitė. FS lazeriu indukuotų struktūrinių pokyčių stikluose tyrimas.

JAUNOS ŽVAIGŽDŽIŲ POPULIACIJOS NETAISYKLINGOJE NYKŠTUKINĖJE GALAKTIKOJE Leo A

Alina Leščinskaitė, Rima Stonkutė, Vladas Vansevičius

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

Jaunų masyvių žvaigždžių grįžtamasis ryšys (t.y., spinduliuotės slėgio kuriami vėjai, supernovų sprogimai ir kt.) veikia aplinkinę tarpžvaigždinę terpę: įkaitina/ionizuoja, išsklaido ar suspaudžia aplinkines dujas. Nuo šių procesų priklauso žvaigždėdaros sparta bei efektyvumas galaktikoje. Jaunų žvaigždžių populiacijų ir jų aplinkos tyrimas padeda suprasti žvaigždėdaros procesų eigą galaktikoje per pastaruosius ~300 mln. m.

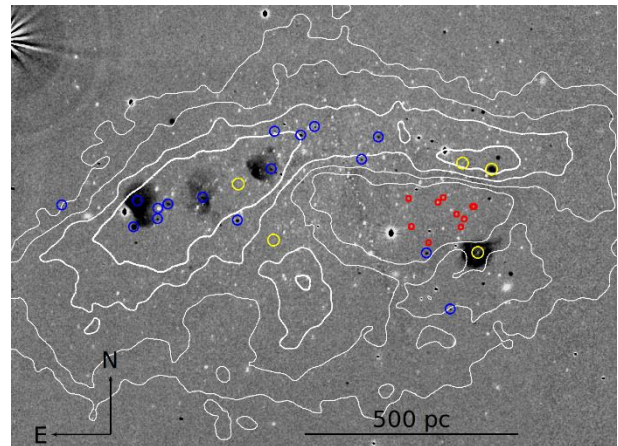
Šiame darbe jaunos žvaigždžių populiacijos buvo tiriamos Vietinės galaktikų grupės pakraštyje (atstumas 824 kpc) esančioje mažos žvaigždinės masės ($\sim 3 \times 10^6 M_{\odot}$) ir mažo metalingumo ($[Fe/H] = -1,7$ [1]) galaktikoje Leo A. Ši galaktika pasižymi uždelsta žvaigždėdaros istorija – žvaigždėdaros efektyvumas joje ženkliai padidėjo tik praėjus keletui milijardų metų nuo susiformavimo [2]. Leo A yra izoliuota galaktika (neturi artimų kaimynių), todėl tikėtina, jog žvaigždėdara joje plinta savaime tik dėl vidinių procesų.

Žvaigždžių populiacijų tyrimui Leo A galaktikoje buvo panaudoti daugiaspalvės fotometrijos duomenys gauti Subaru teleskopo Suprime-Cam bei Hubble kosminio teleskopo ACS (*angl.* Advanced Camera for Surveys) kameromis. Iš žvaigždžių fotometrijos katalogo [3] jaunos populiacijos buvo išskirtos spalvos-ryškio diagramose pagal 320 mln. m. amžiaus ir $Z=0,0005$ metalingumo izochroną [4] atrenkant mėlynąsias supermilžines bei ryškiausias ($I < 23$) pagrindinės sekos žvaigždes. Tarpžvaigždinės terpės analizei buvo panaudotos neutralaus vandenilio (HI) [5] ir jonizuoto vandenilio ($H\alpha$) emisijos pasiskirstymų nuotraukos.

Vakarinėje galaktikos dalyje yra sritis, pasižyminti daugiau nei 10 kartų mažesniu HI stulpelio tankiu (ploniausi balti kontūrai 1 pav.), palyginus su dujų sutankėjimais rytinėje bei šiaurės-vakarinėje srityse (storiausi balti kontūrai 1 pav.). Tokios 500 pc dydžio HI „skylės“ išpūtimui, esant vidutinei dujų greičių dispersijai ~ 7 km/s [5], reikėtų ~ 40 mln. m. ir tai galėtų būti viršutinė šio darinio amžiaus riba.

HI „skylės“ rytinėje ir vakarinėje pusėse pastebimai skiriasi žvaigždžių tankis, taip pat visoje šioje srityje trūksta ~ 30 -300 mln. m. amžiaus žvaigždžių. Tačiau vakarinėje „skylės“ dalyje yra jauna (< 30 mln. m.) žvaigždžių populiacija (raudoni apskritimai 1 pav.), kuri

galėjo išpūsti dujas iš šios srities. Ši populiacija galimai sukūrė ir $H\alpha$ emisijos frontą, sutampantį su vakarinės HI „skylės“ dalies pakraščiu, bei suaktyvino žvaigždėdaros procesus už fronto esančiose srityse, kuriose matyti HII sritys ir trys jauni žvaigždžių spiečiai (geltoni apskritimai 1 pav.) [6]. Visgi šios žvaigždžių populiacijos pasiskirstymas HI „skylėje“ neatitinka jos formos – rytinėje dalyje trūksta jaunų žvaigždžių. Taigi dar nėra įtikinamo paaiškinimo, kokie procesai lėmė HI „skylės“ atsiradimą Leo A galaktikoje.



1 pav. Subaru Suprime-Cam kamera gauta jonizuoto vandenilio ($H\alpha$) pasiskirstymo Leo A galaktikoje nuotrauka. Tamsesnė spalva rodo padidėjusią $H\alpha$ emisiją (HII sritis). Balti kontūrai žymi HI stulpelio tankį (nuo ploniausių iki storiausių linijų: $3 \cdot 10^{20}$, $5 \cdot 10^{20}$, $7 \cdot 10^{20}$, 10^{21} [atomai/cm²]). Mėlyni apskritimai – $H\alpha$ emisija pasižymintys objektai; raudoni – jaunos (< 30 mln. m.) pagrindinės sekos žvaigždės, galimai sukūrusios skylę HI dujų pasiskirstyme; geltoni – jauni žvaigždžių spiečiai [6].

Literatūra

1. Kirby, E. N., Rizzi, L., et al. 2017, ApJ, **834**, 9.
2. Skillman, E. D., Hidalgo, S. L., et al. 2014, ApJ, **786**, 44.
3. Stonkutė, R., Arimoto, N., et al. 2014, ApJS, **214**, 19.
4. Bressan, A., Marigo, P., Girardi, L., et al. 2012, MNRAS, **427**, 127.
5. Hunter, D.A., Ficut-Vicas, D., Ashley, T., et al. 2012, AJ, **144**, 134.
6. R. Stonkutė, R. Naujalis, M. Čeponis, et al. 2019, A&A, **627**, A7.

Nykštukinės galaktikos Leo A žvaigždėdara

Marius Čeponis, Rima Stonkutė, Vladas Vansevičius

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

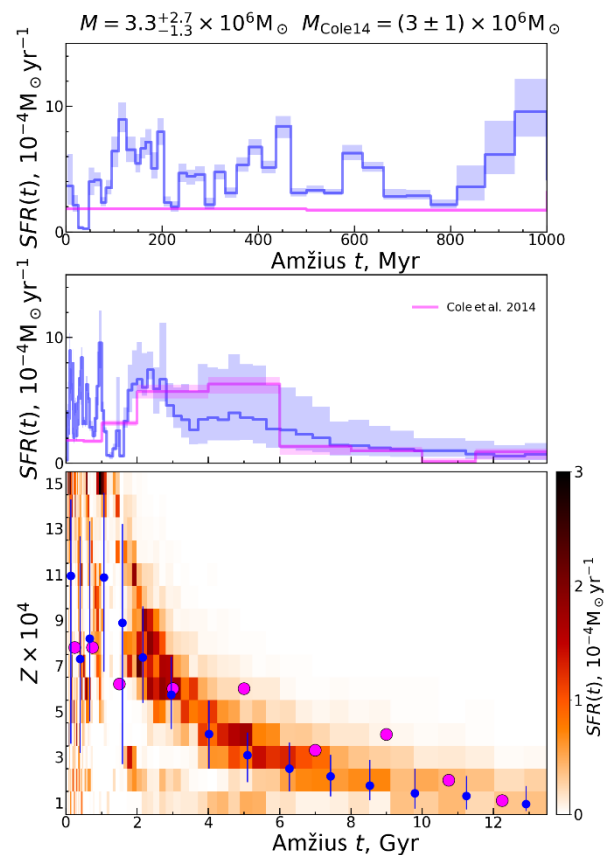
Galaktikų formavimąsi lemiantis procesas yra žvaigždėdara, tačiau ji vis dar nėra pilnai suprasta. Siekiant išsiaiškinti, geriausia ją tyrinėti ekstremaliose aplinkose, pvz. tokiose kaip nykštukinė galaktika Leo A. Ši maža galaktika dar visai neseniai gana aktyviai formavo žvaigždes, nors molekulinų dujų joje kol kas neaptikta, ir, atrodytų, žvaigždėdara iš viso neturi vykti. Dėl šių priežasčių tyrimui ir pasirinkome Leo A galaktiką.

Tyrimas atliktas naudojant fotometrinius žvaigždžių matavimus (*F475W* ir *F814W* juostose) [1] Hubble kosminio teleskopo ACS kamera gautose Leo A nuotraukose [2]. Šiame tyrime apsiribojome žvaigždėmis ryškesnėmis nei $F475W < 29$. Iš viso buvo tiriama 125401 žvaigždžių imtis.

Leo A žvaigždėdaros istorija buvo nustatyta mūsų sukurtu iteratyviu žvaigždėdaros istorijos atkūrimo metodu. Jo esmė tokia: kiekvienos iteracijos metu generuojamos dirbtinių žvaigždžių populiacijos; tuomet jų pasiskirstymas spalvos-ryškio diagramose lyginamas su iš stebėjimų gautomis diagramomis; pagal gautus skirtumus koreguojamos dirbtinių žvaigždžių populiacijos; toliau jos vėl lyginamos su stebėjimais. Šis ciklas kartojamas iki nusistovi galutinis žvaigždėdaros istorijos sprendinys. Dirbtinės žvaigždžių populiacijos generuojamos įskaitant visus matavimų netikslumus, kurie nustatomi Dirbtinių žvaigždžių metodu [3].

Atkurta Leo A žvaigždėdaros istorija parodyta 1 pav. Ši galaktika didžiąją dalį savo žvaigždžių suformavo per pastaruosius 6 mlrd. metų. Žvaigždėdara vyko vis trumpėjančiais žvaigždžių formavimosi epizodais, po kurių sekdamo mažo aktyvumo laikotarpis. Mūsų rezultatai gerai atitinka pliūpsninį nykštukinių galaktikų žvaigždėdaros scenarijų, pagal kurį, po trumpo žvaigždžių formavimosi suaktyvėjimo visada seka žvaigždėdaros sulėtėjimas, nes naujai susiformavusios masyvios žvaigždės sprogsta supernovomis ir dujas išpučia iš galaktikos. Kadangi žvaigždės formuojasi iš dujų, žvaigždėdara kuriam laikui sustoja – kol dujos nesukrenta atgal į galaktiką.

Taip pat, nustatėme Leo A galaktikoje susiformavusių žvaigždžių masę $3.3^{+2.7}_{-1.3} \times 10^6 M_{\odot}$. Gauti rezultatai iš esmės atitinka anksčiau publikuotus [4], tačiau pasiekta daug geresnė laikinė skyra. Be to, atkurtas amžiaus-metalingumo sąryšis geriau atitinka izoliuotų galaktikų evoliucijos teorines prognozes.



1 pav. Leo A žvaigždėdaros istorija per pastarąjį 1 Gyr (viršuje) ir per visą laiką, ~13 Gyr (viduryje). Mėlynos linijos žymi mūsų nustatytą žvaigždžių formavimosi greitį, $SFR(t)$; šviesiai mėlsvos sritys – $SFR(t)$ neapibrėžtumą. Apačioje parodytas galaktikos metalingumo kitimas laike: šiame darbe nustatytas (mėlyni taškai – vidutinis metalingumas atitinkamame amžiaus intervale; mėlynos vertikalios linijos – standartiniai nuokrypiai); Cole et al. [4] gauti rezultatai (purpuriniai taškai).

Literatūra

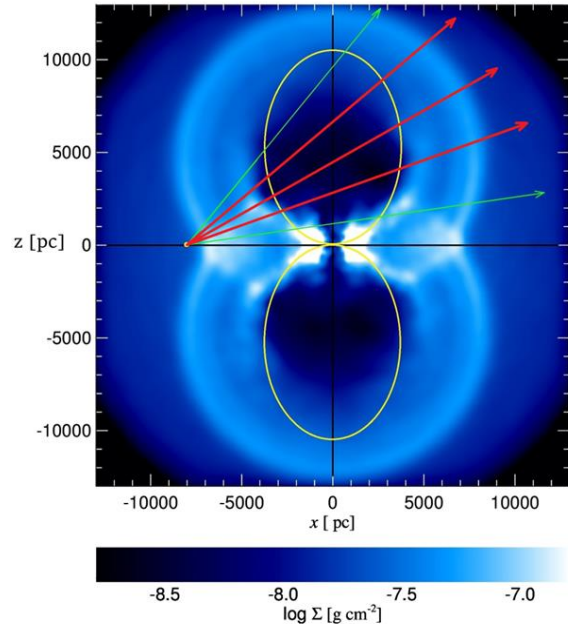
1. R. Stonkutė, R. Naujalis, M. Čeponis, A. Leščinskaitė, V. Vansevičius, *A&A*, **627**, A7 (2019).
2. A. A. Cole, E. D. Skillman, E. Tolstoy, et al., *ApJ*, **659**, L17 (2007).
3. R. Stonkutė, V. Vansevičius, et al., *Baltic Astronomy*, **24**, 314 (2015).
4. A. A. Cole, D. R. Weisz, A. E. Dolphin, et al., *ApJ*, **795**, 54 (2014).

PAUKŠČIŲ TAKO FERMI BURBULŲ HIDRODINAMINIAI MODELIAI

Aidas Sadauskas Kastytis Zubovas

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

Paukščių Tako centre esant supermasyvi juodoji skylė Sgr A* tikriausiai yra vienas iš svarbiausių Galaktikos formavimosi ir evoliucijos ingredientų. Jauni žvaigždžių spiečiai Arches ir Quintuplet, bei jaunos masyvios žvaigždės centriniame parseke leidžia manyti, kad Sgr A* buvo aktyvi per pastaruosius 10 mln. metų. 2010 m. atrastos Su et al. (2010) didžiulės gama spindulių struktūros – Fermi burbulai – gali būti vienas iš Sgr A* aktyvumo padarinių. Iki šiol nėra aiškus nei šių struktūrų amžius, nei susiformavimo mechanizmas, todėl tiriant Fermi burbulų kinematiką galime geriau suprasti šių struktūrų atsiradimų kilmę, kuri gali būti paaiškinta Sgr A* aktyvumo epizodu. Šiame darbe mes atliekame skaitmeninius hidrodinaminius skaičiavimus, kurių pagalba siekiame atkurti Fermi burbulų struktūras. Tirdami šių struktūrų kinematinės bei morfologines savybes – burbulų evoliuciją laike, jų formą ir dydį, nustatėme, kad tokių struktūrų amžius turėtų būti 6-8 mln. metų, kas sutampa su kitais Sgr A* aktyvumo indikatoriais. Mūsų rezultatai pagilina Paukščių Tako praeities aktyvumo supratimą.



1 pav. Fermi burbulų tankio žemėlapis. Geltoni kontūrai - Fermi burbulai, žalios ir raudonos linijos - stebėjimo kryptys atrenkamoms dalelėms.

Literatūra

1. Su, M., Slatyer, T. R., & Finkbeiner, D. P. 2010, ApJ, 24,1044P.

OPTIMAL ENTRAINMENT OF A NETWORK OF INTERACTING NEURONS WITH MINIMUM STIMULATING CHARGE

Kestutis Pyragas, Augustinas P. Fedaravičius, Tatjana Pyragienė & Peter A. Tass

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Fundamental Research
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: apfedaravicius@gmail.com

We consider a general heterogeneous network of N coupled Hodgkin-Huxley-type neurons under periodic stimulation

$$\begin{aligned}\dot{v}_i &= F_i(v_i, \mathbf{w}_i) + \sum_{j=1}^N H_{ij}(v_i, v_j) + I(\omega t), \\ \dot{\mathbf{w}}_i &= \mathbf{G}_i(v_i, \mathbf{w}_i) \quad (i = 1, \dots, N).\end{aligned}$$

Without stimulation ($I(\omega t) = 0$) the entire network exhibits stable collective limit cycle oscillations. **Our goal:** find the optimal waveform that ensures the entrainment of this network to the frequency of stimulation with the minimum mean absolute value of the current injected into neurons, i.e. which minimizes the functional

$$\mathcal{J}[I] = \frac{1}{T} \int_0^T |I(\omega t)| dt,$$

with two additional clinically mandatory requirements:

$$\begin{aligned}\int_0^T I(\omega t) dt &= 0 \quad (\text{charge balance condition}), \\ I_- &\leq I(\omega t) \leq I_+ \quad (\text{amplitude limitation}).\end{aligned}$$

Here v_i is the membrane potential, $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^n$ is the recovery variable of the i 'th neuron. $F_i(v_i, \mathbf{w}_i)$ describes the sum of currents flowing through the ion channels of the i 'th neuron and $H_{ij}(v_i, v_j)$ defines the coupling between the i 'th and j 'th neuron. $I(\omega t)$ is a periodic stimulating current applied to $M \leq N$ neurons, where ω is the stimulation frequency and T is the period.

The dynamics of the system can be approximated by the phase equation $\dot{\vartheta} = \omega_0 + z(\vartheta)I(\omega t)$, where $z(\vartheta) = \sum_{k=1}^M z_{ik}(\vartheta)$ is the sum of the phase response curves (PRCs) of the M stimulated neurons. For a sufficiently small frequency detuning $\Delta\omega$, we obtain the optimal waveform:

$$I^*(\vartheta) = I_+ \Pi\left(\frac{\vartheta}{\Delta\vartheta_+}\right) + I_- \Pi\left(\frac{\vartheta \pm \Delta\vartheta_z}{\Delta\vartheta_+}\right).$$

It is of the bang-off-bang type and requires only limited information about the PRC:

1. the phase difference $\Delta\vartheta_z$ between the location of its absolute maximum ϑ_{max} and minimum ϑ_{min} , and

2. the amplitude $z_{max} - z_{min}$.

The height of the positive (negative) pulse is I_+ (I_-) and its width is $\Delta\vartheta_{+,-} = 2\pi\Delta\omega/[I_{+,-}(z_{max} - z_{min})]$. $\Pi(x)$ is the rectangular function.

We confirm the theoretical results with three numerical examples: two small-scale networks

consisting of (i) five synaptically coupled FitzHugh-Nagumo (FHN) neurons, (ii) ten electrically coupled FHN neurons, and (iii) a large-scale network with 10^4 synaptically coupled quadratic integrate-and-fire (QIF) neurons. For fixed values of the distance d between the positive and negative pulses, we vary the amplitude of the trial signal and compute the threshold amplitude value a_{th} at which entrainment occurs. We estimate a_{th} using two different methods: (i) by directly integrating the nonlinear system equations and (ii) using the approximate phase. We then show that the threshold value $\mathcal{J}_{th}$ of the functional $\mathcal{J}[I]$ coincides with the optimal theoretical value.

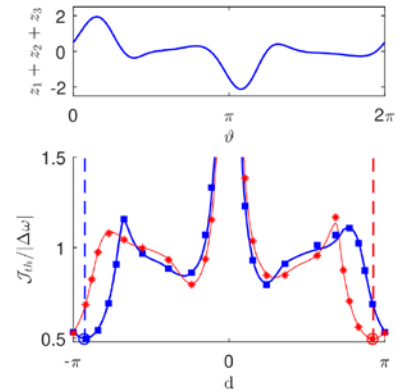


Fig. 1. Minimum-charge control theory for a network of five synaptically coupled FHN neurons when only oscillating excitatory neurons and only excitable inhibitory neurons are stimulated. (Top) Effective PRCs. (Bottom) Threshold value $\mathcal{J}_{th}$ of the functional $\mathcal{J}[I]$, normalized to $|\Delta\omega|$, as a function of the distance d between the pulses of the trial waveform. The blue and red curves show results obtained from the averaged phase equation for $\Delta\omega > 0$ and $\Delta\omega < 0$. Blue squares and red stars denote the corresponding results obtained by integrating the system of nonlinear network equations. The dashed vertical lines show the theoretical optimal distances $d = \pm\Delta\vartheta_z$. Open circles indicate the optimal theoretical value.

References

- Pyragas, K., Fedaravičius, A. P., Pyragienė, T., & Tass, P. A. (2018). Optimal waveform for entrainment of a spiking neuron with minimum stimulating charge. *Physical Review E*, 98(4), 042216.
- Pyragas, K., Fedaravičius, A. P., Pyragienė, T., & Tass, P. A. (2020). Entrainment of a network of interacting neurons with minimum stimulating charge. *Physical Review E*, 102(1), 012221.

Al₂O₃ IR ZnO NANOSTRUKTŪRŲ TAIKYMAS ALBUMINŲ APTIKIMUI OPTINĖS DETEKCIJOS BŪDU

Vincentas Mindaugas Mačiulis¹, Ieva Plikusienė^{1,2}, Almira Ramanavičienė², Uldis Malinovskis³,
Mikhael Bechelany⁴

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

² Vilniaus Universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

³ University of Latvia, Institute of Chemical Physics
Kronvalda bul. 4, LV-1010 Riga

⁴ Institut Europeen des Membranes
300 Avenue du Professor Emile Jeanbrau, 34090 Montpellier

Pastaruoju metu įvairių metalų oksidų nanostruktūros pradėtos plačiai taikyti įvairiose srityse, viena iš jų optiniai biologiniai jutikliai. Šioje srityje metalų oksidų nanostruktūros (nanosluoksniai, nanodalelės, nanovielos, nanoporos ir kt.) yra plačiai taikomos nes pasižymi tokiais savybėmis kaip didelis paviršiaus plotas, biosuderinamumas, lengvas paviršiaus modifikavimas funkcinėmis grupėmis ir kita. [1].

ZnO yra plačiai naudojamas n tipo puslaidininkis (3,37 eV), pasižymintis luminescencija kambario temperatūroje. Iš ZnO galima suformuoti įvairias nanostruktūras: nanokaspinus, nanovamzdelius, nanovielas. Tokios struktūros yra tinkamos naudoti, kaip optinio jutiklio pagrindas molekulių įmobilizavimui ir aptikimui [2]. Taip pat dėl cheminio stabilumo ir netoksiškumo, ZnO gali būti sėkmingai panaudojamas kuriant dujų jutiklius. Šiame tyrime elektronuodimo būdu suformuotos ~350 nm ZnO nanovielos (ZnONWs) buvo sėkmingai pritaikytos jaučio serumo albumino imobilizavimo kinetikos nustatymui spektrinės elipsometrijos metodu. Šiuo metodu nustatyti atspindžio spektrai prieš ir po JSA imobilizavimą ant ZnONWs ir plokštuminio ZnO parodė, kad JSA kiekis, imobilizuotas ant ZnONWs buvo 6.6 karto didesnis, nei ant plokštuminio ZnO. Difuzijos koeficiento įvertinimas buvo atliktas skaitmeninio modeliavimo būdu, buvo gauta, kad šis koeficientas $2.4 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}$. Lūžio rodiklio jautrumas bangos ilgiui buvo 13 kartų didesnis naudojant ZnONWs kaip jutiklio paviršių. Tyrimai parodė, kad naudojant ZnONWs didesnis kiekis JSA yra imobilizuojamas ant paviršiaus lyginant su plokščiu ZnO.

Kitas paviršius pasižymintis lengvai suformuojamos nanostruktūronis ir šiame tyrime taikytas žmogaus serumo albumino

(ŽSA) adsorbcijai tirti buvo porėtas Al₂O₃ (pAAO). Anoduojant aliuminį rūgštiniuose tirpaluose suformuojama porėta danga, kurioje panašaus diametro nanoporos išsidėsto šešiakampio korio struktūra. ŽSA, kaip ir JSA yra dažnai naudojami funkcinių grupių blokavimui, kuriant imuninius jutiklius. Šiame darbe porėta 322 nm aliuminio oksido danga (pAAO) suformuota dviejų pakopų anodavimo metodu buvo pritaikyta ŽSA adsorpcijai tirti, naudojant spektrinės elipsometrijos metodą. ŽSA adsorpcijos tyrimas parodė, kad a) inkubavus tokį paviršių 1h, 2h, 3h+15min plovus ŽSA, baltymo koncentracija nanoporoose buvo 194, 395, 254 karto didesnė nei buferiniame tirpale, b) adsorpcijos proceso pradžia yra lėta lyginant su baltymo desorpcija plovimo metu, c) plaunant tokį paviršių su PBS ŽSA nėra pilnai pašalinamas iš nanoporų, nes baltymo koncentracija jose po 16 plovimo vis dar lieka apie 100 kartų didesnė. Taigi ŽSA gali būti sėkmingai naudojamas laisvo paviršiaus blokavimui po biomolekulių įmobilizavimo ant pAAO ir nespecifiškai prisijungusių molekulių pašalinimo.

Literatūra

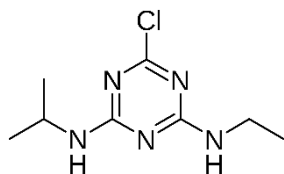
1. Dai, Z.; Ju, H. Bioanalysis based on nanoporous materials. *TrAC - Trends Anal. Chem.* **2012**, *39*, 149-162, doi:10.1016/j.trac.2012.05.008.
2. Balevicius, Z.; Paulauskas, A.; Plikusienė, I.; Mikoliunaite, L.; Bechelany, M.; Popov, A.; Ramanavicius, A.; Ramanaviciene, A. Towards the application of Al₂O₃/ZnO nanolaminates in immunosensors: total internal reflection spectroscopic ellipsometry based evaluation of BSA immobilization. *J. Mater. Chem. C* **2018**, *6*, 8778-8783, doi:10.1039/c8tc03091j.

KOPOLIMERO SUDARYTO IŠ FOLIO RŪGŠTIES IR RIBOFLAVINO PANAUDOJIMAS HERBICIDO ATRAZINO NUSTATYMU

Vytautas Žutautas, Emilija Katinaitė, Rasa Pauliukaitė

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

Šiais laikais populiarėja jutikliai iš natūralių komponentų. Jie naudojami siekiant sumažinti klimato kaitą ir atitinka Europos Komisijos Europos žaliąjį susitarimą. Jutiklių gamyboje jau seniai naudojami natūralūs polimerai, o polimerų gautų iš natūralių monomerų, tokių kaip amino rūgščių, kai kurių vitaminų ar dopamino panaudojimas jutiklių ypač biojutiklių kūrime yra nauja sritis [1]. Herbicidai yra svarbūs sėkmingam augalų augimui, bet jie yra kenksmingi žmonėms ir gyvūnams todėl yra svarbu stebėti jų koncentracijas augaliniuose produktuose. Atrazinas (1 pav.) yra triazino klasės herbicidas, jo nedidelis kiekis aptinkamas produktuose gaminamuose iš šiuo herbicidu paveiktų augalų. Jis naudojamas siekiant užkirsti kelią plačialapių piktžolių atsiradimui pasėliuose tokiuose kaip kukurūzuose ir cukranendrėse, vejoje tokioje kaip golfo laukų ir gyvenamųjų vejų. Dėl paminėtų priežasčių reikia paprasto ir greito metodo atrazino nustatymui.



1 pav. Atrazino cheminė struktūra

Polimerizuota folio rūgštis (PFA) ir riboflavinai (PRf) naudojami norint aptikti glutamatą, gliukozę ir askorbo rūgštį [2,3]. Kai kuriomis sąlygomis šie vitaminai gali būti polimerizuojami elektrochemiškai [4,5]. Elektrochemija yra žaliosios sintezės metodas ir iš natūralių monomerų gauti polimerai gali būti naudojami medicinoje, maisto kontrolėje ar su kitais biologiniais bandiniais.

Norint aptikti atraziną PFA ir PRf kopolimeras sintetinamas ant lygaus anglies elektrodo. Šiame darbe bus aptarta kopolimero kompozicija ir jo elektrokatalizinis aktyvumas sąveikaujant su atrazinu.

Literatūra

1. R. Pauliukaite, Application of Natural Polymers for Electrochemical Sensing, In: Biophysics for Biomedical and Environmental Sciences, ed. M. Florescu, Transilvania University of Brasov Press, Brasov, 2016, 187-212.
2. T. Venckus, R. Celiešiūtė, A. Radzevič, T. Rakickas, Š. Vaitekonis, Ž. Ruželė, R. Pauliukaite, Application of Polyfolates in the Development of Electrochemical Glucose Biosensors, *Electroanalysis*, **26** (2014) 2273-2282.
3. R. Celiešiūtė, A. Radzevič, A. Žukauskas, Š. Vaitekonis, R. Pauliukaite, A Strategy to Employ Polymerised Riboflavin in the Development of Electrochemical Biosensors, *Electroanalysis*, **29** (2017) 2071-2082.
4. R. Celiešiūtė, T. Venckus, Š. Vaitekonis, R. Pauliukaite, Electrosynthesis and Characterisation of Poly(Folic Acid) Films, *Electrochim. Acta*, **138** (2014) 62-68.
5. A. Radzevič, G. Niaura, I. Ignatjev, Tomas Rakickas, R. Celiešiūtė, R. Pauliukaite, Electrosynthesis of Conducting Polymer Films From a Natural Monomer - Riboflavin, *Electrochim. Acta*, **222** (2016) 1818-1830.

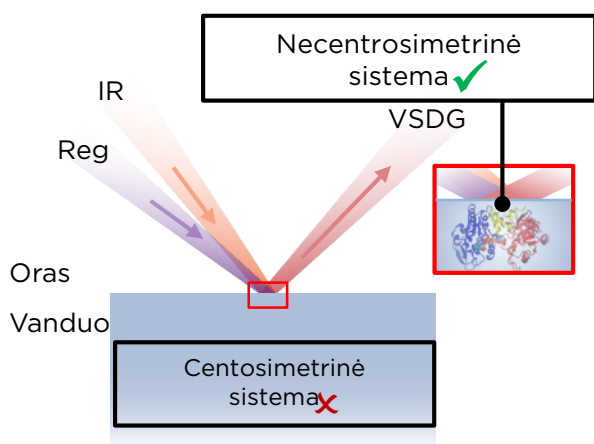
AMILOIDINIŲ STRUKTŪRŲ, ADSORBUOTŲ TIES MODELINIAIS PAVIRŠIAIS, TYRIMAS SUMINIO DAŽNIO GENERACIJOS METODU

Edvinas Navakauskas, Simona Strazdaitė, Gediminas Niaura

Fizinis ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: Edvinas.Navakauskas@gmail.com

Nevaldoma įvairių, tačiau žmogaus ląstelių metabolizmui įprastų, baltymų agregacija organizme sukelia daugybę ligų. Sutrikus specifinio baltymo gamybos ir šalinimo procesams, susidarantis perteklius, esant palankioms sąlygoms, pradeda jungtis tarpusavyje. Susiformuoja griežtą tvarką turintys, -klostytos struktūros agregatai, kurie vadinami amiloidais [1]. Amiloidams sąveikaujant su smegenų ląstelių membranomis, šios yra pažeidžiamos, o to pasekoje ląstelė miršta. Viena iš plačiausiai žinomų tokio tipo ligų yra Alzheimerio liga. Nepaisant to, jog nuo pirmojo užregistruoto šios ligos atvejo praėjo gerokai daugiau nei 100 metų, liga vis dar nepagydoma.

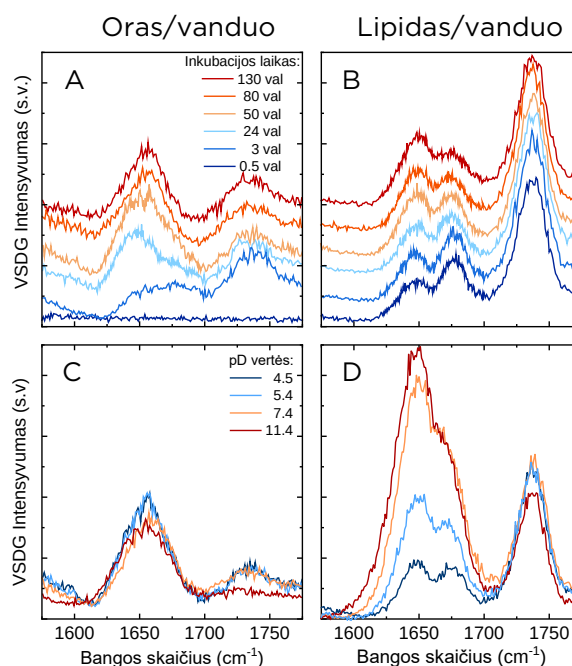
amiloidiniais -klostytai agregatai, yra adsorbuojami ties oras/vanduo ir ties lipidais/vanduo fazinėmis ribomis. Taip pat mes identifikavome, jog fazinėje riboje oras/vanduo agregatų adsorbcija yra sąlygota tik hidrofobinių jėgų. Tačiau fazinės ribos lipidais/vanduo atveju, elektrostatinė sąveika tarp baltymo krūvį turinčių grupių ir lipido hidrofilinės grupės, yra adsorbcijos varomoji jėga, neatmetant ir pastebimos hidrofobinės sąveikos. Kartu tyrimais pademonstravome, jog VSDG spektrams žymų poveikį turi matuojamo tirpalo pD, kurį darbe susiejome su į paviršių adsorbuotų baltymo struktūrų virpesinio dipolio orientacijos pokyčiais [2].



1 pav. VSDG principinė schema.

Norint suprasti baltymų agregaciją bei galimus sąveikos su lipidinėmis membranomis mechanizmus molekuliniam lygmenyje, labai svarbu tampa nustatyti baltymų agregatų struktūras adsorbuotas skirtinguose paviršiuose. Šiam tikslui mes pasitelkėme virpesinę suminio dažnio generacijos (VSDG) spektroskopiją (žr. 1 pav.), kurios pagalba įvertinome bei palyginome **vištos kiaušinio baltymo lizocimo** (angl. HEWL) suformuotų agregatų struktūrą bei adsorbciją ties modeliniu lipidiniu monosluoksniu ir vandens paviršiumi.

Atlikus tyrimus nustatėme, jog skirtingos struktūros tokios, kaip maži aiškios struktūros nesudarantys agregatai, kartu su didesniais



2 pav. Vištos kiaušinio baltymo lizocimo ir jo agregatų, adsorbuotų skirtingose fazinėse ribose, VSDG spektrai. Paveiksluose A ir B pavaizduoti skirtingą laiką inkubuoto ir skirtingose fazinėse ribose adsorbuoto lizocimo VSDG spektrai. Paveiksluose C ir D pavaizduoti 80 valandų inkubuoto ir skirtingose fazinėse ribose adsorbuoto lizocimo spektrai esant skirtingoms pD vertėms.

Literatūra

1. R. Nelson et al. Nature **435**, 773–778 (2005).
2. S. Strazdaitė et al. Langmuir **36**, 4766–4775 (2020).

HIDRO(SOLVO)TERMINĖ $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ SKIRTO Na-JONŲ BATERIJOMS SINTEZĖ IR CHARAKTERIZAVIMAS

Gintarė Plečkaitytė, Jurgis Pilipavičius, Milda Petrulevičienė, Jurga Juodkazytė, Linas Vilčiauskas

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

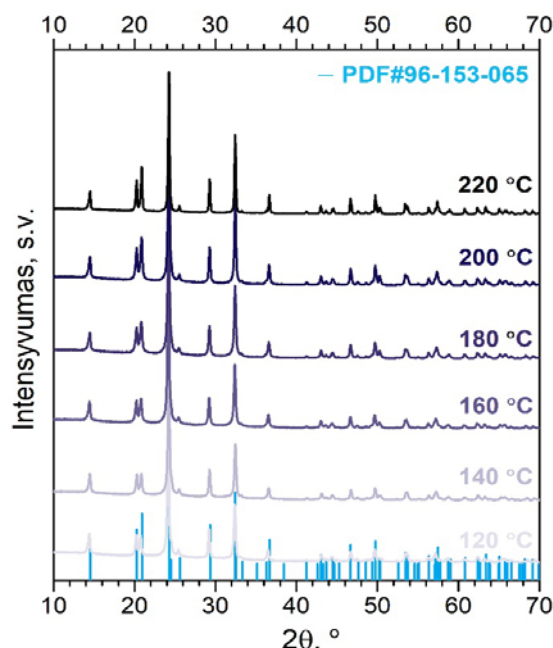
Intensyviai didėjantis vartotojų elektros energijos poreikis skatina ieškoti naujų ir efektyvių būdų švarios, atsinaujinančios energijos saugojimui. Vandeninės Na-jonų baterijos dėl savo unikalių savybių turi itin daug potencialo būti panaudojamos kaip stacionarios energijos kaupimo sistemos. Pirmiausia, tokios baterijos būtų gerokai pigesnės dėl neribotų Na šaltinių, taip pat saugesnės, tvaresnės ir lengviau utilizuojamos bei perdirbamos nei šiuo metu naudojamos Li-jonų baterijos [1,2].

NASICON (*Na Superionic Conductor*) tipo $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ junginys gali būti panaudotas kaip anodas tokio tipo baterijose. Dėl savo atviros 3D struktūros, stiprių P-O kovalentinių ryšių ir mažo tūrio pokyčio, įterpiant/ištraukiant natrio jonus per įkrovimą/iškrovimą, ši medžiaga pasižymi unikaliu elektrocheminiu ilgaamžiškumu. Taip pat iš kitų kandidatų ji išsiskiria aukštu Kolumbininiu efektyvumu, geru terminiu stabilumu ir puikiu prisitaikymu prie skirtingų įkrovimo/iškrovimo greičių. Teorinė $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ talpa gaunama $\text{Ti}^{3+}/\text{Ti}^{4+}$ oksidacijos/redukcijos reakcijų metu grįžtamai įterpiant du natrio jonus yra 133 mAh/g (~2.1V vs. Na⁺/Na) [3].

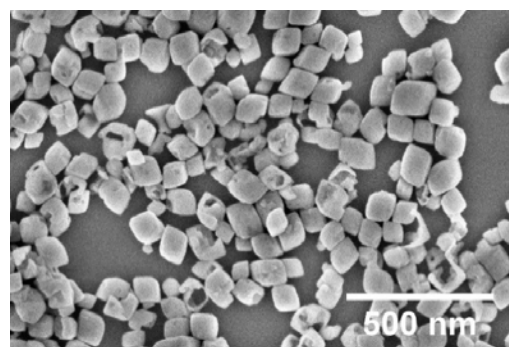
Šio darbo tikslas buvo susintetinti $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ ir ištirti jo struktūrines, elektrochemines savybes. Pasirinkus hidro(solvo)terminį sintezės metodą, buvo naudojami skirtingi tirpikliai (metanolis, etanolis, propanolis, etilenglikolis ir vanduo). Taip pat buvo keičiamos ir kitos sintezės sąlygos, tokios kaip temperatūra, pradinės medžiagos, iškaitinimas. Ištyrus gautų mėginių struktūrą rentgeno spindulių difraktometru, buvo nustatyta, jog fazės susiformavimui turi įtakos terpės rūgštingumas, tačiau ne sintezės temperatūra (120-220 °C) ar tirpiklio pasirinkimas. Gautų dalelių morfologija buvo išanalizuota panaudojus skenuojančią elektroninę mikroskopiją. Visi susintetinti junginiai rūgštinėje terpėje yra kubinės formos nanodalės, o bazinėje – mikrodalės.

Elektrocheminės savybės (ciklinė voltampe-rograma ir įkrovimo/iškrovimo galvostatinis ciklinimas) buvo ištirtos trijų elektrodų celėje. Darbinis elektrodas buvo paruoštas iš susintetinto $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$, anglies ir polivinilideno fluorido mišinio. Iš gautų rezultatų, galima daryti

išvadą, jog šis nanostruktūrinis junginys pasižymi puikiu elektrocheminiu atsaku ir gali būti naudojamas kaip anodas vandeninėse Na-jonų baterijose.



1 pav. $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ susintetinto etanolyje skirtingose temperatūrose rentgeno spindulių difraktograma



2 pav. $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ susintetinto etanolyje (180 °C) skenuojančio elektrinio mikroskopo nuotrauka

Padėka: Projektas bendrai finansuojamas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 01.2.2-LMT-K-718-02-0005) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslų taryba (LMT).

Literatūra:

1. S. Il Park, J. Electrochem. Soc. 158, A1067-A1070 (2011)
2. X. Pu, Small 15, 1805427 (2019)
3. C. Masquelier, Chem. Rev. 113, 8, 6552-6591 (2013).

INFLUENCE OF pH BUFFERING ON ANODE PERFORMANCE IN AQUEOUS Na-ION BATTERIES

Davit Tediashvili, Linas Vilčiauskas

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

Rechargeable lithium-ion batteries with organic electrolytes are widely used as commercial energy storage devices due to their attractive properties, such as high efficiency and energy density. However, scarce lithium resources, as well as usage of toxic, flammable, and expensive organic electrolytes are making the technology less attractive. On the other hand, sodium in the 6th most abundant and evenly distributed element in the earth's crust and recently it has also been shown that narrow potential window of aqueous electrolytes can be expanded, making an aqueous Na-ion battery a viable alternative[1].

Sodium's chemical properties are very similar to lithium's, however, certain aspect's must be taken into the account, such as larger radius, making intercalation of the material more problematic and higher anode potential, resulting in lower specific power and energy density of the battery, both of these problems can be solved by employing NASICON-type materials. However, they operate very close to hydrogen evolution potential (HER) which makes the process inevitable. Eventually, among other problems, the generation of hydroxide ions leads to a pH spike, which can dissolve certain materials. Fast cycling rate can be employed to achieve stable high cycle numbers before HER becomes prominent, but this approach isn't useful in practice when slower charging rate and longer storage are required.

The problem of electrode dissolution and capacity fade due to increased pH was studied here. NASICON-type sodium titanium phosphate ($\text{Na}_3\text{Ti}_2\text{PO}_4$, NTP) was transferred on stainless steel (SS) mesh for measurements. It has been shown in the past, that high pH (>11) is can easily dissolve this material [2]. During operation, this can be caused by HER or self-discharging of the material. Either way, buffering the system should be beneficial for capacity retention. Phosphate buffer was used to mediate pH change. Additionally, NTP particles were also coated with aluminium phosphate, which was successfully employed in the past to mediate the dissolution of electrode materials in Li-ion batteries.

The galvanostatic measurement at 1C rate (133mA/g) shows that phosphate buffering, as well as phosphate coating (PC), are superior compared to just carbon-coated (CC) electrodes

cycled in 1M Na_2SO_4 electrolyte. ICP-OES measurements of the electrolyte also show a lower amount of dissolved titanium, indicating the preservation of the material. However, one thing to be noticed in that efficiency, which is the ratio of anodic and cathodic reactions, is significantly lower. This could be explained by the thermodynamics of HER: the process depends on pH as follows:

$$E_{\text{HER}} = E_0 - 0.059\text{pH} \quad (1)$$

So, by nature, the reaction is self-terminating: HER leads to increased pH, which shifts the potential to a more negative value. The presence of buffer prevents this shift, therefore the intensity of the reaction is increased, resulting in lower efficiency.

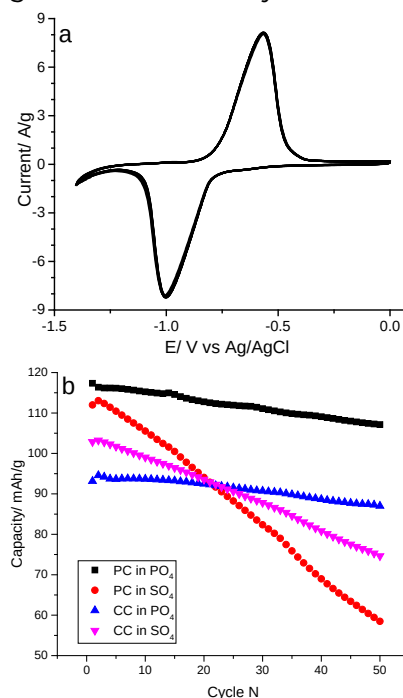


Fig. 1. Measurements of NTP electrode: a) cyclic voltammogram and b) galvanostatic cycling with or without phosphate additive.

References

1. Suo, L. et al. "Water-in-salt" electrolyte enables high voltage aqueous lithium-ion chemistries. *Science* (80-.), 350, 938-943 (2015).
2. Mohamed A. I. & Whitacre J. F. Capacity fade of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ in aqueous electrolyte solutions: Relating pH increase to Long-term stability. *Electrochim. acta* (2017).

AuCeO₂/C – SINTEZĖ, CHARAKTERIZAVIMAS IR TAIKYMAS ALKOHOLIŲ OKSIDACIJOS IR DEGUONIES REDUKCIJOS REAKCIJOMS

Raminta Stagniūnaitė, Virginija Kepenienė, Aldona Balčiūnaitė, Loreta Tamašauskaitė
Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus

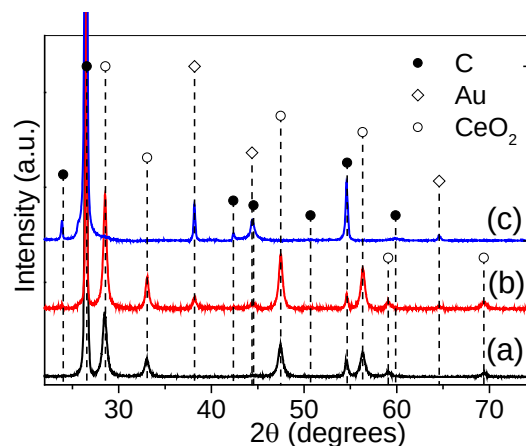
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Katalizės skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: raminta.stagniunaite@ftmc.lt

Pastaraisiais dešimtmečiais tiesioginiai alkoholio kuro elementai sulaukia vis didesnio tyrėjų dėmesio. Skysti, mažą molekulinę masę turintys alkoholiai yra perspektyvesnis kuras nei vandenilis (naudojamas vandenilio kuro elementuose), dėl paprastesnių jų laikymo bei transportavimo sąlygų. Taip pat tokie degalai yra ypač patrauklūs, kadangi jie gali būti gaminami iš atsinaujinančios biomasės, pvz.: fermentuojant cukrų gaunamas etanolis arba peresterinant riebalus – glicerolis [1]. Nors dažniausiai naudojami alkoholiai skysto-kuro kuro elementuose yra metanolis ir etanolis, tačiau vis patrauklesni tampa ir etilenglikolis bei glicerolis. Grynos Pt katalizatoriai vis dar dažniausiai naudojami kuro elementuose, tačiau pastaruoju metu yra aktyviai ieškoma elektrokatalitiškai aktyvių medžiagų, kurios galėtų sumažinti ar net visiškai pakeisti Pt katalizatoriuose [2].

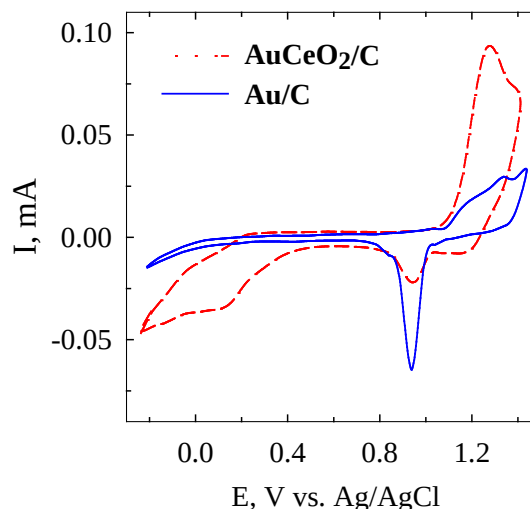
Šiame darbe pristatomas AuCeO₂/C katalizatorius bei jo elektrokatalizinės savybės alkoholių (metanolio, etanolio, etilenglikolio ir glicerolio) oksidacijos ir deguonies redukcijos reakcijoms. Au nanodalelės buvo nusodintos ant CeO₂/anglies pagrindo taikant sintezės mikrobangomis metodą. Palyginimui suformuotas Au/C katalizatorius tuo pačiu būdu nusodinant Au daleles ant anglies pagrindo.

Katalizatorių sudėtis bei paviršiaus morfologija buvo charakterizuota naudojant indukuotos plazmos optinės spektroskopijos, rentgeno spindulių difrakcijos (1 pav.), peršviečiamos elektroninės mikroskopijos, rentgeno spindulių spektroskopijos metodus. Elektrocheminiai matavimai buvo atliekami taikant ciklinės ir linijinės voltamperometrijos metodus.

Katalizatorių elektrokatalitiškai aktyvus paviršiaus plotas buvo nustatytas iš ciklinių voltamperometrinių (CV) kreivių užrašytų 0,5 M H₂SO₄ tirpale, esant 50 mV/s skleidimo greičiui (2 pav.). Deguonies redukcijos tyrimai buvo atliekami O₂ prisotintame 0,1 M NaOH tirpale, skleidžiant 5 mV/s greičiu, sukuriant elektrodą nuo 400 iki 2000 apsisukimų per minutę (apm). Elektrokatalizinio aktyvumo tyrimai alkoholių oksidacijai buvo atliekami 1 M alkoholio ir 0,5 M NaOH tirpaluose esant skleidimo greičiui 50 mV/s.



1 pav. Rentgeno spindulių difraktometrijos spektrai: CeO₂/C (a), AuCeO₂/C (b) ir Au/C (c).



2 pav. Tirtų katalizatorių CV kreivės užrašytos 0,5 M H₂SO₄ tirpale, skleidimo greitis 50 mV/s.

Nustatyta, kad tirtų katalizatorių aktyvumas alkoholių oksidacijos reakcijai, didėja šia seka: metanolis < etanolis < etilenglikolis < glicerolis. AuCeO₂/C katalizatorius pasižymėjo didžiausiu aktyvumu tiek deguonies redukcijos, tiek alkoholių oksidacijos reakcijoms.

Literatūra

1. S. S. Siwal, S. Thakur, Q. B. Zhang and V. K. Thakur, Metter: Today Chem. **14**, 100182 (2019).
2. K. Kakaei, M. D. Esrafil and A. Ehsani, Interface Science and Technology **27**, 253 (2019).

OPTIMIZATION OF SOL-GEL SYNTHESIS OF WO₃ FILMS TOWARDS EFFICIENT PHOTOELECTROCHEMICAL PERFORMANCE

Maliha Parvin, Milda Petrulevičienė, Irena Savickaja, Benjaminas Šebeka,
Arnas Naujokaitis, Vidas Pakštas and Jurga Juodkazytė

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

Tungsten (VI) oxide has been intensively studied as photoanode material due to its highly tunable composition, chemical stability, relatively narrow band gap of 2.6-2.7 eV, which allows absorbing of ~ 12% of solar light, and good charge carrier transport properties (hole diffusion length is ~150 nm). Besides, valence band edge of WO₃ is located at ~3.0 V vs NHE, which provides sufficient potential for oxidation of water (though conducting band edge is not negative enough to spontaneous H₂ evolution), as well as formation of various oxidants (ClO⁻, S₂O₈²⁻, H₂O₂), degradation of organic wastes. Majority of the recent reports have been focused on the morphology of WO₃, because morphology plays vital in photoelectrochemical (PEC) performance of photoelectrodes and is known to be greatly influenced by the synthesis method [1-4].

In this study, micro/nanostructured layers of WO₃ on fluorine-doped tin oxide (FTO) substrate were formed by sol-gel method. Different reducing agents (methanol, ethanol, propanol, isopropanol, butanol or acetic acid), different deposition times and annealing temperatures (400°C and 500°C) were applied to investigate their effect on photoelectrochemical activity and properties of WO₃ photoanodes. The coatings were characterized using X-ray diffraction (XRD) (Fig. 1), scanning electron microscopy (SEM), thermogravimetric (TG), differential scanning calorimetry (DSC) analysis. Photoelectrochemical behavior was investigated by means of cyclic voltammetry (CV) (Fig.2), electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and chronoamperometry (CA).

SEM analysis revealed that WO₃ coatings formed using different reductants are composed of randomly oriented plate-shaped particles of different size. On the basis of the investigations performed it was found that samples prepared with isopropanol as a reductant and annealed at 400°C demonstrated the best photoelectrochemical performance because of their highest crystallinity, lowest defect density, higher charge carrier density and efficient charge transfer ability.

In addition, faradaic efficiency of

photoelectrochemical hypochlorite formation was evaluated and antimicrobial effect of PEC chlorination with sol-gel derived WO₃ photoanodes was successfully demonstrated in suspensions of Gram-positive *Bacillus* spp. and Gram-negative *E.coli* bacteria strains in 0.5 M NaCl.

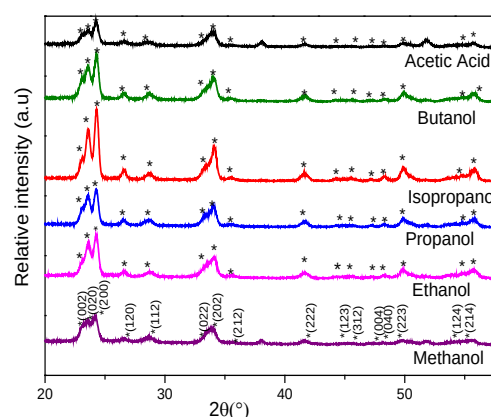


Fig. 1. XRD patterns of sol-gel derived WO₃ films prepared using six different reductants: a) Methanol, b) Ethanol, c) propanol, d) Isopropanol, e) Butanol and f) Acetic acid.

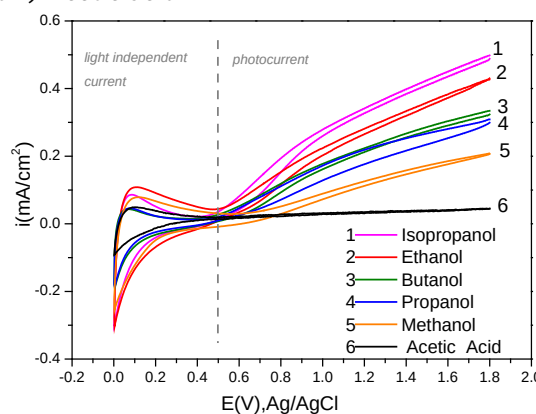


Fig. 2. Cyclic voltammograms of WO₃ photoelectrodes prepared using different reductants; curves were recorded in 0.5 M H₂SO₄ solution under illumination (~100 mW cm⁻²) at potential scan rate of 50 mV s⁻¹.

References

1. J. Su, X. Feng, J.D. Sloppy, L. Guo, and C.A. Grimes, *Nano Lett.* **11**, 203 (2011).
2. J. Zhou, S. Lin, Y. Chen and A.M. Gaskoy, *Appl. Surf. Sci.* **403**, 274 (2017).
3. Y. Xiong, Z. Zhu, T. Guo, H. Li, and Q. Xue, *J. Hazard. Mater.* **353**, 290 (2018).
4. Q. Zeng, J. Li, J. Bai, X. Li, L. Xia, and B. Zhou; *Appl. Catal. B Environ.*, vol. **202**, (2017).

ELEKTROCHEMIŠKAI SUFORMUOTŲ CERIO OKSIDINIŲ DANGŲ APSAUGINIŲ IR SAVAIMINIO UŽGIJIMO SAVYBIŲ TYRIMAI

Aliona Kirdeikienė, Rimantas Ramanauskas, Laima Gudavičiūtė, Olga Girčienė,
Algirdas Selskis, Remigijus Juškėnas, Jurgis Pilipavičius, Gediminas Niaura

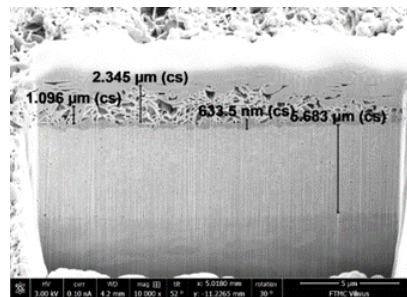
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: aliona.kirdeikiene@ftmc.lt

Šiuo metu žinomi Zn paviršiaus pasyvacijos procesai, kuriuose naudojami Ce oksidai, yra ilgai trunkantys bei nusodintos dangos pasižymi struktūrinių defektų gausa [1, 2]. Pagrindinis šio darbo tikslas - elektrochemiškai nusodinti aukštos kokybės, savaiminiu užgijimu pasižyminčias Ce oksidines dangas, tinkamas aktyviai cinkuoto plieno korozinei apsaugai.

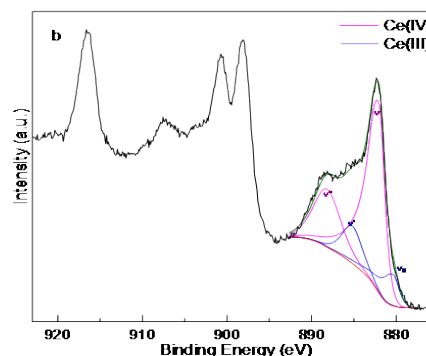
Ce oksidinės dangos buvo nusodinamos ant elektrolitiniu Zn padengtų plieninių elektrodų, naudojant 0,1 M $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ elektrolitą su ir be polietilenglikolio (PEG) priedu, keičiant katodinės srovės tankį intervale nuo 0,5 iki 2 $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ bei proceso trukmę nuo 3 iki 20 min. Ce dangų sudėties ir struktūros charakterizavimui buvo taikomi SEM, EDS, XPS, XRD bei Ramano spektroskopijos metodai, elektrocheminė elgsena įvertinta taikant voltamperometriją bei EIS matavimus.

XRD tyrimai parodė, kad nusodintos Ce oksidinės dangos yra sudarytos pagrindinai iš CeO_2 bei galimai, hidratuotų cinko hidroksidų $\text{Zn}(\text{OH})_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ir nedidelio kiekio ZnO. Pagal Zn difrakcinių smailių intensyvumas bandinį su PEG dengia storesnis CeO_2 sluoksnis. Bandinyje be PEG CeO_2 kristalitų dydis $2,2 \pm 0,4$ nm, o bandinyje su PEG jis beveik dvigubai mažesnis – $1,3 \pm 0,4$ nm. Paviršiaus morfologijos SEM tyrimai parodė, kad Ce oksidinės dangos yra sudarytos iš kristalintų „lapelių“ formos agregatų, kurių storis 25 - 40 nm, o plotis 400 - 800 nm. Ce dangų apsauginių savybių tyrimai parodė, kad mažiausi korozijos greičiai yra būdingi dangoms, nusodintoms iš elektrolito su PEG priedu. Joms taip pat yra būdingas mažiausias kristalitų bei kristalintų agregatų dydis, tankesnė jų struktūra, mažesnis struktūrinių defektų skaičius. Išskirtinė šių dangų savybė yra ta, kad akivaizdžiai galima išskirti kompaktišką tarpinį Zn oksidų sluoksnį, kurio storis siekia 500-600 nm ir kuris yra atsakingas už Ce dangos apsauginių savybių padidėjimą.

XPS tyrimai parodė, kad Ce(III) ir Ce(IV) santykis dangoje priklauso nuo elektrolito sudėties. Dangoje, nusodintoje elektrolite be organinio priedo Ce(III)/Ce(IV) santykis yra 50/50 %, tuo tarpu dangoje su PEG dominuoja Ce(IV) (santykis 70/30 %).

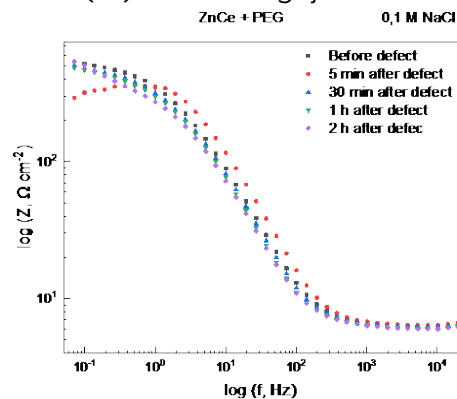


1 pav. ZnCe+PEG dangos skersinio pjūvio SEM vaizdas.



2 pav. ZnCe+PEG dangos Ce 3d_{5/2} XPS spektras.

EIS bei SEM tyrimai su dirbtinai mechaniškai pažeistais bandiniais parodė, kad Ce oksidinės dangos, nusodintos su PEG priedu savaiminio užgijimo gebėjimai yra geresni, kas siejama su didesnio Ce(IV) kiekiu dangoje.



3 pav. ZnCe+PEG dangos Bode diagramos.

Literatūra

1. M. Marín-Sánchez, E. Gracia-Escosa, A. Conde, C. Palacio and I. García, Materials. **11**, 2035 (2018).
2. Y. Yang, X. Du, Ch. Yi, J. Liu, Z. Zhang, Int. J. Electrochem. Sci., **12**, 5304 - 5319 (2017).

SAVITVARKIŲ MONOSLUOKSNIŲ SU IMIDAZOLO ŽIEDO FUNKCINE IR AMIDO GRUPĖMIS GRANDINĖJE TYRIMAS SHINERS METODU

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

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

²Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas,
Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos skyrius, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
el. p.: agne.zdaniauskiene@ftmc.lt

Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (ang. *SERS*) yra vienas informatyviausių tyrimo metodų, leidžiančių *in situ* vandeninėje terpėje gauti molekulinio lygmens informaciją apie medžiagos sandarą, struktūrą, atliekamas funkcijas bei nustatyti sąveikas tarp molekulinų grupių. Vis dėlto, tradiciškai paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija yra apribota Au, Ag ir Cu nanostruktūrinių paviršių tyrimais. Siekiant praplėsti metodo galimybes kitų metalų (Pt, Fe, Co) ir paviršių tyrimuose, 2010 metais buvo pasiūlyta nauja SERS technika (ang. *SHINERS*), kuomet panaudojamos Au ir Ag nanodalelės, apgaubtos kelių nanometrų SiO₂ sluoksniu (Au@SiO₂, Ag@SiO₂). Šiuo atveju, nanodalelės branduolys atlieka Ramano spektrų stiprintuvo vaidmenį, o silicio dioksido sluoksnis apsaugo nanodaleles nuo cheminės tarpusavio sąveikos ir tiesioginės sąveikos su tiriamuoju paviršiumi [1].

Histidinas yra reikšminga daugelio baltymų struktūrinė dalis ir dalyvauja įvairiose molekulinėse sąveikose. Histidino funkcinės grupės - imidazolo žiedo pK_a vertė neviršija fiziologinio pH, todėl žiedas gali būti protonuotas arba neutralios formos ir veikti kaip rūgštis ar bazė daugelyje fermentų.

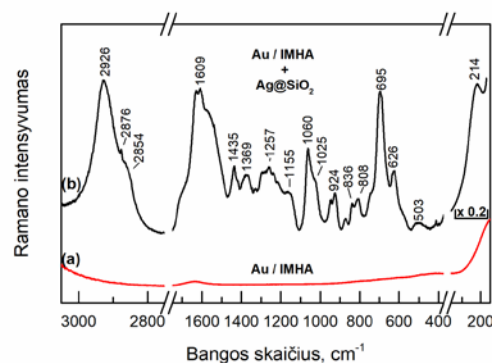
Savitvarkiai monosluoksniai (ang. *SAM*), suformuoti ant metalų iš tiolių, plačiai naudojami bioelektroninių prietaisų vystymo procese tiriant funkcinių grupių sąveikas su adsorbatais ar elektronų pernašą. SAM iš molekulių su histidino funkcinę grupę, įterpta amido grupę į angliavandenilinę grandinę ir su paviršiui aktyvia S-H grupe, suteikia galimybę tirti sąveikas tarp imidazolo žiedo ir kitų tirpale esančių komponentų.

Ekspimento metu tirtas savitvarkis monosluoksnis, suformuotas iš N-(2-(1H-imidazol-4-yl)ethyl)-6-mercaptohexanamido (IMHA), ant lygaus Au paviršiaus *in situ* vandeninėje terpėje SHINERS metodu. Tyrimui susintetintos sferinės formos, 85 ± 5 nm dydžio sidabro nanodalelės su išoriniu silicio dioksido sluoksniu (~ 3 nm). Pirma, redukuojant sidabro nitrata natrio citratu vandeninėje terpėje gauti sidabro branduoliai. Vėliau, sidabro paviršiaus

modifikavimui panaudotas (3-aminopropil) trietoksilanas (APTES), su kuriuo virinant skystas stiklas formuoja tankų SiO₂ tinklą [3].

Ramano sklaidos ir SHINERS spektrai registruoti dispersinio „Ešėlė“ (Echelle) tipo spektrometru RamanFlex 400 (PerkinElmer Inc., JAV) su termoelektriškai šaldomu (-50 °C) CCD detektoriumi kambario temperatūroje (20 ± 2°C). Spektrų sužadinimui ir Ramano sklaidos surinkimui naudotas šviesolaidinis kabelis. Diodinio lazerio, generuojančio žadinančią spinduliuotę, bangos ilgis 785 nm. Lazerinės spinduliuotės galia ties bandiniu 30 mW. Pasirinktas integravimo laikas 300 s.

Tyrimo metu pirmą kartą užregistruoti IMHA SHINERS spektrai (1 pav.). Remiantis gautais rezultatais identifikuota monosluoksnio struktūra bei įvertinta funkcija. Taip pat, nustatyta, kad spektrai, kuomet naudotos Ag@SiO₂ nanodalelės atsikartoja, virpesinių juostų dažniai nekinta bei neatsiranda papildomų juostų dėl cheminės sąveikos su dalelėmis.



1 pav. IMHA monosluoksnio Ramano spektras (a) be nanodalelių ant lygaus aukso paviršiaus ir IMHA monosluoksnio SHINERS spektras (b) su Ag@SiO₂ nanodalelėmis ant lygaus aukso paviršiaus.

Reikšminiai žodžiai: IMHA, Ag@SiO₂ nanodalelės, SHINERS

Literatūra

- [1] J.F.Li, Y. F.Huang, Y.Ding, Z.L.Yang, S.B. Li, X.S. Zhou, F.R. Fan, W. Zhang, Z.Y. Zhou, D.Y. Wu, B. Ren, Z.L. Wang, and Z.Q. Tian, *Nature* **464**, 392-395 (2010).

SELF-ASSEMBLING MONOLAYER (SAM) AND A MODEL MEMBRANE (tBLM) FORMATION OBSERVATION ON A GOLD SURFACE BY ATR-SEIRAS

Vaidas Pudžaitis¹, Martynas Talaikis², Gediminas Niaura¹

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

²Institute of Biochemistry, Life Sciences Center, Vilnius University, Saulėtekio av. 7, LT-10257 Vilnius, Lithuania.
email: vaidas.pudzaitis@ftmc.lt

Attenuated total reflection surface-enhanced infrared reflection absorption spectroscopy (ATR-SEIRAS) is a powerful tool for in-situ analysis of molecular phenomena at the nanostructured metal surface. Various processes can be monitored in the water environment and under electrode potential control. Even more, method's good signal-to-noise ratio provides the possibility to track the formation process of the self-assembled monolayers (SAMs).

a second step (Fig. 1B), we conducted the ethanol to water phase exchange and deposited the tBLM using multilamellar vesicle solution prepared from 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPC) and cholesterol [3].

We demonstrate, that ATR-SEIRAS can provide complementary and in some cases unique molecular level information to already widely used methods. We show that WC14 based SAM adsorbs at the nanostructured gold surface in 2-3

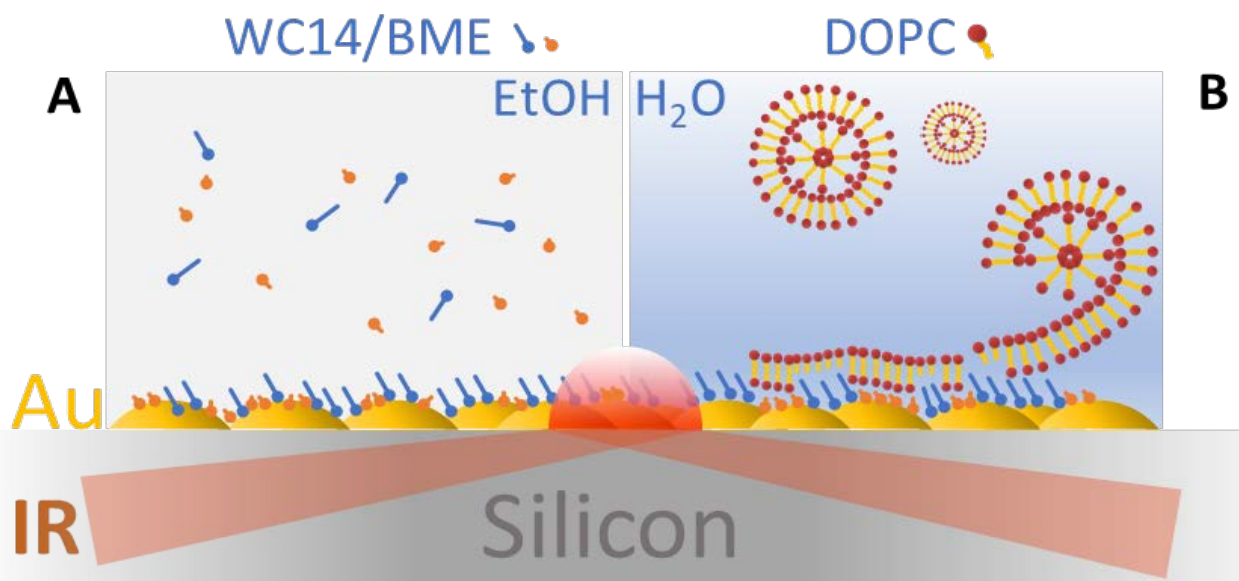


Fig. 1. ATR-SEIRAS experiment's schematic representation of SAM (A) and tBLM formation (B) on a gold surface.

We demonstrate the use of ATR-SEIRAS for monitoring a two-step preparation process of tethered bilayer lipid membrane (tBLM). The tBLMs are living-cell membrane mimicking constructions that are used for bio-sensing applications, and as a platform for fundamental studies of biological membranes. During the first step (Fig. 1A), anchoring SAM is formed on the nanostructured gold surface from lipid-like WC14 [20-tetradecyloxy-3,6,9,12,15,18,22-heptaaxahexatricontane-1-thiol] molecules and small molecular weight β -mercaptoethanol (BME) [1]. Gold surface was prepared by a relatively simple electroless plating procedure on a silicon hemisphere with a slight modification to the commonly described method in literature [2]. On

min., while the DOPC based tBLM is formed in 20 min. At the same time, solvent molecules are being pushed away from the surface at a similar rate for both SAM and tBLM structures. Additionally, we see that phase exchange from ethanol to water affects C-H stretching energy confirming an increasingly tighter interaction of SAM molecules in water environment.

References

- [1] R. Butvidyte et al; Langmuir **29** (2013) pp. 8645–8656.
- [2] H. Miyake, S. Ye, M. Osawa; Electrochemistry Communications **4** (2002) pp. 973–977
- [3] T. Ragaliauskas, M. Mickevicius, B. Rakovska, T. Penkauskas, D. J. Vanderah, F. Heinrich, G. Valincius; Biochimica et Biophysica Acta **1859** (2017) pp. 669–678.

ELECTROCHEMICAL DEPOSITION AND MODIFICATIONS OF POLYPYRROLE

Raimonda Boguzaite¹, Vilma Ratautaite¹, Lina Mikoliunaite², Ernestas Brazys²,
Arunas Ramanavicius^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Material Science and Electrical Engineering,
Laboratory of Nanotechnology, Sauletekio av. 3, Vilnius LT-10257, Lithuania

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

raimonda.boguzaite@ftmc.lt

Electrochromism is very important for a wide range of materials such as screens, thermal modulators, smart windows and others [1]. Polypyrrole (Ppy) has electrochromic properties [2] and among conducting polymers has the most intensively been investigated due to a low price of pyrrole as a monomer, a relatively low oxidation potential and simple tuning of formed film characteristics by doping with selected ions.

Conducting polymer – polypyrrole, has been employed for the various electrochemical applications including electrochromic sensors [1]. Moreover, Ppy is very common object in many electrochemical studies because it is easy synthesizable. Polypyrrole can be obtained by chemical polymerization, chemical vapor deposition (CVD), or electrochemical polymerization [1,3]. Physical properties of chemically synthesized conductive polymers, such as particle size and morphology, can be controlled by optimizing the synthesis conditions [4].

The advantage of electrochemical polymerization is a possibility to cover electrodes by films made of conductive polymers and/or their composites with high conductivity. Moreover, the electrochemical polymerization method meets the requirements of the green chemistry and, therefore, it is preferable to take care of nature conservation in scientific work [5].

Other often-used methods for the modification of optoelectronic properties of Ppy are a copolymerization with several types of monomers and an application of monomers with different types substituting groups on the pyrrole ring [6].

In this research, conducting polymer – polypyrrole (Ppy), was electrochemically polymerized on the indium tin oxide coated glass (glass/ITO) electrode and modified with different additives.

The purpose of the ITO surface modification with silane was to improve adhesion of the

hydrophobic Ppy on the hydrophilic ITO. Results illustrate that the differences in conductivity of Ppy layers formed on glass/ITO_(bare) and glass/ITO_(TEMS) electrodes are significant.

Phenothiazine derivatives are biologically active compounds and also can be electrochemically polymerized. Combining polymers such as Ppy with phenothiazine derivatives (Methylene blue, thionine, azure A) is often the key to create electrochromic coatings with advanced properties, faster response, and responsive to the environmental changes [3,6]. Polymers and phenothiazine derivatives can be used in the manufacture of electrochemical devices, sensors, imaging [1,2].

References

1. R. Celiesiute, A. Ramanaviciene, M. Gicevicius, A. Ramanavicius, *Electrochromic Sensors Based on Conducting Polymers, Metal Oxides, and Coordination Complexes, Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 2019, Vol. 49, Issue 3, 195-208.
2. V. Ratautaite, G. Bagdziunas, A. Ramanavicius, and A. Ramanaviciene, "An Application of Conducting Polymer Polypyrrole for the Design of Electrochromic pH and CO₂ Sensors," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 166, no. 6, pp. B297-B303, 2019.
3. B. Liu, H. Cang, L. Cui, H. Zhang, *Electrochemical polymerization of methylene blue on glassy carbon electrode*, *Int. J. Electrochem. Sci.* 12 (2017) 9907-9913. <https://doi.org/10.20964/2017.10.49>
4. P. Moarref, M. Pishvaei, A. Soleimani-Gorgani, F. Najafi, *Synthesis of polypyrrole/indium tin oxide nanocomposites via miniemulsion polymerization*, *Des. Monomers Polym.* 19 (2016) 138-144. <https://doi.org/10.1080/15685551.2015.1124321>.
5. R. Viveiros, S. Rebocho, T. Casimiro, *Green strategies for molecularly imprinted polymer development*, *Polymers (Basel)*. 10 (2018). <https://doi.org/10.3390/polym10030306>.
6. R.M. Ion, F. Scarlat, F. Scarlat, V.I.R. Niculescu, *Methylene - Blue modified polypyrrole film electrode for optoelectronic applications*, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* 5 (2003) 109-115.

UNDERSTANDING OF BREATH VOCs PROFILE VARIATIONS FROM HEALTHY VOLUNTEERS

Adrian Vicent-Claramunt, Evaldas Naujalis

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

Thousands of Volatile Organic Compounds (VOCs) are emitted from the human body daily [1]. The sources of those VOCs might be endogenous or coming from external contamination. Most of the VOCs found inside our bodies are influenced by many parameters (age, time of the day, diet, body weight, habits, etc.) [2].

One of the main purposes for studying VOCs emission from humans is the detection of biomarkers for disease diagnosis and monitoring [3]. The presence of unexpected VOCs or even the variations of some of them could be a characteristic pattern of a disease. Understanding the VOCs profile from human emission is quite complicated due to the many parameters that can influence this profile.

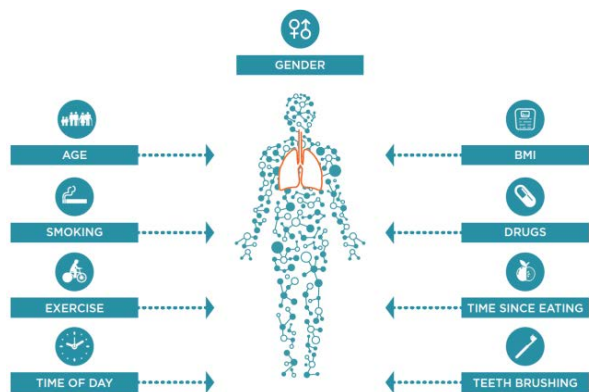


Fig. 1. Parameters that influence human's VOCs composition.

Firstly, we developed our own breath collection system using as an example all the methods currently available. Collection bag conditioning, sample volume and sampling time parameters were studied and optimized.

Breath samples from several volunteers, working in different locations were analysed. 2 samples were collected from each volunteer, first one in the morning, and the second in the afternoon. Air samples from the working places were also collected to check the possible influences on the VOCs composition.

After breath collection, the sample was pumped through a thermal desorption (TD)

tube to trap all the VOCs presents in it. Within 1 hour all samples were analysed using a TD system couple to a gas chromatography – mass spectrometer. Compound identification was obtained by library match (NIST mass spectral library).

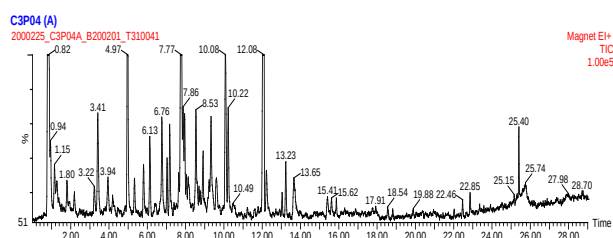


Fig. 2. Volunteer's collected breath analysis chromatogram.

All compounds identified from each participant were listed together with the intensity of each signal. Results then were compared for all volunteers and for each workplace. The questionnaire provided helped us to get some conclusions about personal exposures.

We can confirm that breath VOCs profile is highly influenced by many parameters, food consumption and external contamination among them.

References

1. Amann A, Costello B de L, Miekisch W, Schubert J, Buszewski B, et al. (2014) The human volatilome: volatile organic compounds (VOCs) in exhaled breath, skin emanations, urine, feces and saliva. J Breath Res 8: 034001. doi:10.1088/1752-7155/8/3/034001.
2. Blanchet L, Smolinska A, Baranska A, Tigchelaar E, Swertz M, et al. (2017) Factors that influence the volatile organic compound content in human breath. J Breath Res 11: 016013. doi:10.1088/1752-7163/aa5cc5.
3. Li J, Peng Y, Liu Y, Li W, Jin Y, et al. (2014) Investigation of potential breath biomarkers for the early diagnosis of breast cancer using gas chromatography-mass spectrometry. Clin Chim Acta 436: 59–67. doi:10.1016/j.cca.2014.04.030.

CHLORELLA VULGARIS DUMBLIŲ IR JŲ MIKROBIOME DOMINUOJANČIŲ BAKTERIJŲ TARPUSAVIO SĄVEIKA, AUTOTROFINIO KULTIVAVIMO METU

Kamilė Jonynaitė, Arūnas Stirkė

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

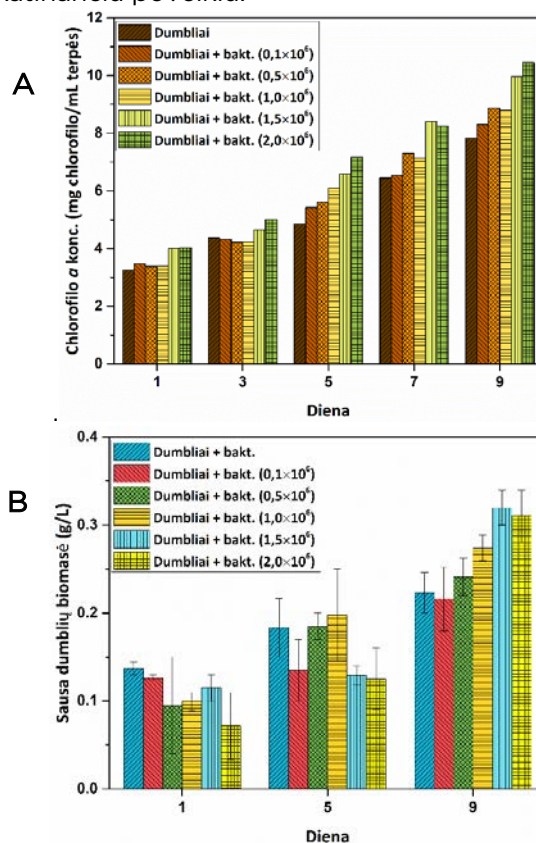
Susidomėjimas mikrodumbliai ir jų sintetinais produktais biotechnologijų, maisto, farmacijos ir energetikos pramonės sektoriuose nuolat auga. Pagrindinės to priežastys: itin greitai, nereikalaujanti dirbamos žemės plotų, dumblių reprodukcija bei gebėjimas sintetinti maistines medžiagas ir bioaktyvius junginius¹. Pavyzdžiui, *Chlorella vulgaris* mikrodumbliai, JAV maisto ir vaistų administracijos bei Europos maisto saugos tarnybos yra pripažinti saugiais ir naudojami kaip maisto ar jo sudedamųjų dalių, vitaminų, mikroelementų šaltinis². Tačiau, vykdamas komercinį mikrodumblių ir jų sintetinių produktų realizavimą vis dar susiduriama su iššūkiais. Dažnu atveju, užauginta mikrodumblių biomasės koncentracija yra per maža jog procesas taptų ekonomiškai atsiperkantis. Prie kultivavimo proceso efektyvumo mažėjimo prisideda didelės vandens išteklių ir mitybinių komponentų sąnaudos³.

Siekiant patenkinti mikrodumblių ir jų sintetinių junginių poreikį bei prieinamumą, vykdomas kultivavimo proceso optimizavimas. Vienas iš būdų, efektyviai sumažinti proceso kaštus ir skatinti mikrodumblių augimą – teigiamu poveikiu pasižyminčių mikroorganizmų naudojimas. Žinoma, jog tarprūšinę tarpusavio sąveikoje dalyvaujantys mikroorganizmai sintetina genus, vitaminus, maistines medžiagas ir kitus junginius, kurie gali paskatinti mikrodumblių reprodukciją net keletą kartų⁴.

Šiame darbe buvo pirmą kartą tyrinėta mikrodumblių *Chlorella vulgaris* ir *Delftia* sp. bakterijų tarpusavio sąveika. Šis bakterijų kamienas buvo išgrynintas iš *C. vulgaris* mikrobiomo. Bakterijų identitetas nustatytas filogenetinės (16S RNR geno sekvenavimas ir jo palyginimas NCBI Nucleotide BLAST duomenų bazėje) ir MALDI-TOF analizės metu.

Siekiant nustatyti mikroorganizmų tarprūšinės tarpusavio sąveikos pobūdį, buvo fiksuojami tiesioginiai ir netiesioginiai dumblių biomasės kitimai, kultivuojant *C. vulgaris* kartu su bakterijomis. Lyginant gautus rezultatus pastebėtas tendencingas dumblių biomasės prieaugis mėginiuose papildytuose bakterijomis. Pavyzdžiui, stacionarioje augimo fazėje, išskirta chlorofilo *a* koncentracija vidutiniškai buvo didesnė 26 %, mėginyje papildytame didžiausiu bakterijų

inokuliantu, nei kontroliniame. Pastaruosius rezultatus patvirtina sausos dumblių biomasės matavimai (žr. 1 pav.). Taigi, apibendrinant tyrimo rezultatus, buvo priimta išvada jog *Delftia* sp. bakterijos pasižymi teigiamu, *C. vulgaris* augimą skatinančiu poveikiu.



1 pav. (A) Išskirto chlorofilo *a* koncentracijos ir (B) nustatytos sausos *C. vulgaris* biomasės pokytis, kultivuojant mikrodumblis su skirtingomis *Delftia* sp. bakterijų koncentracijomis.

Literatūra

- Michael T. Madigan, Kelly S. Bender, Daniel H. Buckley, W. Matthew Sattley & David A. Stahl. *Brock Biology of Microorganisms, 15th Global Edition*. (2019).
- Ru, I. T. K., Sung, Y. Y., Jusoh, M., Wahid, M. E. A. & Nagappan, T. *Applied Phycology* **1**, 2-11 (2020).
- Gifuni, I., Pollio, A., Safi, C., Marzocchella, A. & Olivieri, G. *Trends in Biotechnology* **37**, 242-252 (2019).
- Ramanan, R., Kim, B.-H., Cho, D.-H., Oh, H.-M. & Kim, H.-S. *Biotechnology Advances* **34**, 14-29 (2016).

HYBRID TAMM-SURFACE PLASMON POLARITON MODE FOR HIGHLY SENSITIVE DETECTION OF PROTEIN INTERACTIONS

Ernesta Bužavaitė-Vertelienė¹, Ieva Plikusienė^{1,2}, Tomas Tolenis¹, Audrius Valavičius¹, Justina Anulytė¹, Arūnas Ramanavičius^{1,2} and Zigmas Balevičius^{1,3}

¹Center for Physical Sciences and Technology
Saulėtekio ave. 3, LT-10257 Vilnius, email: ernesta.verteliene@ftmc.lt

²Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geoscience
Universiteto str. 3, LT-01513, Vilnius

³Vilnius Gediminas Technical University, Faculty of Electronics
Saulėtekio ave. 11, LT-10223, Vilnius

Surface electromagnetic waves are a common tool for detection of biomolecules, one of which is the widely used optical biosensor based on surface plasmon resonance (SPR). This type of electromagnetic excitation allows a label free, highly sensitive real time monitoring of interaction between various biomolecules at solid/liquid interface [1]. The broad width of SPR excitation limits the detection sensitivity of such sensor due to the absorption and scattering losses in the metal. Reduction of losses can be achieved by employing the Tamm plasmon polariton (TPP). It is a surface electromagnetic wave generated at the interface of Bragg reflector (1D photonic crystal (PC)) and a thin metal layer. But because TPP is generated at the PC/metal interface, the sensing properties are poor compared with SPR. Thus in order to have a sensitive detector and reduce losses of the SPR a modified plasmonic system can be used, such as hybrid Tamm-surface plasmon polaritons (TPP-SPP) [2]. These type of hybrid excitations are generated in PC/metal structures that are attached to prism or grating coupler. The loss reduction in hybrid plasmonic mode was achieved due to the strong coupling regime between TPP and SPP excitations [3].

In this research two plasmon based sensors were used to investigate interaction of proteins: SPR and a hybrid Tamm-surface plasmon polaritons mode (Fig.1). The structure, used for the excitation of such hybrid TPP-SPP mode, consisted of 1D photonic crystal and thin (~40 nm) layer of gold. The PC consisted of 6 alternating

TiO₂ (~60 nm) and SiO₂ (~110 nm) bilayers. The structure described above was measured using total internal reflection ellipsometry (TIRE) and for the hybrid TPP-SPP mode a non-optimized and optimized configurations were used. The proteins used in this research were GCSF receptor and bovine serum albumin (BSA).

The sensitivity of SPR and TPP-SPP sensors for ellipsometric parameters Ψ and Δ were evaluated. The measurements conducted using GCSF-R in SPR sensor showed sensitivity of 0.66°/nm and 12.4°/nm for Ψ and Δ , respectively. As for the hybrid non-optimized system the sensitivity for the SPP component was higher for Ψ parameter and lower for Δ . In order to increase the sensitivity of the hybrid TPP-SPP sensor the system was optimized (Fig. 2). And as a result the sensitivity parameter $\delta\Delta/\delta\lambda$ for the hybrid SPP component in the optimized hybrid TPP-SPP system was 6.4 times larger than the single SPR.

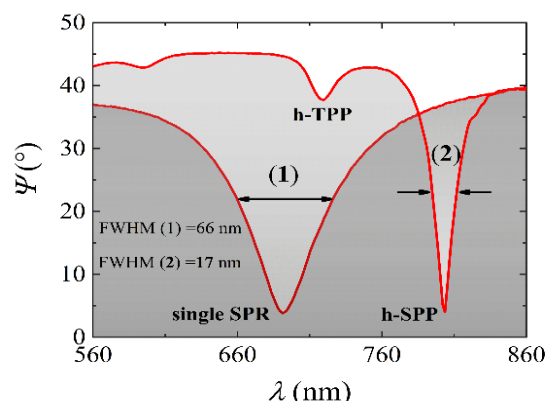


Fig. 2. Comparison of the plasmonic single SPR (1) and hybrid TPP-SPP (2) excitations spectra.

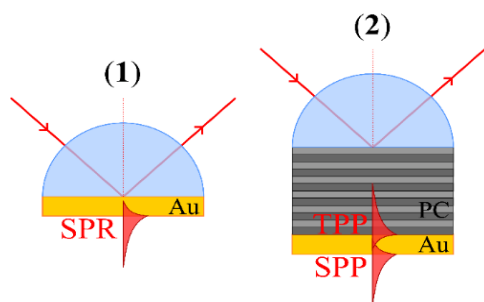


Fig. 1. Optical scheme of SPR (1) and hybrid TPP-SPP (2) plasmonic sensors in TIR geometry.

References

1. J. Homola, S. S. Yee and G. Gauglitz, Sens. Actuat. B-Chem. **54**, 3-15 (1999).
2. E. Buzavaite-Verteliene, I. Plikusiene, T. Tolenis A. Valavicius, J. Anulyte, A. Ramanavicius, Z. Balevicius, Opt. Express **28**(20), 29033 (2020).
3. E. Buzavaite-Verteliene, A. Valavicius, L. Grineviciute, T. Tolenis, R. Lukose, G. Niaura, Z. Balevicius, Opt. Express **28**(7), 10308 (2020).

RAUDONAI FLUORESCUOJANČIŲ BODIPY KLAMPOS JUTIKLIŲ FOTOFIZIKINĖS SAVYBĖS

Karolina Maleckaitė¹, Jelena Dodonova², Stepas Toliautas³,
Sigitas Tumkevičius², Aurimas Vyšniauskas¹

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

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

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

Klamos vaizdinimas mikroskopiniuose dariniuose gali suteikti naudingos informacijos apie difuzijos veikiamus procesus biosistemose. Klamos pokytis gali indikuoti aterosklerozės, diabeto ir Alzheimerio ligos vystymąsi. [1] Ypač patogus metodas klamos vaizdinimui yra klamai jautrių fluoroforų, dar vadinamų „molekuliniiais rotoriais“, panaudojimas. Vienas iš perspektyviausių, mikrokلامي tirti naudojamų molekulinį rotorių priklauso boro dipirometeno (BODIPY) grupės fluoroforams, kurie sužadinti fluorescuoja žalia spalva (1 pav. A, C). Modifikavus BODIPY molekulinį rotorių įmanoma sukurti raudonojoje fluorescencijos spektro srityje liuminescuojančius fluorofus. Puikiai žinoma, kad raudonieji ir infraraudonieji bangų ilgiai yra tinkamesni biologiniams tyrimams, nes ilgesnės bangos gali būti panaudojamos storesniuose biologiniuose bandiniuose, kur susiduriama su šviesos išsklaidymo problema. [2] Modifikuoti BODIPY jutikliai pasižymi didesne konjuguota sistema, didesniu Stokso poslinkiu bei galėtų būti geriau pritaikomi biologinių tyrimų terpėse. [3, 4].

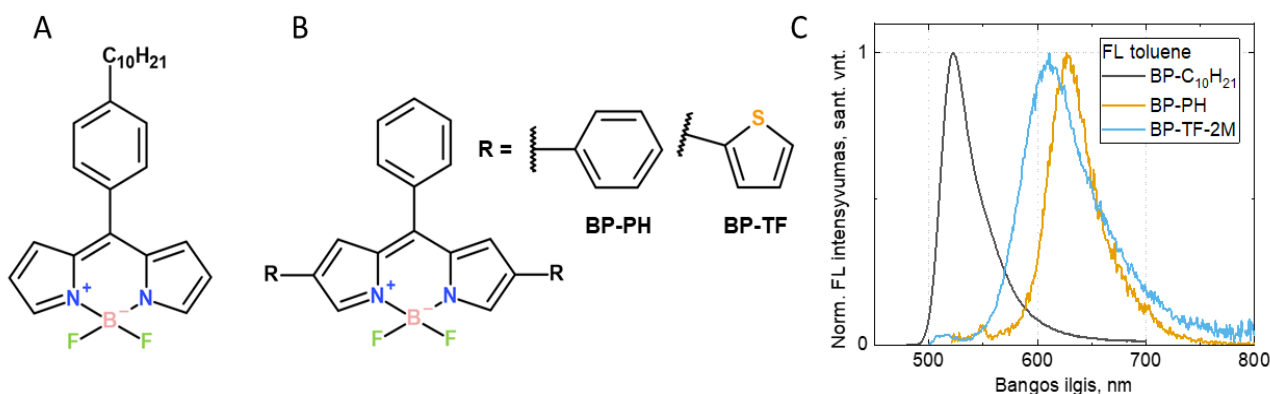
Šiame darbe tiriamos dvi molekulinį rotorių grupės (1 pav. B): su 2- ir 6- BODIPY pozicijoje

prijungtais fenilo (BP-PH) arba tiofeno (BP-TF-2M) pakaitais. Šių pakaitų prijungimas padidina molekulės konjugaciją ir pastumia fluorescencijos spektrą į raudoną pusę (1 pav. C), o tai labai svarbu biologiniams eksperimentams.

Tyrimą sudaro sugerties ir fluorescencijos spektrų analizė, taip pat fluorescencijos gyvavimo trukmių palyginimas. Įvertintas molekulių jautrumas klamos, tirpiklio poliškumo ir temperatūros pokyčiams. Spektroskopiniai tyrimai parodė, kad prie BODIPY 2- ir 6- pozicijose prijungus pakaitus matomas raudonas fluorescencijos spektrinis poslinkis abiemis molekulių grupėms. Tačiau prijungiant fenilo grupę sumažėja jautrumas klamai, o esant tiofenams - išauga jautrumas terpės poliškumui.

Literatūra

1. M. K. Kuimova, Phys. Chem. Chem. Phys. vol 14, no 37, p. 12671, 2012.
2. S. Toliautas et al., Chem. Eur. J., vol. 25, 44, p. 10342-10349, 2019.
3. Y. Chen et al., J. Org. Chem. vol. 77, 5, p. 2192-2206, 2012.
4. W. Che et al. Anal. Chem. 2019, 91, 3467–3474.



1 pav. Molekulinį rotorių struktūros: populiariausio jutiklio BODIPY-C10 (A) ir šiame darbe tiriamų jutiklių (B). Fluorescencijos spektrai: plačiai naudojamo BODIPY-C10 (BP-C10H21), BODIPY paremtų molekulinį rotorių su fenilo pakaitu (BP-PH) ir tiofeno pakaitu (BP-TF-2M) (C).

SAVAIMINIS DRŪKŠIŲ EŽERO VALYMOŠI NUO ANTROPOGENINĖS ^{14}C TARŠOS TYRIMAS

Algirdas Pabedinskas, Evaldas Maceika, Rūta Barisevičiūtė, Žilvinas Ežerinskis, Justina Šapolaitė, Laurynas Butkus, Laurynas Bučinskas, Laurynas Juodis, Vidmantas Remeikis

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

Neutronai sugeneruoti branduoliniame reaktoriuje, ne tik palaiko branduolinio dalijimosi reakciją, bet ir aktyvuoja įvairias medžiagas esančias reaktoriaus struktūroje. Viena iš tokių medžiagų yra radioanglis, kuri kaupiasi reaktoriaus konstrukcijos komponentuose, aušinimo skystyje ir valymo sistemose. Į aplinką dažniausiai patenka dujų ar skysčio pavidalu, kaip nuotėkis [1]. Ignalinos AE buvo eksploatuojami du RBMK-1500 tipo reaktoriai: 1 blokas – 1983 – 2004 metais, 2 blokas – 1987 – 2009 metais. Antropogeninė tarša radioanglimi iš Ignalinos AE kaupėsi vietinėje biosferoje dėka fotosintezės procesų, kurių metu augalai fiksuodami CO_2 molekules ir gamindami cukrų, užfiksuoja ir radioaktyvų anglies atomą turinčią $^{14}\text{CO}_2$ molekulę. Ignalinos AE projekte nebuvo įtraukti aeracinės aušinimo sistema bokštai, todėl pagrindinis perteklinės šilumos atidavimo rezervuaras buvo naudojamas Drūkšių ežeras. Ežeras buvo naudojamas kaip antrasis aušinimo kontūras, todėl tarša radioanglimi aptinkama ne tik sausumos biosferoje, bet ir ežero biosferoje.

Iš ežero dugno nuosėdų išgautos organinės frakcijos, buvo atliekami radioanglies koncentracijų matavimai, kurie leido nustatyti ^{14}C pokytį ežero ekosistemoje per visą branduolinės jėgainės eksploatavimo periodą [2]. 2019 metais giliausioje Drūkšių ežero vietoje buvo paimta dugno nuosėdų kolonėlė. Tam naudojamas buvo Kajak sunkio jėgos dugno nuosėdų grąžtas, kuris smigdamas į dugną, išpjauna taisyklingo apskritimo formos dugno nuosėdų stulpelį, kurio diametras 5 cm. Šis stulpelis padalijamas į 1 cm storio sluoksnius ^{14}C koncentracijos matavimams. Taikant rūgštis-šarmas-rūgštis ekstrakcijos metodą buvo išskirtos dvi organikos frakcijos, kurios vėliau buvo grafitizuojamos išgaunant grafitu padengtą metalo bandinį, tinkamą greitinuoto masių spektrometrijos tyrimams Vilniaus Radioanglies datavimo laboratorijoje.

Vienoje iš išskirtų frakcijų, humino rūgštyje, ties 2000 metais buvo pastebėtas žymus ^{14}C koncentracijos padidėjimas, kuris siekė net 60 pMC. Tuo tarpu humino frakcijoje, ^{14}C padidėjimas buvo mažesnis ir siekė 5 pMC. Nuo 2000 metų ^{14}C aktyvumo rodikliai ežero dugno nuosėdose stabiliai mažėjo, tai leido apskaičiuoti Drūkšių ežero savaiminio išsivalymo laiko periodą, kuris yra maždaug 1,49 metų.

^{14}C koncentracijų matavimai ežero dugno nuosėdose parodė ženklų Ignalinos AE poveikį Drūkšių ežero ekosistemai. 2000 metai yra vieni iš svarbiausių, nes tuo metu jau buvo atliekami branduolinės jėgainės reaktorių aptarnavimo darbai, kurių metu į aplinką galėjo patekti ^{14}C , kuris buvo pasisavintas vietinės biosferos tiek sausumoje tiek ežero vandenyje.

Literatūra

1. IAEA. 2004. Management of Waste Containing Tritium and Carbon-14. Vienna.
2. Brock F, Higham T, Ditchfield P, Ramsey CB. 2010. Current pretreatment methods for AMS radiocarbon dating at the Oxford radiocarbon accelerator unit (ORAU). Radiocarbon 52: 103–112.

^{99m}Tc RADIONUKLIDINIO GRYNUMO NUSTATYMO METODŲ PALYGINIMAS

Kirill Skovorodko^{1,2}; Arūnas Gudelis²

¹Vilniaus universiteto ligoninė Santaros klinikos, Santariškių g. 2, LT-08661 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Metrologijos skyrius
Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius, el. p.: kirill.skov@gmail.com

Radiofarmaciniai junginiai – vaistiniai preparatai, kurių sudėtyje yra radionuklidų ir farmacinių junginių, pasižyminčių tam tikromis biocheminėmis savybėmis, skirtų diagnostikai ar terapijai. Radiofarmacinių junginių kokybės kontrolė atliekama vadovaujantis Lietuvos higienos norma HN 77:2002 „Radiacinė sauga branduolinėje medicinoje“ [1]. Dažniausiai ^{99m}Tc gaunamas naudojant branduolinius reaktorius apšvitinant neutronų srautu ⁹⁸Mo taikinį ir vėliau gaunant ⁹⁹Mo/^{99m}Tc generatorių. Darbo tikslas buvo įvertinti ^{99m}Tc radionuklidinį grynumą skirtingais metodais.

Palyginamųjų matavimų metu buvo panaudoti du metodai: „Mo Breakthrough“ testas molibdeno kiekiui nustatyti su Vilniaus universiteto ligoninės Santaros klinikų aktyvumo matuokliu Veenstra VDC-405 (1 pav.) ir FTMC Jonizuojančiosios spinduliuotės metrologijos laboratorijos γ spektrometrijos įranga (2 pav.) su germanio detektoriumi (HPGe). Naudojant pirmą metodą ⁹⁹Mo apskaičiuojamas pagal formulę 1. Eliuato buteliukas įdedamas į švino konteinerį (~6 mm storio sienelėmis), kuris sustabdo 140 keV energijos fotonus ir registruojama tik virš 740 keV energijos fotonai (pagrindė ⁹⁹Mo), vėliau šitas santykis palyginamas:

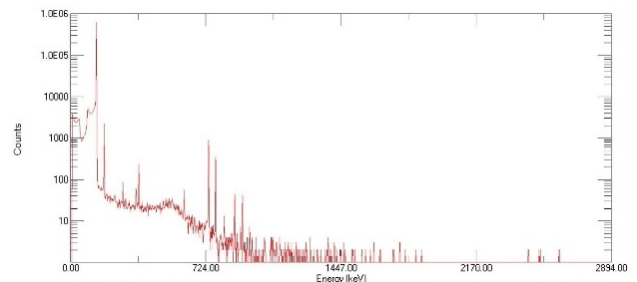
$$\text{Mo-99 breakthrough} = \frac{(\text{Mo-99 radioactivity} - \text{Mo-99 background}) \times 2}{\text{Tc-99m radioactivity} - \text{Tc-99m background}} \quad (1)$$

Tokių tyrimų pagrindinis tikslas yra įvertinti radionuklidinį grynumą ir įsitikinti, kad vadovaujamas rekomendacijomis ir reikalavimais [1-3]. Jeigu naudojamas radiofarmacinis preparatas su padidėjusiu kiekiu priemaišų, nukenčia radiofarmacinių preparatų kokybė, tai turi įtakos tyrimo vaizdams ir padidėja pacientų ir darbuotojų apšvita jonizuojančiąja spinduliuote.

1 lentelė. ^{99m} Tc radionuklidinio grynumo nustatymo rezultatai		
	γ spektrometrija, ⁹⁹ Mo priemaišų %	Breakthrough testas, ⁹⁹ Mo priemaišų %
1.	0,00408	0,08
2.	0,00033	0,001
3.	0,00039	0,001
4.	0,00026	0,005
5.	0,00447	0,004



1 pav. Ligoninėje naudojama įranga radionuklidiniam grynumui nustatyti.



2 pav. Gama spektro pavyzdys.

Atlikti tyrimai parodė (1 lentelė), kad ^{99m}Tc radionuklidinis grynumas buvo didesnis negu 99,9%. Pagal tarptautines rekomendacijas ⁹⁹Mo priemaišų turi būti <0,1% [3].

Literatūra

1. Lietuvos HN 77:2015 „Radiacinė sauga branduolinėje medicinoje“, 2002 m. gruodžio 17 d. įsakymu Nr. 642.
2. Gopal B. Saha. Fundamentals of Nuclear Pharmacy Sixth Edition, Springer. 2010. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-5860-0>
3. Europe, C.o. (2013). European Pharmacopoeia. Strasbourg: Directorate for the Quality of Medicines & HealthCare of the Council of Europe (EDQM).

LUMINESCENT PROPERTIES OF GaAsBi QUANTUM WELLS

Evelina Dudutienė, Algirdas Jasinskas, Simona Pūkienė, Sandra Stanionytė,
Bronislovas Čechavičius, Renata Butkutė

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

Bismide-based material systems are an attractive candidate to develop GaAs-based applications for long wavelength optoelectronics, such as infrared lasers [1], photodetectors [2], solar cells [3], terahertz devices [4] etc. In order, to design and optimize these devices it is essential to know their optical properties, electronic structure, nature of defects, the emission channels, and the efficiency of carrier recombination. In recent years, luminescent properties of GaAsBi quantum wells (QW) are extensively studied. Though, not all questions are clearly answered.

This work presents a temperature- and excitation-dependent photoluminescence (PL) study of GaAsBi QWs with different barrier layers grown by molecular beam epitaxy (MBE) and migration enhanced epitaxy (MEE).

Temperature-dependent PL measurements revealed that PL band associated with radiative transitions in GaAsBi QWs has an inner structure, which for some samples can be clearly seen at low-temperatures (1 fig.). Moreover, temperature-dependence of PL peak energy position was

analysed using Varshni expression [5]. A broad PL peak at room temperature together with S-shape character of PL peak position variation with temperature indicated effect of carrier localisation. As further matter, activation energies derived from PL measurements provided in-sight into thermal quenching of luminescence processes. Finally, the influence of the barrier layer on the optical emission from electronic states in the GaAsBi QWs are also presented in this work.

References

1. X. Wu, et al.; *ACS Photonics* **4**(6,) 1322-1326 (2018)
2. Y. Gu, R. D. Richards, J. P. David, and Y. Zhang; Dilute Bismide Photodetectors. In *Bismuth-Containing Alloys and Nanostructures*, Springer (2019) pp. 299-318.
3. A. Muhammetgulyyev, O. G. Erbas, B. Kinaci, O. Donmez, Y. G. Celebi and A. Erol; *Semiconductor Science and Technology* **34**(8) (2019) pp. 085001.
4. M. Karaliūnas, A. Udal and G. Valušis; *Lithuanian Journal of Physics* **60**(2) (2020).
5. Y. P. Varshni; *Physica* **34**(1) (1967) pp. 149-154.

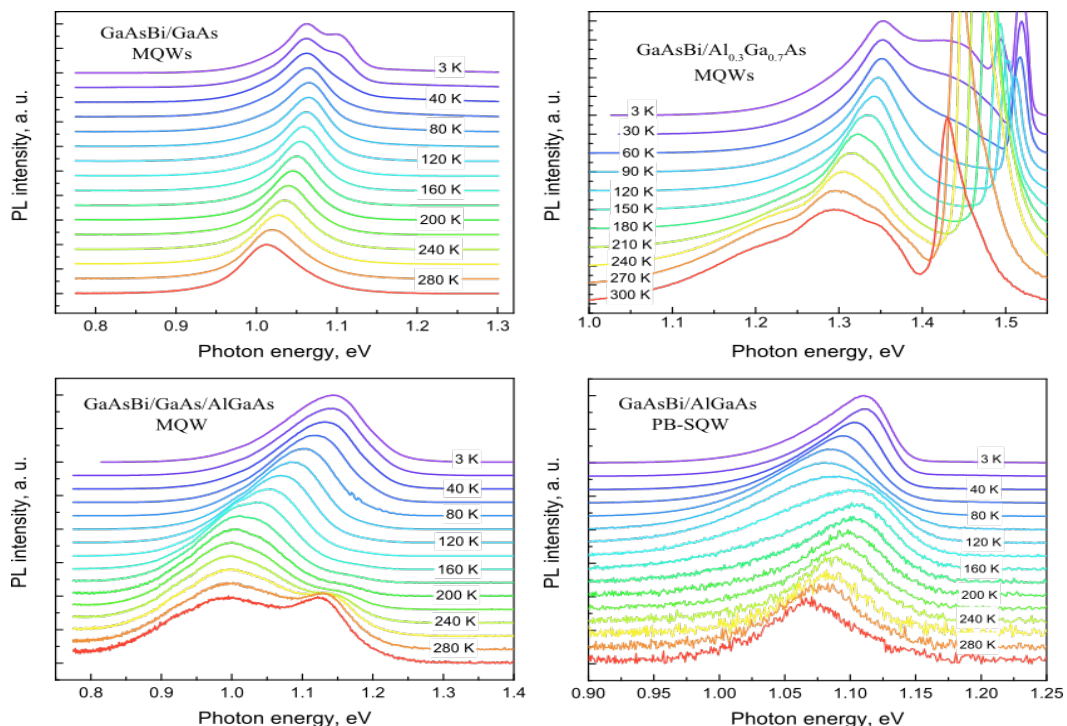


Fig. 1. Temperature-dependent photoluminescence spectra of GaAsBi/GaAs:Be multiple quantum wells.

NETIESINIS MIKROBANGŲ ATSAKAS GaAs/AlGaAs SUPERGARDELĖSE

Vladislovas Čižas, Liudvikas Subačius, Kirill N. Alekseev ir Gintaras Valušis

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

Terahercinės ir subterahercinės spinduliuotės savybės bei jos galimi taikymai vaizdinimo, medžiagų diagnostikos bei naujos kartos ryšio sistemose skatina ieškoti naujų sprendimų, kuriant kompaktiškus, kambario temperatūroje veikiančius kietakūnius elektriškai kaupinamus spinduliuotės šaltinius ir jutiklius. Šiuolaikiniai, jau egzistuojantys sprendimai, tokie kaip kvantiniai kaskadiniai lazeriai, negali pilnai atitikti visų reikalavimų, diegiant juos į praktikoje naudojamas mažų matmenų sistemas, nes neveikia kambario temperatūroje, todėl reikalinga naujų būdų, besiremiančių kitokiais fizikiniais principais spinduliuotei stiprinti ar generuoti, paieška.

Šiame darbe pateikiami parametrinio stiprinimo siliciu legiruotose GaAs/AlGaAs puslaidininkinėse plačios minijuostos supergardenelėse eksperimentinio tyrimo rezultatai. Nors parametriniai generacijos bei harmonikų ir subharmonikų stiprinimo procesai supergardenelėse, kurios yra veikiamos kintančio elektrinio ir nuostovaus elektrinio lauko, yra gerai žinomi ir teoriškai paaiškinti [1,2], eksperimentinio parametrinio stiprinimo įrodymo iki šiol nebuvo.

Supergardenelių mezos buvo patalpintos į bangolaidžius ir parametriškai kaupinamos 8.45 GHz dažniu, esant įvairiai pridėti įtampai. Dėl Esaki ir Tsu netiesiškumų [3], susijusių su elektronų neigiamu diferencialiniu laidumu, jos veikė kaip parametriniai stiprintuvai.

Atliekant nestipriai legiruotos GaAs/AlGaAs supergardenelės spektrinio atsako matavimus, mikrobangų ruože buvo stebima ne tik harmonikų generacija, bet ir jų trupmeniniai dažniai (1. pav), kuriuos pavyko susieti su žadinančio AC elektrinio lauko dažniu pagal:

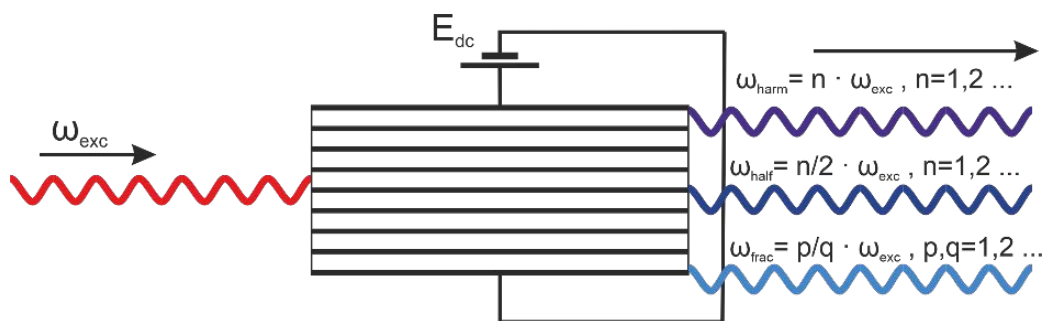
$$n\omega_{exc} = \frac{p_1}{q_1} \omega_{exc} \pm \frac{p_2}{q_2} \omega_{exc}$$

formulę, kur n , $p_{1,2}$, ir $q_{1,2}$ yra sveiki skaičiai.

Šio dažnių generacijos efektai siejami su paaiškinami Esaki-Tsu netiesiškumu supergardenelėse bei teoriškai paaiškinti [4,5].

Literatūra

1. T. Hyart, A.V. Shorokhov and K.N. Alekseev, PRL **98**-22, 220404 (2007).
2. T. Hyart, N.V. Alexeeva, A. Leppanen and K.N.Alexeev, APL **89**, 132105 (2006).
3. L. Esaki, and R. Tsu, IBM Journal of Research and Development **14**-1, 61-65 (1970).
4. Y.A. Romanov and J.Y.Romanova, JETP **91**-5, 1033-1045 (2000).
5. J. Isohäätä and K.N. Alexeev, PhD Thesis arXiv:1201.6280, University of Oulu, (2012).



1 pav. Netiesinis dažninis atsakas supergardenelėse

INFLUENCE OF A3-B5 QW STRUCTURES ON PARAMETERS OF NIR LIGHT EMITTING DEVICES

Simona Pūkienė, Algirdas Jasinskas, Virginijus Bukauskas, Vladimir Agafonov, Mindaugas Kamarauskas, Algimantas Lukša, Andrius Bičiūnas, Bronislovas Čechavičius, Arūnas Šetkus and Renata Butkutė

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

A3-B5 family semiconductors, especially Bi containing GaAs compound provide a promising concept for near-infrared light emitting devices: including lasers for optical fiber communications (1.3 μm and 1.55 μm), undersea, space, and high-data-rate applications (780 nm – 830 nm).

Light emitting devices structures were grown by molecular beam epitaxy (MBE) using Veeco GENxplor R&D reactor on n-GaAs substrate. To optimize the structure for applications as an active area in infrared light emitting devices, the complex investigation of influence of structure geometry (QW number, thickness, QW and barrier material) on light emitting devices parameters was performed. Since our previous work revealed that room temperature photoluminescence (RT-PL) can be increased by more than 50 times in the GaAsBi QWs using parabolic graded barriers, compared to standard rectangular quantum well (RQW) structures [1], two-design structures were epitaxially grown and characterized. Laser diodes were processed by a UV photolithography. The metal contacts were coated by e-beam deposition on top and bottom sides of laser crystal. Full edge emitting laser structure is depicted in fig 1.

In this work, the comparative study of light emitting devices containing PQW and RQW structures was performed to clarify the role of architecture and to establish the key parameters. The material system and device active region concepts was verified and the report of the latest achievements, such as enhanced photoluminescence measurements is presented. Light emitting devices were characterized by measurements of RT-PL, current-voltage (I-V) and current-power (I-P) behaviors. The electroluminescence (EL) spectra measured in temperature range of 15 $^{\circ}\text{C}$ - 30 $^{\circ}\text{C}$ for laser diode with single PQW and multi-RQW exhibiting lasing properties in near infrared region.

The authors gratefully acknowledge support from the Central Project Management Agency grant 01.2.2-CPVA-K-703-03-0019.

References

1. S Pūkienė, et al. Nanotechnology, Vol. 30, 455001 (11pp) (2019).

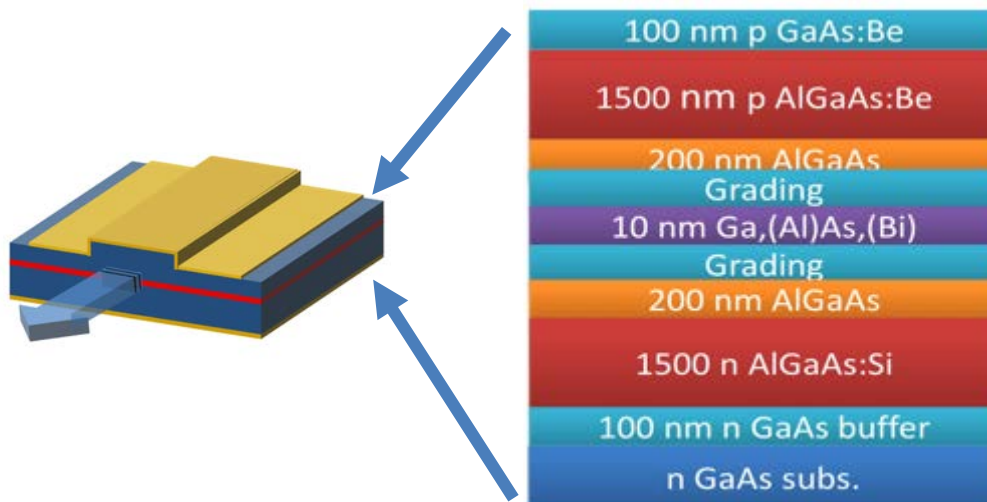


Fig. 1. Edge emitting laser diode structure grown by MBE

INVESTIGATION OF ELECTRICAL PERFORMANCE OF BUFFER-FREE ALGaN/GaN HETEROSTRUCTURE ON SiC SUBSTRATE

Justinas Jorudas, Artūr Šimukovič, Irmantas Kašalynas

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

The AlGaN/GaN high electron mobility transistor (HEMT) structures formed on SiC substrates are widely used for high power and high frequency applications. Conventionally in HEMTs, AlN nucleation layer (NL) in tandem with thick GaN buffer layer are used to grow the III-nitride layers on foreign substrates. Though, thermal resistance between the AlN NL and thick GaN buffer together with lower crystalline quality of buffer layer can restrict the dissipation of heat to the substrate [1]. This could be mitigated with thin-HEMT (T-HEMT) heterostructures which were developed of buffer-free GaN-SiC hybrid material with enhanced properties of the thermal dissipation [2]. In this work, we study electrical performance of the T-HEMT devices such as Schottky barrier diodes (SBDs) and T-HEMTs designed for operation from DC up to radio frequency (RF) range [3].

The DC current-voltage characteristics of Ni/Au metal stack SBDs were investigated. In the reverse bias, the breakdown voltages were measured revealing the maximum lateral breakdown field of 0.78 MV/cm for 5 μ m spacing between contacts. Furthermore, SBDs demonstrated a 50 dB ON-OFF current switching ratio at low voltages, which decreased by 15 dB with the increase of reverse voltage prior to the breakdown.

DC output and transfer characteristics were investigated for different design T-HEMTs. Typical output performance of T-HEMT with 2x0.2 mm channel width is shown in Fig. 1 (a). Summarizing, T-HEMTs exhibited current density and transconductance values up to 0.5 A/mm and 154 mS/mm, respectively. At high electrical input power, the T-HEMTs demonstrated a considerably smaller reduction of drain current in a deep saturation regime. This was attributed to efficient heat removal from T-HEMT devices fabricated of the GaN-SiC hybrid material. The low frequency noise characterization of T-HEMTs allowed us to extract effective trap density [4]. It was found to be in the range of 10^{19} - 10^{20} cm⁻³eV⁻¹ for our HEMTs. The Fig. 1 (b) shows RF

characterization of T-HEMTs. The unity current gain cut-off frequency (f_T) of 1.33 GHz was obtained, resulting in the figure of merit $f_T \times L_G$ value 6.7 GHz $\cdot$ μ m, comparable to previously reported [5].

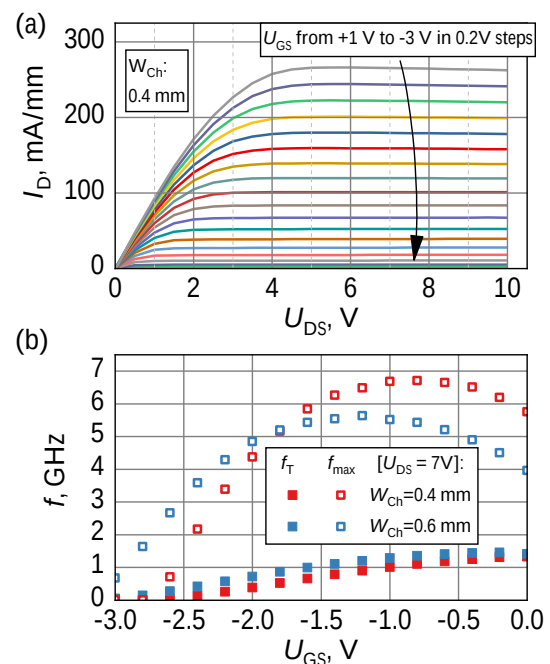


Fig 1. DC and RF performance of T-HEMTs: (a) DC output characteristics of 2x0.2 mm wide T-HEMT, (b) RF performance of 2x0.2 mm and 2x0.3 mm wide T-HEMTs

Acknowledgement:

This research was supported by the Research Council of Lithuania (Lietuvos mokslo taryba) under the “TERAGANWIRE” project (Grant no. S-LL-19-1). The authors also acknowledge Prof. Sergey Rumyantsev for his help with noise measurements.

References

- [1] A. Manoi, J. W. Pomeroy, N. Killat, and M. Kuball, *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 31, no. 12, pp. 1395-1397, Dec. 2010.
- [2] J.-T. Chen *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 113, no. 4, p. 041605, Jul. 2018.
- [3] J. Jorudas *et al.*, manuscript in preparation 2020.
- [4] P. Sai *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 115, no. 18, p. 183501, Oct. 2019.
- [5] D.-Y. Chen *et al.*, *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 41, no. 6, pp. 828-831, Jun. 2020.

TIME-DOMAIN SPECTROSCOPY OF TWO-DIMENSIONAL PLASMONS IN AlGaIn/GaN HETEROSTRUCTURES

Daniil Pashnev, Tommi Kaplas, Vadym Korotyeyev, Vytautas Janonis,
Andrzej Urbanowicz, Justinas Jorudas and Irmantas Kašalynas

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

The terahertz (THz) frequency range for many decades has attracted scientists and engineers which demonstrated various new applications of THz technology in security, telecommunication, medicine and materials science [1]. The many THz applications require compact, solid-state devices with the electrical tuning of their performance which are capable to emit, detect and modulate THz waves. A promising solution in this area is associated with resonant excitation of the plasma oscillations in low-dimensional systems at the presence of metallic plasmonic elements [2-3]. Exclusive electrical robustness together with relatively high electrons mobility makes III-nitrides heterostructures an excellent candidate for operation in the THz range. In a number of works, the excitation of a grating-gated two-dimensional (2D) plasmons and their emission at the resonant frequencies has been demonstrated by a Fourier transform infrared spectroscopy only [2-3]. Meanwhile, THz time-domain spectroscopy is a powerful technique used to investigate the material properties (complex dielectric constant and refractive index dispersion) measuring both signal amplitude (power) and phase spectra in transmission and reflection geometry [4].

In this work, we studied power and phase transmission spectra of the grating-gated AlGaIn/GaN heterostructures by using a commercial TeraVil T-SPEC 800 THz time-domain spectroscopy system in the frequency range 0.1-4 THz. The samples were fabricated of standard AlGaIn/GaN high electron mobility structures grown on a 500- μ m-thick semi-insulating 6H-SiC substrate by the metalorganic chemical vapour deposition method. The metal grating was deposited on the surface of AlGaIn/GaN HEMT heterostructures. The area size and filling factor of the grating was 2x2 mm and 50%; respectively. The period of the grating was varied from 600 nm to 1000 nm for different samples. A liquid nitrogen cryostat with THz windows was used to study the temperature dependences of the transmission spectra in the range 90-300 K. The signals transmitted through the empty cryostat and through the sample, in nitrogen purged environment, was used to obtain the complex transmission coefficient.

The excitation of the 2D plasmons under the grating was demonstrated in all samples. The

features were perceived as the emergence of distinctive minimum and inflection point in the power and phase transmission spectra, respectively. The resonant features were observed in the power and phase transmission spectrum at frequencies ranging from 1.0 THz to 2.5 THz. More precisely, at 90 K temperature, the sample with the grating period of 1000 nm and 600 nm demonstrated the well-resolved peak at the frequency of 1.4 THz and 2.2 THz, respectively [5]. Due to resonant THz radiation coupling, the deviation from a nominal value of transmitted power and phase was found up to 30 % and 8 deg, respectively. The spectral position and quality factor of the resonances were depended on the grating period and the temperature, respectively. The decrease in the grating period blue-shifted the peak position. The resonant frequency of 2D plasmons was found inversely proportional to the grating period [5], a similar dependence on the grating period was demonstrated in Ref. 3. The quality factor was reduced with the increase of the temperature. The change was attributed to the decrease of 2D electrons gas mobility with the increase of the temperature in consistence with the previous report [2]. In our report, detail analysis of the complex transmission coefficient simulated in the framework of the rigorous solution of the Maxwell equations [6, 7]. Comparison of theoretical and experimental results allowed us to link 2D plasma resonances with the parameters of two-dimensional electron gas (2DEG) in AlGaIn/GaN HEMT structures, such as 2DEG density, mobility, and effective mass [8].

Acknowledgement:

This research was supported by the Research Council of Lithuania (Lietuvos mokslo taryba) under the "TERAGANWIRE" project (Grant no. S-LL-19-1).

References

1. Yun-Shik Lee. Principles of Terahertz Science and Technology. — Springer, 2009.
2. A.V. Muravjov et. al., Appl.Phys.Lett. **96**, 042105 (2010).
3. V. A. Shalygin et. al. J. Appl. Phys. **126**, 183104 (2019).
4. I. Pupeza et. al., Opt. Express **15**(7), 4335 (2007).
5. D. Pashnev et. al., Appl. Phys. Lett. **117**, 051105 (2020).
6. S. A. Mikhailov, Physical Review B, **58**(3), (1998).
7. V.V. Korotyeyev et al, SPQEO **22**(2), 237-251 (2019).
8. V.V. Korotyeyev et al, under submission (2020).

OPTINĖ GRAFENO SLUOKSNIŲ MODULIACIJA

Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė¹, Dalius Seliuta¹, Domas Jokubauskis¹, Linas Minkevičius¹, Ieva Matulaitienė², Žilvinas Andrius Kancleris³, Andrzej Urbanowicz¹, Gintaras Valušis¹

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

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

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

Terahercų (THz) fotonika yra viena aktualiausių optoelektronikos tyrimo kryptų. Pastaruoju metu vienas iš svarbiausių THz mokslo tikslų yra sukurti kuo labiau kompaktiškas THz spektroskopines bei vaizdinimo sistemas ir rasti naujus būdus spinduliutei valdyti [1,2]. Mažėjant sistemų matmenims, metalizacija nebėra tinkama, todėl reikalingos alternatyvios optiniams elementams tinkančios medžiagos. Vienas iš galimų sprendimų – anglies nanomedžiagos, tokios kaip grafenas.

Grafenas mechaniniu tvirtumu, puikiomis elektrinėmis, optinėmis ir šiluminėmis savybėmis lenkia visas nanomedžiagas. Dėl savo pranašumo jis plačiai taikomas daugybėje sričių, įskaitant terahercų (THz) optiką. Tačiau įprastai ši medžiaga THz spinduliutei yra beveik visiškai skaidri. Siekiant pagaminti optinį elementą, grafeno pralaidumas turi būti kontroliuojamas jį legiruojant optiniu, elektriniu arba cheminiu būdu [3]. Mūsų darbe pasirinktas optinės moduliacijos būdas.

Siekiant ištirti optinę grafeno moduliaciją, buvo pagaminti trys bandiniai. Pirmasis bandinys – grafeno monosluoksnis ant silicio padėklo (1GrSi). Manoma, jog pirmasis grafeno sluoksniu stipriai sąveikauja su kontakte esančia medžiaga, taip prarasdamas dalį savo savybių. Dėl šios priežasties buvo tiriamas antrasis bandinys su dviem grafeno sluoksniais ant Si padėklo (2GrSi). Trečiasis bandinys – aukštavaržis Si, kuris buvo naudojamas kaip etalonas bandiniams su grafenu.

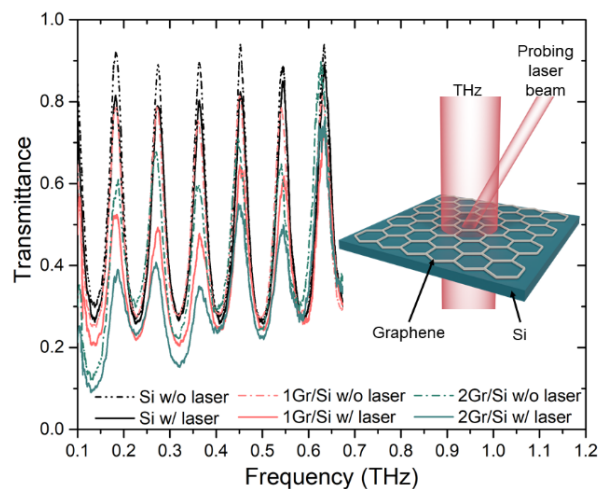
Patikrinus tiriamo grafeno kokybę naudojantis Ramano spektroskopija, toliau optinės moduliacijos tyrimams buvo pasitelktos dvi skirtingos THz sistemos. Optinė grafeno moduliacija pasiekama papildomai į bandinį šviečiant 666 nm bangos ilgio lazeriu.

Bandinių optinio pralaidumo spektrai išmatuoti THz spektroskopine sistema (1 pav.). Kiekvieno bandinio spektras matuojamas du kartus: be ir su optiniu žadinimu. Pasinaudojus gautomis pralaidumo vertėmis, ties skirtingais dažniais apskaičiuotas bandinių optinės moduliacijos gylys. Ties 0.36 THz dažniu 1GrSi bandiniui

pasiektas 36 %, o 2GrSi 42 % moduliacijos gylys. Tuo tarpu grynas Si pasižymėjo tik 11 % moduliacijos gyliu.

Taip pat, bandinių optinio pralaidumo pokytis įvertintas naudojantis THz nuostoviosios veikos vaizdinimo sistema (THz-CW). Naudotas pastovios spinduliuotės 0.3 THz šaltinis. Eksperimento rezultatai parodė aiškų optinio pralaidumo mažėjimą ties kiekvienu pridėtu grafeno sluoksniu bei didesnę moduliacijos gylį esant dviem grafeno sluoksniams.

Šiame darbe pademonstruota optinė grafeno sluoksnių moduliacija gali būti pritaikoma manipuliuojant grafeno pagrindu pagamintų optinių elementų veikimą.



1 pav. Tirtų bandinių optinio pralaidumo spektras. Grafiko dešinėje pavaizduota optinės moduliacijos metodo schema.

Literatūra / References

1. L. Minkevičius, S. Indrišius, R. Šniaukas, G. Račiukaitis, V. Janonis, V. Tamošiūnas, I. Kašalynas, G. Valušis, Lithuanian Journal of Physics **58**, 99-107 (2018).
2. R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė, L. Minkevičius, D. Jokubauskis, A. Urbanowicz, S. Indrišius, G. Valušis, Opt. Mater. Express **9**, 4438-4446 (2019).
3. P. Weis, J. L. Garcia-Pomar, M. Hoh, B. Reinhard, A. Brodyanski, M. Rahm, ACS Nano **6**, 9118-9124 (2012).

TERAHERCINĖS SPINDULIUOTĖS ŽADINIMO SPEKTROSKOPIJA

Ričardas Norkus, Ignas Nevinskas, Vaidas Pačebutas, Sandra Stanionytė,
Vytautas Karpus, Arūnas Krotkus

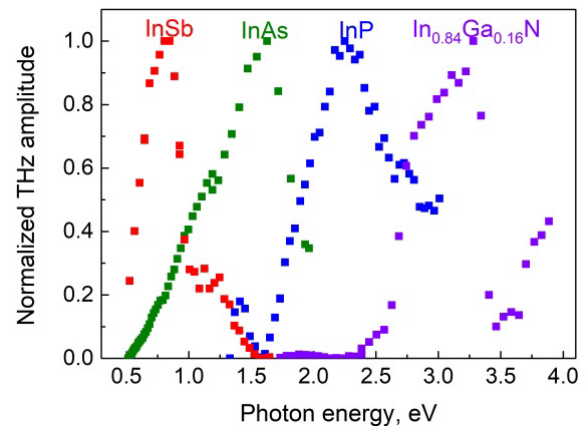
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: ricardas.norkus@ftmc.lt

Įvairios medžiagos žadinamos ultratrumpais lazerio impulsais generuoja impulsinę elektromagnetinę spinduliuotę, kurios dažnis yra teraherciniame (THz) diapazone. Šis efektas visų pirma buvo pastebėtas netiesiniuose kristaluose, o vėliau ir puslaidininkių medžiagų paviršiuose, kur generacija vyksta dėl sparčiai kintančių fotosrovių. Vėliau THz impulsų generacija buvo pademonstruota iš organinių kristalų, feromagnetinių ir feroelektrinių medžiagų ir struktūrų, bei perovskitinių medžiagų. Generacijos mechanizmai yra skirtingi įvairiuose prieš tai minėtose medžiagose.

Puslaidininkinėse medžiagose THz emisija vyksta dėl dviejų efektų – sugeneruoti krūvininkai yra veikiami paviršiuje esančių laukų, kurie sukuria sparčiai kintančią srovę, arba vadinamas foto-Demberio efektas kai balistiškai judantys elektronai erdvėje atsiskiria nuo skylių o atsiradęs laukas taip pat kuria sparčiai kintamą srovę. Dėl šių efektų puslaidininkis generuoja THz impulsus.

Kadangi impulsų generacija yra susijusi su elektronų judėjimu, dėl to keičiantys jų savybės THz spinduliuotės efektyvumas galėtų kisti. Tai leidžia tyrinėti puslaidininkinių medžiagų juostinę struktūrą. Šia technika vadiname THz emisijos spektroskopija (TES) Naudojantis šia technika galima nustatyti keletą juostinės struktūros parametrų: draustinių energijų tarpą, šoninio slėnio poziciją (1 pav.) [1,2], bei laidumo juostos trūkio vertę heterosandūruose [3].

Pastaruoju metu buvo tyrinėti bismidai. Tai puslaidininkiai su nedideliu bismuto kiekiu įvairiuose klasikiniuose puslaidininkiuose kaip GaAs ar InGaAs. Pastaruoju metu buvo tyrinėjamos InGaAsBi/InP heterosandūros [4]. Juose nustatyta laidumo juostos trūkio vertė $Q=0,38$.



1 pav. TES spektrai :InSb, InAs ir InP nustatytos šoninio slėnio padėtys, InGaN laidumo juostos trūkis.

Taip pat pastaruoju metu buvo tyrinėtose pereinamųjų metalų dichalgonidai (TMD) ir GaSe. TMD medžiagose galime nustatyti tiesioginio tarpo vertes. GaSe yra heksagoninis kristalas dėl to buvo galima nustatyti ne tik šoninį slėnį, bet ir žemiau esančias valentines juostas dėl optinių atrankos taisyklių būtent šio tipo kristaluose.

Taigi, TES metodika leidžia tyrinėti puslaidininkinių juostinę struktūrą. Šios metodikos privalumas yra, kad tai bekontaktis metodas, be to nereikia kurti sudėtingų struktūrų šioms matavimams. Trūkumas yra tai jog tikslumas yra ribojamas lazerio impulso trukmės.

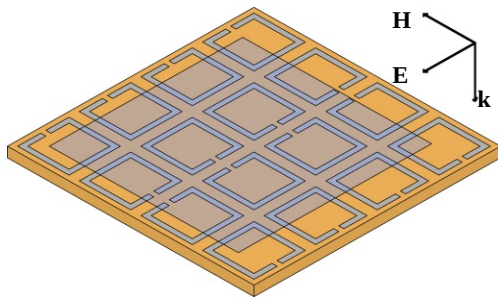
Literatūra

1. A. Arlauskas, A. Krotkus, Semicond. Sc. Technol., 27, 115015 (2012).
2. R. Norkus, A. Arlauskas and A. Krotkus, Semicond. Sci. Technol. 33 07501 (2018).
3. V. Karpus, R. Norkus, R. Butkute, S. Stanionyte, and A. Krotkus, Opt. Express, 26, 33807.
4. V. Pačebutas, R. Norkus, V. Karpus, A. Geizutis, V. Strazdienė, S. Stanionytė, A. Krotkus „Band-offsets of GaInAsBi-InP heterojunctions“, Infrared Physics and Technology , 109, 103400 (2020).

PLONO LAIDUS SLUOKSNIO ĮTAKA FANO REZONANSO AMPLITUDEI PERPJAUTŲ REZONANSINIŲ ŽIEDELIŲ MASYVE TYRIMAS

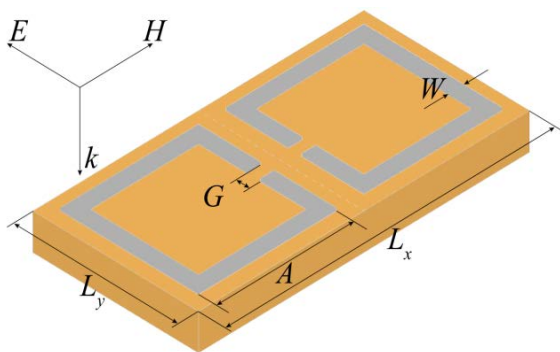
Andrius Kamarauskas, Gediminas Šlekas, Dalius Seliuta, Žilvinas Kancleris

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



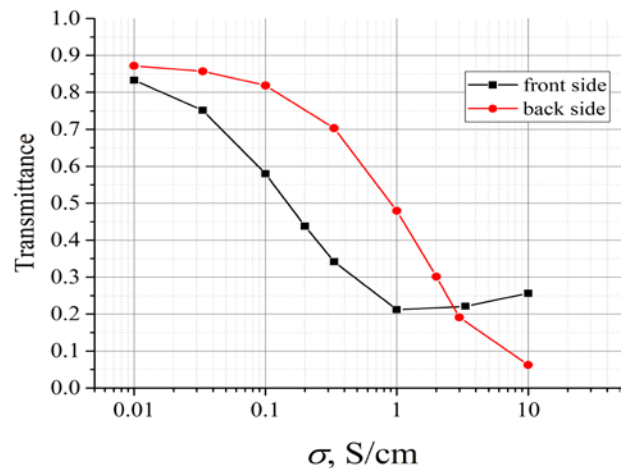
1 pav. Perpjautų veidrodžiškai orientuotų žiedelių masyvas su laidžiu sluoksniu ant viršaus. Elektrinis laukas kerta žiedelio tarpelį.

Metapaviršiuose (MP) Fano rezonansą elektromagnetinių bangų ruože pirmasis pastebėjo Fedotovs ir kt. [1]. Vėliau šie rezonansai buvo plačiai tyrinėti daugelio kitų autorių. Nors paprastai Fano rezonansas stebimas MP sudarytuose iš asimetrinės formos perpjautų žiedelių masyvų, jis buvo pastebėtas ir įprastinių veidrodžiškai orientuotų perpjautų žiedelių masyve [2]. Šiuo atveju Fano rezonansas atsirado dėl trečios plazmoninės modos sąveikos su gardelės moda.



2 pav. Metapaviršiaus celės matmenys, $G = W = 50 \mu\text{m}$, $A = 500 \mu\text{m}$, $L_x = 1200 \mu\text{m}$, $L_y = 600 \mu\text{m}$.

Šiame darbe mes tiriamo veidrodinės simetrijos metapaviršių, pavaizduotą 1 pav. MP pagrindas yra $125 \mu\text{m}$ storio dielektrikas kurio $\epsilon = 2,2$. Žiedeliai gaminami iš vario, kurio storis $9 \mu\text{m}$. Tyrinėto MP elementarusis narvelis su matmenimis yra parodytas 2 pav. $2 \mu\text{m}$ storio laidus sluoksnis, gali būti pagamintas iš laidaus polimero, yra uždedamas tiesiai ant rezonatorių ar ant kitos padėklo pusės.



3 pav. MP pralaidumo galiai ties Fano rezonansu priklausomybė nuo laidaus sluoksnio savitojo laidumo. Fano rezonanso dažnis, kai laidų plokštuma uždėta iš viršaus yra 222,9 GHz, o kai uždėta iš kitos padėklo pusės – 224,4 GHz.

Skaiciavimams naudojome CST Microwave Studio 2016 programinį paketą ir C++ kalba parašytą skaičiavimo programą, kuri paremta baigtinių skirtumų laiko skalėje metodu (angl. *finite difference time domain* FDTD).

Apskaičiuotos ties Fano rezonansu MP pralaidumo koeficiento galiai priklausomybės nuo savitojo laidaus sluoksnio laidumo yra parodyto 3 pav., kai laidus sluoksnis yra uždėtas tiesiai ant rezonatorių bei kitoje rezonatorių padėklo pusėje. Iš gautų rezultatų matyti, kad apskaičiuotasis pralaidumas vis dar priklauso nuo to iš kurios MP pusės yra uždėtas laidus sluoksnis, kai savitasis jo laidumas tėra $0,01 \text{ S/cm}$. Pralaidumo koeficiento sumažėjimas ryškesnis, kai sluoksnis uždėtas iš rezonatorių pusės. Kita vertus dinaminis diapazonas padidinamas uždedant laidžią plokštumą iš kitos padėklo pusės. Pastebėtas didelis tiriamo darinio jautris mažam ir vidutiniam plono sluoksnio laidumui gali būti pritaikytas kuriant jutiklius ar THz modulatorius.

Literatūra

1. V. Fedotov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, (2007) 147401.
2. D. Seliuta et al., *Optics Letters* **44**, (2019) p. 759-762.

POKELSO NARVELIŲ DAŽNINIŲ KONTRASTO CHARAKTERISTIKŲ TYRIMAS INVESTIGATION OF CONTRAST RATIO FREQUENCY RESPONSE OF POCKELS CELLS

Giedrius Sinkevičius, Algirdas Baškys

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

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

Pokelso narveliai yra naudojami itin greitam šviesos moduliavimui lazerinėse sistemose. Jie sudaryti iš netiesinės optinės kristalinės medžiagos, prie kurios šonų pridėti elektrodai. Aukšta įtampa paveikus elektrodus kristale sukuriama stiprus elektrinis laukas, kuris daro įtaką kristalinės medžiagos paprastojo ir nepaprastojo lūžio rodikliams t.y. keičia per kristalą sklindančios šviesos spinduliuotės poliarizaciją.

Pokelso narveliuose naudojamos kristalinės medžiagos pasižymi pjezoelektrinėmis savybėmis [1]. Dėl šių savybių kristalą paveikus elektriniu lauku susiformuoja įtempiai kristalo tūryje, kurie daro įtaką elektriniam optiniam koeficientui. Dėl šio reiškinio, pagrindinis Pokelso narvelio parametras - optinis kontrastas tampa nestabilus [2]. Šis reiškinys nėra pageidaujamas lazerinėse sistemose.

Šiame darbe sukurtas Pokelso narvelių dažninių kontrasto charakteristikų tyrimo stendas, ištirti skersinio tipo Pokelso narveliai su BBO kristalais, ištirti išilginio tipo Pokelso narveliai su DKDP kristalais, sukurtas aukštos įtampos rakto skirto Pokelso narvelių moduliacijos valdymui prototipas.

Naudojant sukurtą aukštos įtampos rakto įgyvendintas aktyvus virpesių slopinimas taikant Pokelso narvelio dažninių kontrasto charakteristikų tyrimo rezultatus.

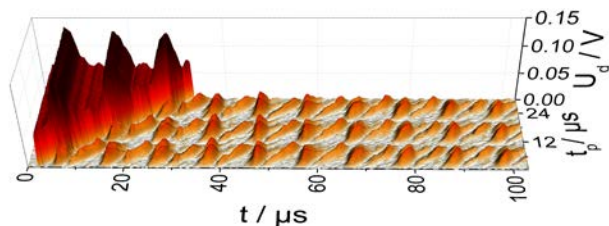
Pockels cells are used as ultra-fast light modulators in laser systems. It consists of a nonlinear crystal with electrodes attached to the sides of the material. When high voltage is supplied to the electrodes electric field is created inside the crystal which affects the ordinary and extraordinary refractive indices of the material. As a consequence, polarization of the light transmitted through the crystal is changed.

The crystalline materials used in Pockels cells have piezoelectric properties [1]. When the crystal is exposed to an electric field, stress is formed inside the crystal which affects the electro-optical coefficient of the crystal. As a result, optical contrast ratio which is the main parameter of the Pockels cell becomes unstable [2]. Such phenomenon is not desirable in laser systems.

In this work, contrast ratio frequency response of the BBO and DKDP Pockels cells were examined, contrast ratio frequency response stand was developed, transverse type Pockels cells with BBO crystals and Longitudinal type Pockels cells with DKDP crystal were investigated. A high voltage driver prototype was developed with active piezoelectric ringing suppression.

Literatūra / References

1. K. Takeda, T. Hoshina, H. Takeda, and T. Tsurumi, *Journal of Applied Physics*, **12**, 124105, (2012).
2. F. Bergmann, M. Siebold, M. Loeser, F. Röser, D. Albach, and U. Schramm, *Applied Sciences*, **4**, 761-769, (2015).



1 pav. DKDP Pokelso narvelio kristalo pjezoelektrinių virpesių oscilogramos esant skirtingiems aukštos įtampos impulso pločiams.

ELEKTRINĖS YBCO SLUOKSNIŲ SU CeO_2 PASLUOKSNIU SAVYBĖS IR ELEKTROMAGNETINIS DISKO IŠ II RŪŠIES SUPERLAIDININKO GREITINIMAS

Vilius Vertelis^{1,2}, Saulius Balevičius¹, Markus Schneider²

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

²French-German Research Institute of Saint-Louis
5 rue du Général Cassagnou, FR-68300 Saint-Louis, Prancūzija

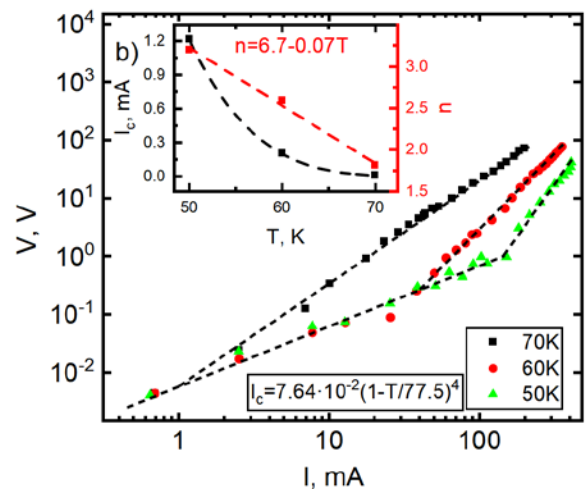
Didelio elektrinio laidumo kūrų greitinimas impulsiniu magnetiniu lauku naudojant ritės tipo elektromagnetinėse (EM) svaityklėse leidžia išvengti fizinio sąlyčio tarp sviedinio ir vamzdžio. Tai pašalina daug fizinių ribojimų sutinkamų kitose EM svaityklėse, tačiau Džiaulio šildymas, srauto pagavimas ir mechaninis atsparumas išlieka ribojantys veiksniai naudojant metalinius sviedinius.

II tipo superlaidininkai pasižymi labai maža savitąja varža, kai srovės tankis yra mažesnis už kritinį, todėl naudojant šiuos superlaidininkus galima išvengti srauto pagavimo, kas leidžia ženkliai padidinti elektromagnetinio greitinimo trukmę. Šiuos superlaidininkus makroskopiniame aprašyme galima įsivaizduoti kaip stipriai netiesinius laidininkus kurių E - j sąryšis aprašomas laipsniniu dėsnio (ang. *power-law*)

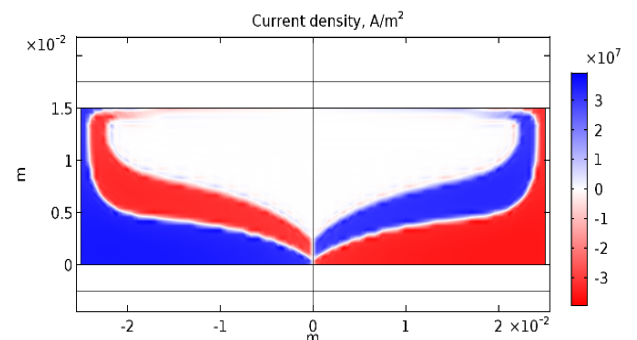
Bendru atveju, laipsninio dėsnio parametrai, kritinis srovės tankis bei laipsnio rodiklis, yra nuo magnetinio lauko ir temperatūros priklausantys dydžiai. Norint pakankamai tiksliai įvertinti šiuos parametrus reikia užtikrinti izotermiines eksperimento sąlygas. Tokias sąlygas galima realizuoti, naudojant ns trukmės stačiakampius elektrinius impulsus, kurių pagalba buvo ištirtos plonų (440 nm) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO) sluoksnių užaugintų ant Al_2O_3 padėklų su CeO_2 pasluoksniu elektrinės savybės, (žiūr. 1 pav).

Eksperimentiniai EM greitinimo tyrimai, atlikti su tūrinio disko formos YBCO superlaidininku atšaldytu iki 77K temperatūros, buvo palyginti su teoriniais skaičiavimais paremtais netiesine magnetinio lauko difuzija, naudojant baigtinių elementų metodą aprašant superlaidininko savybes E - j laipsniniu dėsnio. Gautas geras eksperimento ir skaičiavimų sutapimas leido juos išplėsti į platesnį sąlygų diapazoną nei buvo įmanoma eksperimentiškai.

Tyrimo rezultatai atskleidė kritinės srovės tankio įtaką EM II tipo superlaidininkų greitinimui. Buvo nustatyta, jog 77 K temperatūros YBCO diskas yra greitinamas



1 pav. YBCO sluoksnio užauginto ant Al_2O_3 su CeO_2 pasluoksniu voltamperinės charakteristikos skirtingose temperatūrose. Intarpas vaizduoja kritinio srovės tankio bei laipsninio dėsnio laipsnio rodiklio temperatūrinę priklausomybę.



2 pav. Srovės tankio pasiskirstymas II tipo superlaidininke greitinamame plokščios ritės elektromagnetinėje svaitykle po magnetinio impulso.

efektyviau nei Al ar Cu kai magnetinio lauko išvestinės yra mažos. Todėl padaryta išvada, jog sinchroninės bangos ritės tipo EM svaityklėse superlaidininkai gali būti greitinami efektyviau nei objektai iš normalių metalų.

DEPOSITION OF NANOTHIN LAYERS OF SELECTED ELEMENTS BY MAGNETRON SPUTTERING AND ALD ON ANODIZED ALUMINUM

Tadas Matijošius, Laurynas Staišiūnas, Giedrius Stalnionis, Svajus Asadauskas

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

Aluminum (Al) anodizing improves hardness, corrosion resistance, adhesion and other properties due to production of porous anodic coatings. Deposition of metal titanium (Ti) onto the coatings not only inhibits wear and friction but also increases cell adhesion [1]. In this study group IVB elements and other metals were deposited onto anodic coatings to evaluate suitability of Atomic Layer Deposition (ALD) and magnetron sputtering towards formation of nanothin layers.

Alloys 1050 (99.62%) and 6082 (96.72%) were employed as substrates. Hard anodization of Al was performed in Type III H₂SO₄/oxalic acid electrolyte for 70 min at 200 A/m² and 15 °C [1]. Phospho-anodization was carried out in 4% H₃PO₄ for 150 min at 150 V. Magnetron sputtering was used to deposit Ti layers [2]. Similar procedures were employed for sputtering Cr, Cu, Hf, Nb and Zr to achieve 16 nm and 75 nm thicknesses respectively, Table 1. Layers of TiO₂ and HfO₂ were formed by ALD at 15 nm thickness [1].

Table 1. Parameters used to deposit the nanothin layers by magnetron sputtering.

Layer	Thickness, nm	Duration, min	Current, mA	Voltage, V
Ti	16	15	100	421
	75	30	200	420
Zr	16	7	156	321
	75	30	154	323
Hf	16	13	60	265
	75	40	105	285
Cr	75	40	164	302
Cu	75	50	70	367
Nb	75	25	81	314

Quantitative Energy-dispersive X-Ray Spectroscopy (EDS) was employed for elemental analysis using an INCA spectrometer (Oxford Instruments, UK).

Nanothin layers of 15 nm thickness, obtained by ALD, are quite comparable to layers of 16 nm thickness, obtained by sputtering (sp.). However, ALD shows a higher abundance of deposited elements than sp. especially for Ti/TiO₂ layers, Table 2. This suggests that the penetration of TiO₂ by ALD is deeper than sputtered Ti. EDS analysis (at.%) of the sputtered layers of 75 nm thickness on hard anodized 6082 shows 1.89 Ti, 3.25 Zr, 1.79 Cr, 5.96 Cu, and 1.93 Nb. The

deposited layers might include all possible oxides and nitrides due to oxidation in a humid atmosphere.

Table 2. EDS analysis of deposited nanothin layers of group IVB transition metals on anodized Al.

Deposition and layer thickness, nm	Alloy	Elemental composition, at.%				
		Al	O	Hf/ Ti/ Zr	Si	S
no layer	1050	26.89	69.33	0	0	3.78
0 nm	6082	32.13	63.40	0	0.41	4.06
Hf (sp.)	1050	32.42	62.64	0.90	0	4.04
	6082	31.66	62.92	0.96	0.63	3.84
HfO ₂ (ALD)	1050	32.57	62.59	0.94	0	3.89
	6082	32.10	63.37	0.85	n.d.	3.68
TiO ₂ (ALD)	1050	31.93	62.53	1.41	0.05	4.08
	6082	31.61	62.17	1.97	0.34	3.91
Ti (sp.)	1050	31.51	64.66	0.35	0	3.47
	6082	31.09	64.39	0.38	0.38	3.77
Zr (sp.)	1050	30.06	66.00	0.16	0	3.78
	6082	29.26	66.54	0.17	0.33	3.70

Similar trends were observed on phospho-anodic coatings, which showed higher content of Ti after ALD, especially on 6082 alloys. Phospho-anodizing produces the pores over 200 nm ID compared to 5-20 nm ID in hard anodizing. Therefore, Ti contents are much higher in the phospho-anodic coatings, Table 3.

Table 3. EDS analysis of Ti/TiO₂ layers before and after anodization in phosphoric acid electrolyte.

Deposition and layer thickness, nm	Alloy	Elemental composition, at.%				
		Al	O	Ti	Si	P
no layer	1050	32.16	66.03	0	0.05	1.76
0 nm	6082	32.84	65.69	0	0.62	0.85
Ti (sp.)	1050	34.72	62.64	0.44	0	2.20
	6082	35.12	62.53	0.45	0.47	1.43
TiO ₂ (ALD)	1050	30.59	63.99	3.52	0	1.89
	6082	24.30	63.62	10.77	0.40	0.92

Formation of nanothin layers with well controlled thickness for a series of metals and their oxides onto anodic coatings might lead to new opportunities in biomedical, high-tech and other industrial applications.

References

1. T. Matijošius et al., Ceram. Int. **46**, 15581 (2020).
2. T. Matijošius et. al., Surf. Coat. Technol. **307**, 610 (2016).

TIESIOGIAI ANT DIELEKTRINIO SLUOKSNIO AUGINAMO NANOKRISTALINIO GRAFENO SAVYBIŲ PRIKLAUSOMYBĖ NUO PECVD TECHNOLOGINIŲ PARAMETRŲ

Algimantas Lukša, Saulius Balakauskas, Virginijus Bukauskas, Tomas Daugalas,
Martynas Talaikis, Gediminas Niaura, Artūras Suchodolskis, Lukas Jočionis,
Saulius Tumėnas, Marius Treideris, Arūnas Šetkus

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

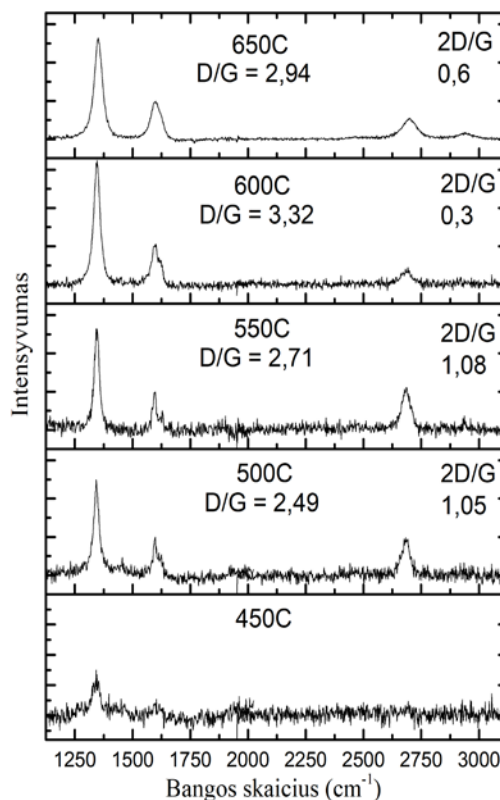
Grafenas – pirmoji atrasta 2D medžiaga. Šio anglies alotorpo tyrimai pradėti dar 1940 metais, tačiau, iš esmės, dėl teorinių priežasčių. Tik po maždaug 60 metų eksperimentiškai buvo gautas grafeno monosluoksnis [1]. Tuomet ši medžiaga susilaukė didelio susidomėjimo dėl savo neįprastų elektrinių, optinių ir mechaninių savybių.

Komercinį grafeno pritaikymą riboja sintezės technologijos. Moksliniuose tyrimuose, dėl auštos sluoksnio kokybės, dažniausiai naudojamas eksfoliacijos iš grafito metodas. Tačiau taip gaunamų lakštų skersmuo yra per mažas praktiniam pritaikymui. Auginimas ant katalitinių padėklų, tokių kaip varis ir nikelis, gali tiktai auginimui ant didelio ploto padėklų. Tačiau ši technologija yra sunkiai suderinama su prietaisų gamyba, nes auginimo temperatūros siekia 900-1000°C. Naudojamas mechaninis sluoksnių perkėlimas nuo auginimo padėklo ant prietaiso. Šis papildomas žingsnis lemia papildomus defektus, išplyšimus ir užterštumą grafeno sluoksnyje. Neseniai buvo pademonstruotas PECVD pranašumas tiesiogiai grafeną auginti ant dielektrinių sluoksnių [2].

Taikant PECVD metodiką šiame darbe nanokristalinis grafenas susintetintas tiesiogiai ant dielektrinio sluoksnio (SiO_2). Kaip anglies šaltinis naudotos metano dujos, kurių disociacija inicijuojama aukštadažnio elektrinio lauko sukurtoje plazmoje. Užauginti sluoksniai charakterizuoti Ramano spektroskopija. Sandara buvo analizuota atominių jėgų mikroskopijos metodais. Eksperimentiškai sluoksnių savybės charakterizuotos elipsometrijos parametrais ir optinio atspindžio spektrais.

Išanalizuota sluoksnių sandaros priklausomybė nuo auginimo temperatūros. Iš Ramano spektre esančių grafeną charakterizuojančių smailių G, D ir 2D kiekybiškai įvertinti kristalitų matmenys. Gauti temperatūrų intervalai, kuriuose auga

didžiausi kristalitai (~50nm). Rastos ribos kur augimas nebevyksta. Aprašytos sluoksnių morfologijos ir padėklo padengimo priklausomybės nuo auginimo trukmės. Parodyta, kaip nanokristalinio grafeno sluoksniai įtakoja atspindį ir kaip atspindžio kitimas priklauso nuo auginimo parametrų.



1 pav. Sluoksnių užaugintų PECVD metodika tiesiogiai ant SiO_2/Si padėklo Ramano spektrai.

Literatūra

1. W. Ren, H. M. Cheng, Nature Nanotech, **9**, 726-730 (2014).
2. R. Muñoz, L. Martinez, E. Lopez-Elvira, C. Munuera, Y. Huttel, M. Garcia-Hernandez, Nanoscale, **10**, 12779-12787 (2018).

STATMENŲ 2D PLOKŠTUMAI DARINIŲ METALAS-GRAFENAS-METALAS ELEKTRINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAI

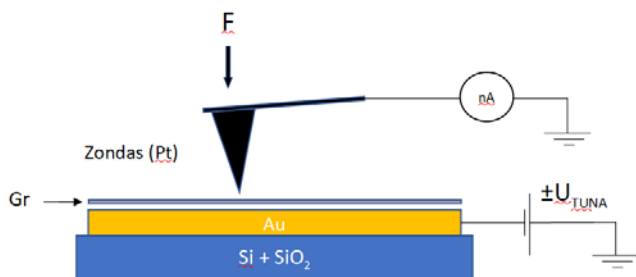
Tomas Daugalas, Virginijus Bukauskas, Viktorija Nargelienė, Algimantas Lukša, Audružis Mironas, Arūnas Šetkus

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

Vertikaloje sekoje išdėstytų sluoksniuotų darinių, sujungiamų Van der Waals sąveikomis, prietaisų charakteristikas lemia krūvio pernašos mechanizmai, valdantys krūvio judėjimą statmenai sluoksniams. Šių mechanizmų savitumai galimi pritaikyti tikslingam unikalių prietaisų kūrimui, nukreiptam į aplinkos fizinių, ar cheminių parametrų detekciją.

Vertikalių darinių, kurie sudaryti iš dvimačių (2D) medžiagų ir metalinių kontaktų, tyrimams dažnai literatūroje siūlomos kombinuotos skenuojančio zondo mikroskopijos metodikos, tokios kaip atominių jėgų mikroskopija (AFM), jėgų spektroskopija, trinties jėgų matavimai ir kitos [1], kurios leidžia nusakyti tam tikras darinių ypatybes ar priklausomybes nuo aplinkos parametrų. Tačiau tokių tyrimų kol kas nepakanka tam, kad būtų detalai paaiškinti krūvio pernašos ypatumai. Šiame darbe atominių jėgų spektroskopija kombinuojama su išorinės įtampos poveikiu ir taip tiriami dariniai iš perkeltos CVD grafeno (Gr) sluoksnio ant litografiškai suformuotų metalinių kontaktų. Analizuojamos mechaninės ir elektrinės savybės kambario aplinkos sąlygomis.

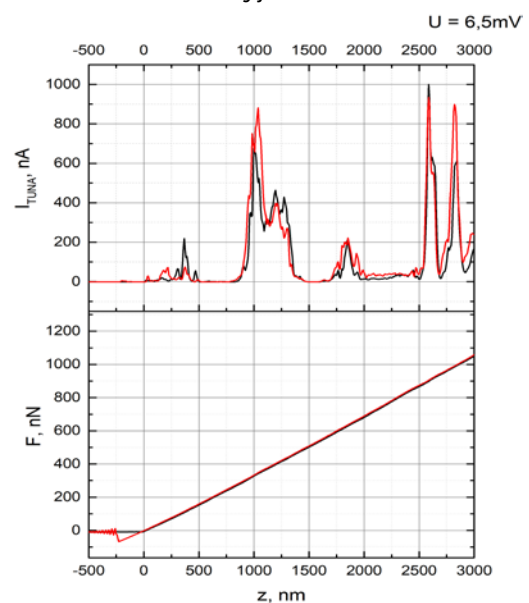
Dariniuose buvo išmatuotos jėgos spektroskopijos kreivės. Matavimų metu tarp zondo ir bandinio buvo pridėdama tikslingai parenkamos vertės ir poliškumo išorinė įtampa.



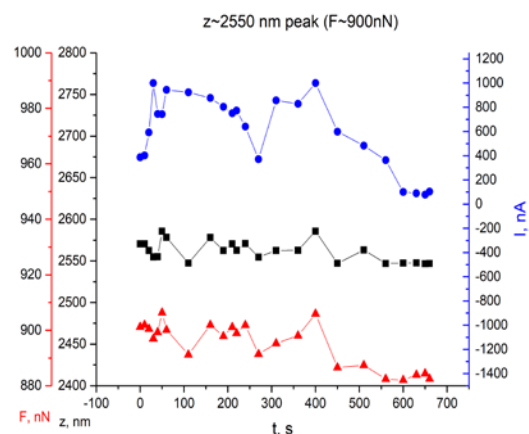
1 pav. Eksperimentų principinė schema.

Iš pirminių eksperimentinių duomenų pastebėtos struktūrai būdingos nuostovios srovių smailės, kurias išanalizavus ir, remiantis literatūroje aprašomais darbais, bei modeliniais skaičiavimais, buvo pasiūlytas modelis, kuriame grafenas, kaip kvantinė duobė, turi apibrėžtus energetinius lygmenis tinkamus krūvio pernašai.

Remiantis šia prielaida, atlikti papildomi eksperimentai, kuriais aprašytos sistemos krūvininkų pernašos bei deformacijų relaksacijos trukmės. Aptartos kvantuotų lygmenų pozicijos tokia darinio modelyje.



2 pav. Jėgos kreivės (juoda-priartėjimo, raudona-atitraukimo) ir srovės kreivės (atitinkamas žymėjimas), esant 6,5 mV išorinei įtampai.



3 pav. Srovės smailės, ties $z \approx 2550$ nm ($F \approx 900$ nN), pozicijos, prispaudimo jėgos ir srovės priklausomybė nuo matavimų skaičiaus, išreikšto laikinėje t skalėje.

Literatūra:

1. H. Lang, Y. Peng, X. Cao, K. Zou, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** (22), 25503-25511, 2020.

2D-MoS₂ SLUOKSNIŲ SINTEZĖ IR TAIKYMAS INFRARAUDONOS SPINDULIUOTĖS DETEKTAVIMUI

Vladimir Agafonov, Mindaugas Kamarauskas, Saulius Balakauskas, Audružis Mironas, Marius Treideris, Martynas Talaikis, Evelina Dudutienė, Arūnas Šetkus

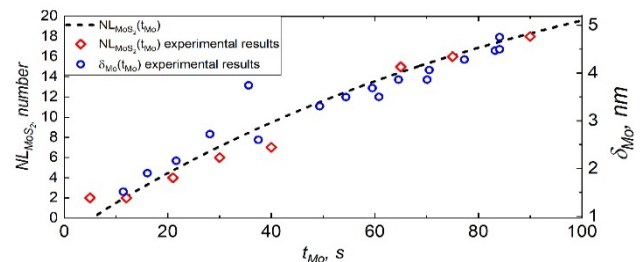
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fizikinių technologijų skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: vladimir.agafonov@ftmc.lt

Dvimačiai pereinamųjų metalų dichalkogenidai – tai sparčiai besivystanti nauja medžiagų klasė su ypatingom savybėmis, kurios daro šias medžiagas patrauklias ne tik fundamentinės šiuolaikinės fizikos tyrimams, bet ir taikymams pradedant nuo nanoelektronikos iki nanofotonikos.

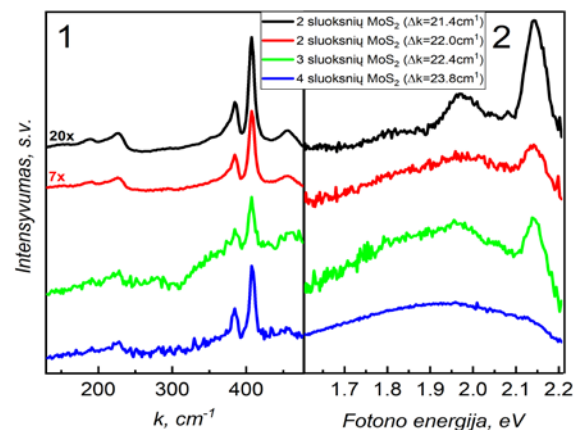
Molibdeno difulfidas (MoS₂) yra vienas pereinamųjų metalų dichalkogenidų. Gamtoje sutinkamas tūrinis MoS₂ kristalas yra netiesiatarpis puslaidininkis, turintis sluoksniuotą struktūrą, kur sluoksniai tarpusavyje sąveikauja silpna Van der Waals'o jėga. MoS₂ yra žymus dėl keičiant sluoksnių skaičių besikeičiančio draustinės juostos tarpo nuo 1.2 eV (netiesiatarpis tūrinis puslaidininkis) iki 1.9 eV (tiesiatarpis monosluoksnis puslaidininkis). Monosluoksnis MoS₂ taip pat pasižymi aukšta srovės įjungimo/išjungimo sparta (~10⁸) bei neblogu judriu (~200 cm²/Vs⁻¹) kambario temperatūroje. Turint tokias savybes MoS₂ turi platų pritaikymą įvairiose srityse, ypač optoelektronikoje.

Šiame darbe demonstruojamas kontroliuojamo sluoksnių skaičiaus dviejų žingsnių MoS₂ sintezės būdas. Pirmu žingsniu PVD metodu formuojamas itin plonas (1-10 nanometrų eilės) metalinio molibdeno sluoksnis ant pasirinkto padėklo, kur sekančiu žingsniu nusodintas sluoksnis sulfatizuojamas atmosferinėje CVD krosnyje. Siekiant efektyviai valdyti MoS₂ sluoksnių skaičių buvo paruošta kalibracinė diagrama siejanti Mo garinimo laiką ir MoS₂ sluoksnių skaičių (1 pav.). Kokybės kontrolė užtikrinama Ramano, optine ir fotoluminescencijos spektroskopija (2 pav.).

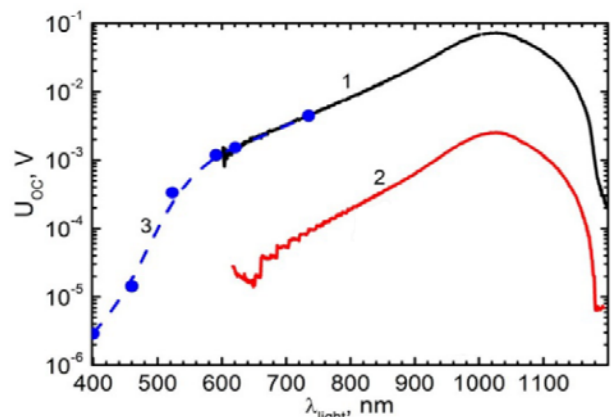
Pritaikant šį MoS₂ sintezės metodą, buvo pagamintas MoS₂/p-Si heterosandūros, fotovoltinio efekto pagrįstas, fotodetektorius. Toks fotodetektorius pasižymi jautrumu 650 – 1200 nm apšvietimui su maksimaliu jautumu 210 VW⁻¹ nepriklausomai nuo bangos ilgio. Kadangi šviesos atsakas yra pagrįstas fotovoltiniu efektu – toks fotodetektorius gali veikti be papildomo maitinimo šaltinio, o tai atveria pritaikymo autonominėse fotoninėse sistemose galimybes.



1 pav. Kalibracinė diagrama siejanti Mo garinimo laiką ir gaunamų MoS₂ sluoksnių skaičių.



2 pav. Skirtingo sluoksnių skaičiaus MoS₂ Ramano (1) ir fotoluminescencijos (2) spektrai.



3 pav. Atviros grandinės įtamos U_{oc} atsakas į šviesą nuo 400 iki 1200 nm su optine galia 470 μ W (1 ir 3) ir 2.5 μ W (2) sužadinta monochromatoriumi (1 ir 2) ir LED (3).

IŠ TIRPALO FORMUOJAMŲ METALŲ OKSIDŲ SLUOKSNIŲ OPTINIŲ SAVYBIŲ PRIKLAUSOMYBĖS NUO TECHNOLOGIJOS TYRIMAI IR PRAKTINIS TAIKYMAS FOTOVOLTINIUOSE ELEMENTUOSE

Matas Rudzikas^{a,b}, Arūnas Šetkus^a

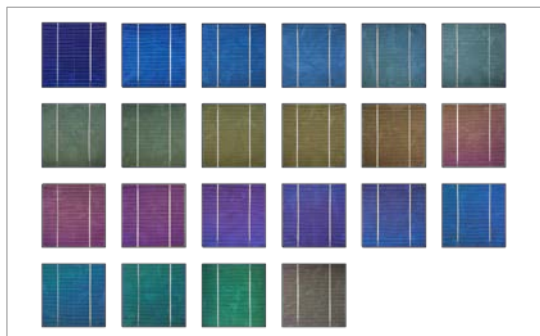
^{a, b} Fizinių ir technologijos mokslų centras, Sauletekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el.p.: matas.rudzikas@ftmc.lt;

^b UAB "Modernios E-Technologijos" Vismaliukų g. 34, Vilnius LT-10243.

Fotovoltikos rinka yra sparčiai auganti atsinaujinančios energetikos sritis. Tačiau ji vis dar nėra pakankamai lanksti, nes juodų ir mėlynų modulių pasiūla yra didžiausia, o kaina už W gana ženkliai skiriasi nuo kitų spalvinių sprendimų, o tai yra ne visada patrauklu architektams, bei patiems vartotojams [1].

Šiame darbe išvystytas paprastas ir efektyvus metodas saulės elementų spalvai keisti, pagrįstas metalo oksido sluoksnių derinimu su komercinio mono/multikristalinio saulės elemento antiatspindinčia hydrogenizuoto silicio nitrido (SiNx:H) danga.

Mūsų tyrime indžio alavo oksido (ITO) sluoksniai formuojami radijo bangų dažnio magnetroninio dulkinimo metodika Ar atmosferoje kambario temperatūroje [2]. Keičiant dangos storį dėl interferencijos daugiasluoksnėje struktūroje kinta atspindžio spektro maksimumo padėtis bei spektro forma, dėl ko keičiasi saulės elemento spalva (1. Pav.). Efektas aprašytas teoriniame modelyje, pagal kurį atliktas skaitmeninis modeliavimas, naudojant „PV lighthouse“ įrankį ir gauti skaičiavimų rezultatai palyginti su eksperimentu.

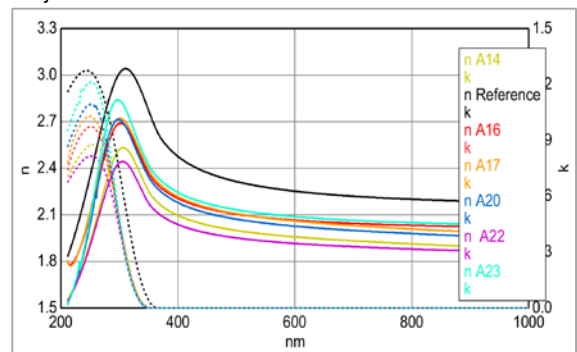


1 pav. Multikristaliniai saulės elementai su papildoma ITO danga ant viršaus (nuo 20 iki 260nm).

Tyrimo metu buvo surinktas spalvotas modulis, taip įrodant metodo veiksmingumą ir praktinį pritaikomumą. Eksperimentais įrodyta, jog modulio našumas yra tik 1.5% mažesnis už standartinį modulį.

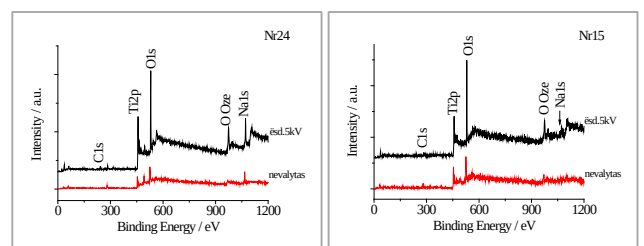
Tolesniuose tyrimuose siekiama panaudoti pigesnes, bei industriniu požiūriu patrauklesnes metodikas tokias, kaip įmerkimas [3] bei purškimo pirolizė [4]. Įmerkimo metodika formuojamiems TiO_2 sluoksniams ant stiklo padėklo buvo ruošiami tirpalai sol-gel metodu pagal Miguel et al. [5]. Dengimo sąlygos: kambario temperatūra, 100mm/min vertikalus pastovus traukimo greitis, tirpiklio išgarinimas 60°C temperatūroje krosnelėje 20min. Paruošti bandiniai atkaitinti nuo 100 iki 450°C. Detalai tirtas ryšys tarp technologijos sąlygų ir TiO_2 optinių savybių. Analizuoti galimi mechanizmai. Sluoksnių dispersija skaičiuota pagal Tauc-Lorentz modelį (2.pav.). Pasiskirstyme gaunamos mažesnės lūžio

rodiklio vertės, kai bandiniai neatkaitinti, o didesnės - aukštesnėse temperatūrose atkaitintiems. Tokia tendencija sietina su sluoksnio tankėjimu. TiO_2 sluoksniams elipsometrijos būdu nustatytas jų storis svyruoja nuo 53 iki 82nm.



2 pav. Elipsometrijos matavimai TiO_2 bandiniams (realioji lūžio rodiklio komponentė pavaizduota ištisine linija, menama – punktyrine).

Bandiniams atlikti XPS matavimai su AXIS SUPRA automatizuotu spektrometru prieš matavimus sluoksnius išdvinant Ar jonais. Nustatyta, jog gautuose sluoksniuose gaunamas nestechiometrinis TiO_2 , kadangi Ti ir O santykis yra 2.55 - neatkaitintam ir 2.38 - 450 °C atkaitintam bandiniui. Taip pat nustatyta didėjanti Na koncentracija, didėjant atkaitinimo temperatūrai, kuri sietina su Na^+ jonų migracija.



3 pav. Atkaitinto 450 °C ir neatkaitinto bandinio XPS spektrai.

Atliktuose XRD matavimuose kristalinių smailių nematyti. Literatūroje, formuojant TiO_2 dangas iš tirpalo pastebėta, jog TiO_2 kristalizacija gali būti nuslopinta Na^+ jonų [6], ką galimai stebime ir mūsų bandiniuose.

Literatūra:

- [1] Q. Bao et al., Renew. Energy. 113 (2017) 1569–1579.
- [2] M. Rudzikas et al., Sol. Energy. 207 (2020) 218–227.
- [3] T. Ito et al., Langmuir. 33 (2017) 5314–5320.
- [4] S. Rahemi Ardekani et al., J. Anal. Appl. Pyrolysis. 141 (2019) 104631.
- [5] M. Anaya et al., J. Mater. Chem. C. 4 (2016) 4532–4537.
- [6] J. Zita et al., J. Photochem. Photobiol. A Chem. 216 (2010) 194–200.

FROM FEMTO TO MICROSECONDS - DYNAMIC PHOTOPHYSICS OF NONFULLERENE ORGANIC SOLAR CELLS

Rokas Jasiūnas¹, Huotian Zhang², Andrius Devižis¹, Feng Gao²
and Vidmantas Gulbinas¹

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

²Department of Physics Chemistry and Biology (IFM), Linköping University, Linköping SE-58183, Sweden
Email: rokas.jasiunas@ftmc.lt

Organic photovoltaics (OPV) has been steadily progressing as one of the alternative solar energy-harvesting technology, ever since their first appearance over three decades ago [1]. Favorable properties such as lightness, flexibility, transparency and low-cost encouraged the research in materials design, device engineering and photophysical processes study. Even though one of the main photovoltaic parameter, solar-to-electrical power conversion efficiency (PCE), has remarkably increased since OPV appearance, now exceeding 16% for single-junction OPV devices, yet it falls behind state-of-the-art silicon or perovskite photovoltaic technology [2]. In recent years, the inventive substitution of well-established fullerene type acceptors by small low-bandgap molecules has led to a significant PCE increase. Such gain was enabled by numerous advantages of non-fullerene (NF) molecules over fullerene-based acceptors, including a broader absorption spectrum, which leads to higher short-circuit current and tunability of energy levels, enabling the open-circuit voltage gain. The superior photovoltaic performance of NF based OSCs is also believed to originate from the favourable morphology and charge dynamic properties in blends; however, the understanding of the latter is still very obscure and requires more in-depth investigation.

In this work [3], we use several time-resolved electro-optical measurement techniques covering an exceptionally wide time span (from sub-ps up to μ s) to study the whole life cycle of photogenerated charge carriers, starting with their generation and finishing with extraction. We intently inquire into carrier mobility kinetics and disentangle geminate and nongeminate recombination processes in various bulk heterojunction systems. We comparatively investigated OPV systems comprising the well established PBDB-T donor molecule blended with either novel NF acceptor Y1 or archetypal PC71BM acceptor. Additionally, were investigated, BHJ systems based on benchmark NF acceptor ITIC with PBDB-T-2CI and PDCBT-2F donor materials

specifically chosen to have small HOMO level offsets.

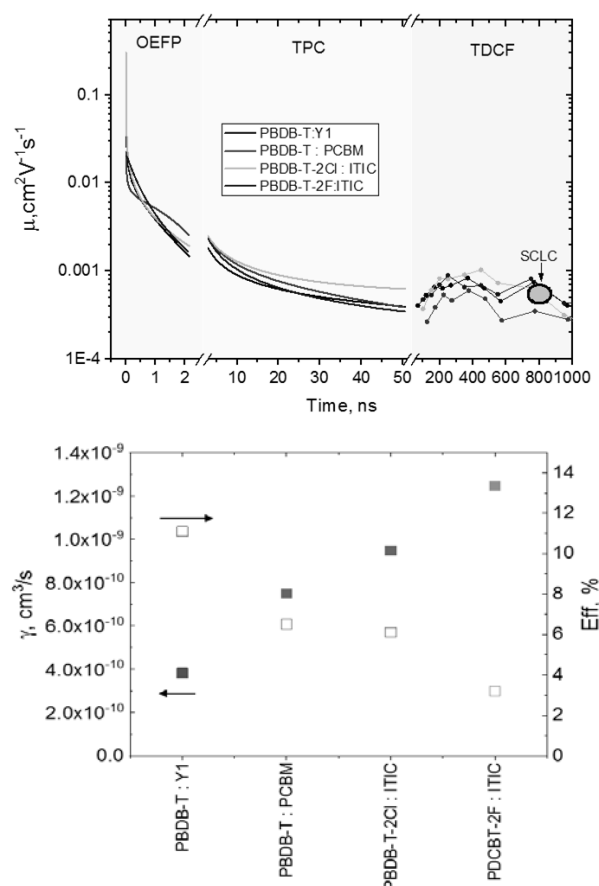


Fig. 1. a) Mobility kinetics of indicated OPV devices, obtained by optical electric-field probing (OEFP), transient photocurrent (TPC), time-delayed collection field (TDCF) measurement techniques. The black dot indicates PBDB-T:Y1 mobility value obtained by surface-charge limited current technique. b) Bimolecular recombination rate and power conversion efficiency values for indicated devices. Fig. 1. Figures can be in colour or in black and white.

References:

1. O. Inganäs, Adv. Mater., **30(35)**, 1800388, (2018)
2. B. Fan, D. Zhang, M. Li, Sci.China Chem, **62(6)**, 746-752, (2019)
3. R. Jasiūnas, H. Zhang, J. Yuan, X. Zhou, D. Qian, Y. Zou, A. Devižis, J. Šulskus, F. Gao, V. Gulbinas, J. Phys. Chem. C, **124**, 39, 21283-21292, (2020)

SUPPRESSION OF ELECTRON TRAPPING IN MAPbI₃ PEROVSKITE BY Sr²⁺ DOPING

Rokas Gegevičius, Rokas Jasiunas, Marius Franckevičius,
Vidmantas Gulbinas

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

Power Conversion Efficiency of hybrid-perovskite solar cells is currently exceeding 25%^[1] and it is one step away from its theoretical limit. It has been shown that it is possible to achieve a quasi-Fermi-level splitting in MAPbI₃ films corresponding to an open-circuit voltage (Voc) of 1.28 V of solar cells.^[2] However, in full device configuration, additional nonradiative recombination channels appear at interfaces between the perovskite and transport layers. Common action of all recombination processes at interfaces and in bulk limit the quasi-Fermi-level splitting, Voc, and power conversion efficiency (PCE). Thus, it is crucial to understand and learn to control the nonradiative recombination for the optimization of the device performance.

Herein, we demonstrate performance enhancement of a solution-processed MAPbI₃ perovskite solar cell achieved by adding a very small amount of Sr²⁺ doping agent. We show that even 0.2% of Sr²⁺ added to the perovskite precursor increases the open circuit voltage by 80 mV and enhances the PCE from 16.8 % to 17.8 %.

Study of charge carrier dynamics in perovskite films with and without Sr²⁺ additives by applying three different experimental techniques: time resolved photoluminescence (PL), transient photocurrent (TPC), and time-delayed collection field (TDCF) revealed that Sr²⁺ additives reduce the nonradiative carrier recombination and cause an improvement of Voc by reducing the electron trapping rate. However, at 1% and higher concentration, Sr²⁺ ions segregate, most likely at grain boundaries, and creates a different kind of carrier traps. It leads to the rapid trapping of a fraction of charge carriers and their very slow subsequent recombination. In contrast, low concentrations of Sr²⁺ in MAPbI₃ are beneficial for solar cell operation as the reduced trapped electron density suppresses nonradiative Shockley-Read-Hall recombination, which positively impacts Voc of perovskite solar cells.

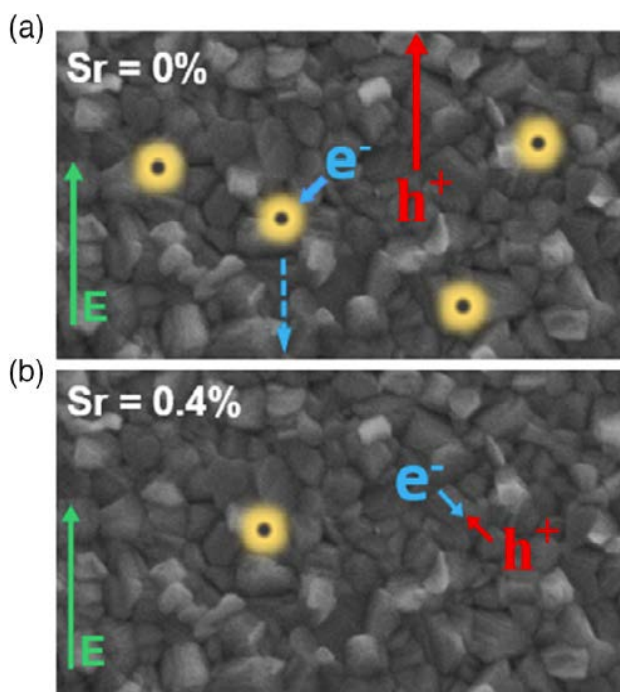


Fig. 1. Schematic representation of carrier trapping, extraction, and recombination dependence at a) 0%, b) 0.4%, Sr²⁺ concentration.

References

1. NREL Best Research-Cell Efficiencies, <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/bestresearch-cell-efficiencies.20200803.pdf> (accessed: September 2020).
2. I. L. Braly, D. W. deQuilettes, L. M. Pazos-Outón, S. Burke, M. E. Ziffer, D. S. Ginger, H. W. Hillhouse, Nat. Photonics 2018, 12, 355.

ČIRPUOTI VEIDRODŽIAI SU PORĖTU IŠORINIU SLUOKSNIU GRUPINIO VĒLINIMO DISPERSIJOS OSCILIACIJOMS SUMAŽINTI

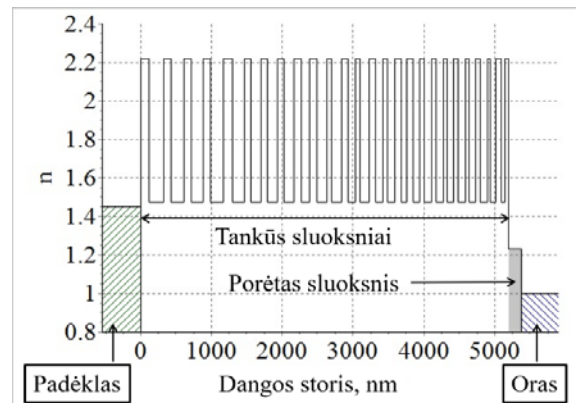
Simas Melnikas, Lukas Ramalis, Simonas Kičas, Tomas Tolenis

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius
Savanorių pr. 231, LT-10257 Vilnius, el. p.: simas.melnikas@ftmc.lt

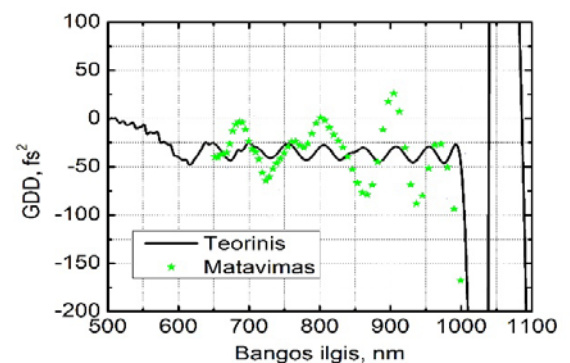
Čirpuoti veidrodžiai (CM) yra vienas iš dielektrinių daugiasluoksnių dangų tipų. Šie veidrodžiai panaudojami ultratrumpiesiems (femtosekundiniams) lazerio impulsams išplėsti arba suspausti. Yra sukurta keletas skirtingų CM tipų, pvz.: galinės pusės čirpuoti veidrodžiai (BASIC), suderintos CM poros ir kiti [1]. Visos šios čirpuotų veidrodžių konfigūracijos buvo sukurtos siekiant pašalinti arba kompensuoti optinio impedanso nederinimo problemą oro ir išorinio veidrodžio sluoksnio sandūroje [1]. Optinio impedanso nederinimas sukelia pagrindinio čirpuotų veidrodžių parametro - grupinio vėlinimo dispersijos (GDD) - spektrinius svyravimus ir nulemia blogesnes impulso spūdos charakteristikas: pasikeitusią impulso formą, trukmę ir kt.

Praktinė čirpuoto veidrodžio spektrinio pločio riba, kai dar įmanoma išvengti GDD svyravimų, yra maždaug pusė optinės oktavos standartinėms optinėse dangose naudojamoms medžiagoms [1] (pvz., $\Delta\lambda=200$ nm, kai bangos ilgis $\lambda = 800$ nm). CM modifikacijoms, kuriomis galima pašalinti arba sumažinti šį trūkumą, reikalingas sudėtingas mechaninis derinimas (pvz., BASIC metodas) arba itin didelis nusodinimo tikslumas (pvz., suderintos CM poros metodas). Neseniai buvo pasiūlytas naujas būdas išplėsti CM spektrinį plotį: išbandytas naujo tipo CM, į dangos struktūrą įtraukiant išorinį itin žemo lūžio rodiklio sluoksnį (pvz., $n < 1,25$ iš porėtos SiO_2 medžiagos) [2, 3]. Tokiu būdu galima išvengti čirpuoto veidrodžio GDD svyravimų plačiame optiniame spektre. Iki šiol kitų mokslinių grupių buvo suformuoti 240–340 nm spektrinio pločio čirpuoti veidrodžiai su porėtu išoriniu sluoksniu. Šio tyrimo tikslas buvo suformuoti CM, kurio GDD spektro plotis siektų 400 nm.

Šiame darbe buvo panaudotos dvi plonųjų sluoksnių nusodinimo technologijos. Jonaplauščio dulkavimo (IBS) technologija suformuota 51 sluoksnio (iš Nb_2O_5 ir SiO_2 medžiagų) tankios struktūros danga, o elektronų plaušto garinimo įrenginyje įdiegta garinimo kampu (GLAD) technologija suformuotas porėtas išorinis sluoksnis (1 pav.), sudarytas iš vertikalų kolonų [4]. Padengto čirpuoto veidrodžio bendras storis yra $D \approx 5,4 \mu\text{m}$, o paskutinio sluoksnio lūžio rodiklis $n \approx 1,23$ bangos ilgio $\lambda=800$ nm spinduliuotei.



1 pav. Čirpuoto veidrodžio struktūra.



2 pav. Teorinis ir išmatuotas GDD spektrai.

Suformuoto elemento GDD matavimai rodo, kad GDD spektriniai svyravimai neviršija $-35 \pm 60 \text{ fs}^2$ ribų $\lambda=650\text{--}1000$ nm spektriniame ruože (2 pav.). Taip pat atlikus sluoksnių storių paklaidų analizę nustatyta, kad GDD osciliacijos labiausiai nulemtos tankios struktūros sluoksnių storių paklaidų. Spektrinių osciliacijų pasiektų suformuotame čirpuotame veidrodyje su porėtu sluoksniu amplitudė bent du kartus mažesnė, nei būtų įmanoma teoriškai pasiekti nenaudojant porėtų sluoksnių.

Literatūra

1. V. Pervak, O. Razskazovskaya, B. Angelov Ivan, L. Vodopyanov Konstantin, and M. Trubetskov, *Adv. Opt. Technol.*, **1**, 3 (2014).
2. J. Liu, Y. Wang, R. Zhao, K. Guo, R. Chen, H. Qi, M. Zhu, D. Wang, K. Yi, Y. Leng, and J. Shao, *Opt. Mater. Express*, **4**, 8 (2018).
3. P. Ma, A. Szeghalmi, U. Schulz, F. Rickelt, V. Beladiya, P. Zimmermann, and L. Li, *Optical Interference Coatings Conference (OIC)*, ThB.3 (New Mexico, USA, 2019).
4. L. Grinevičiūtė, M. Andrulevičius, A. Melninkaitis, R. Buzelis, A. Selskis, A. Lazauskas, and T. Tolenis, *Phys. Status Solidi A*, **12**, 214 (2017).

NIR superkontinuomo impulsų stiprinimas ir spūda, taikant nenuostovią priverstinę Ramano sklaidą

Paulius Mackonis, Augustinas Petrulėnas, Aleksej Rodin, Vytenis Girdauskas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Kieto kūno lazerių laboratorija, Savanorių pr. 231, LT-02300, el. p.: paulius.mackonis@ftmc.lt

Ti:safyro stiprintuvai ir optinis parametrinis čirpuotų impulsų stiprinimas (OPCPA) tapo įprastu didelio intensyvumo kelių optinių ciklų impulsų generavimo metodu. Tačiau IR spektrinėje srityje, didėjant spinduliuotės bangos ilgiui, plačiajuostis impulsų stiprinimas tampa sunkiai įvaldomas dėl tinkamų netiesinių kristalų, turinčių plačią fazinio synchronizmo juostą, trūkumo. Galima alternatyva – priverstinė Ramano sklaidą (SRS), nereikalaujanti fazinio synchronizmo sąlygos.

Nenuostovijame Ramano sklaidos režime, kai impulsų trukmė yra trumpesnė nei Ramano terpės molekulių ar fononų vibracinio lygmens relaksacijos trukmė, Kartu su priverstine Ramano sklaidą pasireiškia ir kiti netiesiniai reiškiniai. Impulso fazės moduliavimasis, pluošto fokusavimasis dar labiau nuskurdina kaupinimo impulsą, o femtosekundinio kaupinimo atveju, visiškai slopina SRS procesą.

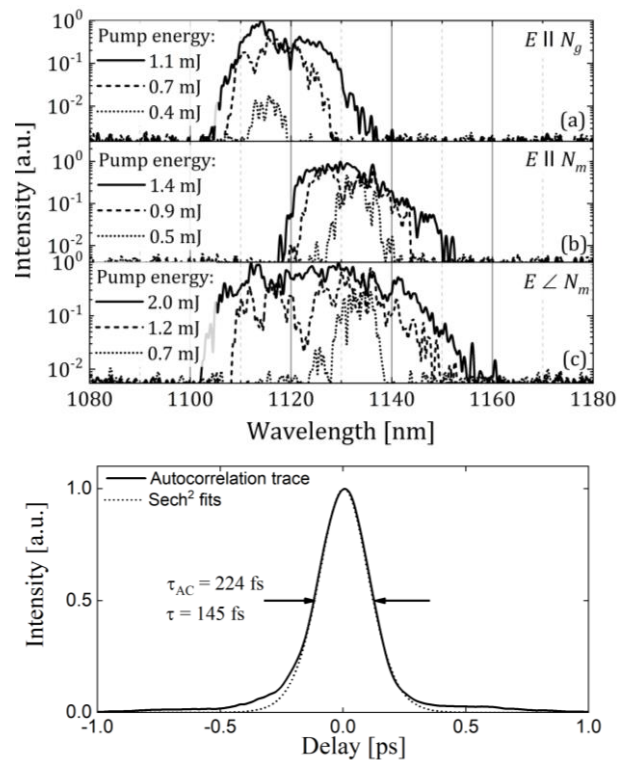
Šiame darbe mes pristatome efektyvų dviejų pakopų NIR superkontinuomo [1] impulsų stiprinimą, taikant priverstinę Ramano sklaidą $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ kristale. Kaupinimui panaudojus Yb:YAG čirpuotų impulsų stiprintuvo-spaustuvo spektriškai ribotus 1.2 ps trukmės ir 1.6 nm spektro pločio impulsus [2], ištirtas ženklus pastiprintos spinduliuotės spektro plitimas įvairiomis sužadavimo sąlygomis. Taikant prizminį kompresorių, pademonstruota pastiprintų impulsų spūda [3].

Nustatyti sustiprintų impulsų spektrai atitinkantys centrinius bangos ilgius 1118 nm ir 1135 nm atitinkamai $E \parallel N_g$ and $E \parallel N_m$ kristalo orientacijose (1 pav. – viršuje, a ir b). Stiprinimo metu, ilmpulsų spektrinė juosta išplito iki 16 nm (FWHM), kas atitinka 120 fs spektriškai riboto impulso trukmę. Optimaliose kaupinimo sąlygose, pirmoje stiprintuvo pakopoje, paseiktas maksimalus 17% and 12% spinduliuotės keitimo efektyvumas atitinkamai $E \parallel N_g$ and $E \parallel N_m$ kristalo orientacijose.

Plačiausia sustiprintų impulsų spektrinė juosta nustatyta, kai kaupinimo ir signalo poliarizacijos orientuotos $\sim 28^\circ$ kampu N_m ašies atžvilgiu. Šiuo atveju, plačiausia spektrinė juosta (25 nm), atitinka 90 fs spektriškai riboto impulso trukmę. Maksimalus 11% keitimo efektyvumas šioje konfigūracijoje, esant 2 mJ kaupinimo energijai.

Antroje stiprintuvo pakopoje ženklaus spektro

siaurėjimo nepastebėta, nors pasiektas net pasiektas 55% maksimalus keitimo efektyvumas $E \parallel N_m$ kristalo konfigūracijoje.



1 pav. Pastiprinto signalo spektrų gaubtinės ir jų kitimas priklausomai nuo kaupinimo energijos esant skirtingoms KGW kristalo orientacijoms (viršuje). Pastiprinto ir suspausto impulso autokoreliacinė kreivė (apačioje).

Galiausiai sustiprinti impulsai buvo suspausti iki 145 fs trukmės, $\sim 7,5$ karto trumpesnės nei kaupinimo impulso trukmė (1 pav. – apačioje). Taip pat bus aptartos energijos didinimo ir impulsų spūdos iki mažiau nei 100 fs galimybės.

Literatūra

1. P. Mackonis, A. Petrulėnas, V. Girdauskas, and A. Rodin, in 2019 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference, OSA Technical Digest (Optical Society of America, 2019), paper ca_p_43.
2. P. Mackonis and A. M. Rodin, Opt. Express **28**, 1261 (2020).
3. P. Mackonis, A. Petrulėnas, A. M. Rodin, V. Girdauskas, and A. Michailovas, Opt. Lett. (2020) (priimta spausdinimui).

PdCo₃O₄CeO₂/C – SINTEZĖ, CHARAKTERIZAVIMAS IR TAIKYMAS ETILENGLIKOLIO OKSIDACIJOS REAKCIJAI

Minvydas Marciūnas¹, Virginija Kepenienė², Raminta Stagniūnaitė², Audrius Drabavičius²,
Loreta Tamašauskaitė Tamašiūnaitė², Eugenijus Norkus²

¹Vilniaus Universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Organinės chemijos katedra
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius, el. p.: minvydas.marciunas@chgf.vu.stud.lt

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Katalizės skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: virginija.kepeniene@ftmc.lt

Pramonėje gausiai naudojant iškastinį kurą kyla vis didesnės išteklių vartojimo ir ekologinės problemos. Tai verčia mokslininkus galvoti apie ateitį ir daugiau dėmesio skirti alternatyvių energijos šaltinių ieškojimui, pvz. kuro elementams. Tiesioginiai alkoholio kuro elementai yra daug žadanti alternatyvi cheminės energijos konvertavimo į elektros energiją priemonė. Nors jų gali būti keletas, etilenglikolio (EG) oksidacija paremti kuro elementai išsiskiria savo aukšta virimo temperatūra, mažesniu toksiškumu (lyginant su metanolio) ir dabartiniu paplitimu pramonėje (EG naudojamas kaip variklių aušinimo skystis) [1]. Viena iš pagrindinių problemų visuose tiesioginiuose alkoholio kuro elementuose yra vangiai vykstanti reakcija, todėl kyla naujų katalizinių medžiagų poreikis. Pt paremti katalizatoriai yra gera priemonė reakcijos pagreitinimui, tačiau jų vartojimą riboja jų aukšta savikaina ir užsiteršimas anglies turinčiais reakcijos produktais [2]. Dėl šių priežasčių šiuo metu yra intensyviai ieškoma naujų elektrokatalitiškai aktyvių medžiagų, kurios galėtų sumažinti arba visai pakeisti Pt kiekį katalizatoriuje.

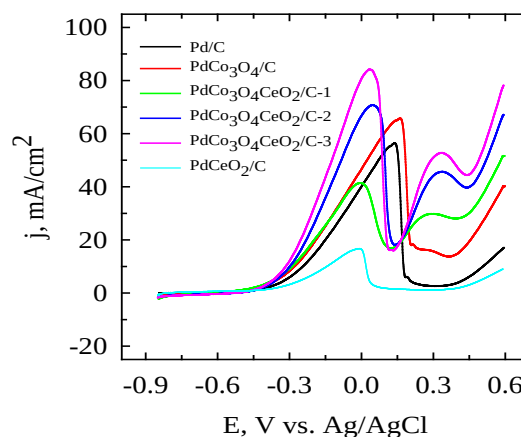
Šiame darbe pristatomas PdCo₃O₄CeO₂/C katalizatorius bei jo elektrokatalizinės savybės etilenglikolio oksidacijos reakcijai. Darbu buvo paruošti trys CeO₂/C pagrindai su skirtingu cerio oksido kiekiu. Co₃O₄ buvo nusodintas ant CeO₂/C pagrindų taikant sintezės mikrobangomis metodą. Ant gautų Co₃O₄CeO₂/C pagrindų Pd dalelės nusodintos redukuojant jas natrio borohidridu (NaBH₄) iš PdCl₂ tirpalo. Palyginimui suformuoti Pd/C, PdCeO₂/C ir PdCo₃O₄/C katalizatoriai tuo pačiu būdu nusodinant Pd nanodaleles ant anglies, CeO₂/C ir Co₃O₄/C pagrindų.

Katalizatorių sudėtis bei paviršiaus morfologija buvo charakterizuota peršviečiamos elektroninės mikroskopijos ir Rentgeno spindulių difrakcijos metodais. Elektrocheminiai matavimai buvo atliekami taikant ciklinės voltamperometrijos metodą.

Katalizatorių elektrokatalitiškai aktyvus paviršiaus plotas buvo nustatytas iš ciklinių voltamperometrinių (CV) kreivių užrašytų 0,5 M NaOH tirpale, esant 50 mV/s skleidimo greičiui. Elektrokatalizinio aktyvumo tyrimai etilenglikolio

oksidacijai buvo atliekami 1 M etilenglikolio ir 0,5 M NaOH tirpaluose esant skleidimo greičiui 50 mV/s.

Nustatyta, kad tirtų katalizatorių aktyvumas etilenglikolio oksidacijos reakcijai, didėja šia seka: PdCeO₂/C < PdCo₃O₄CeO₂/C-1 < Pd/C < PdCo₃O₄/C < PdCo₃O₄CeO₂/C-2 < PdCo₃O₄CeO₂/C-3. Tyrimų rezultatai parodė, kad PdCo₃O₄CeO₂/C-3 katalizatorius, turintis didžiausią CeO₂ kiekį, pasižymėjo didžiausiu aktyvumu etilenglikolio oksidacijos reakcijai. Tuo tarpu PdCeO₂/C katalizatorius, taip pat turintis didžiausią CeO₂ kiekį, tačiau neturintis Co₃O₄, pasižymėjo mažiausiu aktyvumu etilenglikolio oksidacijos reakcijai. Taip pat ir PdCo₃O₄/C katalizatorius rodė geresnes elektrokatalizines savybes etilenglikolio oksidacijos reakcijai lyginat su Pd/C katalizatoriumi. Atsižvelgiant į gautus duomenis, galime daryti išvadą, kad Co₃O₄ ženkliai pagerina Pd/C ir PdCeO₂/C elektrokatalizines savybes etilenglikolio oksidacijos reakcijai.



1 pav. Stabilizuotų anodinių kreivių išmatuotų ant tirtų katalizatorių 0,5 M NaOH + 1 M etilenglikolio tirpale, esant potencialo skleidimo greičiui 50 mV/s, palyginimas.

Literatūra

1. D. M. Fadzillah, S. K. Kamarudin, M. A. Zainoodi and M. S. Masdar, Int. J. Hydrogen Energy, **5**, 3037 (2019).
2. S. S. Siwala, S. Thakur, Q. B. Zhang, V. K. Thakur, Mat. Today Chem., **14**, 100182 (2019).

VIBRATIONAL STRUCTURE OF THE CARBON DIMER IN HEXAGONAL BORON NITRIDE: THEORETICAL STUDY

Vytautas Žalandauskas, Audrius Alkauskas

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

Layered van der Waals crystals are attracting increasing attention due to their unique chemical and physical properties. The discovery of quantum emission in hexagonal boron nitride (hBN) introduces potential applications in quantum communication [1].

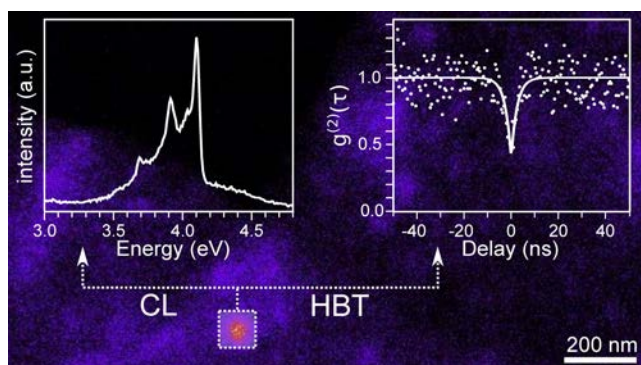


Fig. 1. CL emission spectra collected at the bright spot region and second-order correlation function acquired after irradiation [1].

Native point defects and impurities have been extensively studied using quantum chemistry calculations to determine the potential candidates of observed quantum emission. Recently carbon dimer defect ($C_B C_N$) was proposed to give rise to ubiquitous narrow luminescence band with a zero-phonon line (ZPL) of 4.09 eV [2]. The purpose of this work is to calculate the vibrational lineshape of the carbon dimer defect.

First-principles calculations were performed using *Vienna Ab-initio Simulation Package* (VASP). Geometry optimisation calculations were performed in the excited and the ground state. Using novel first-principles methodology, spectral function $S(\hbar\omega)$ of electron-phonon coupling and luminescence intensity functions have been determined [3].

The calculated Huang-Rhys factor $S=1.69$ is consistent with the experimental estimate of $S=1-2$ [4]. The peak of $S(\hbar\omega)$ occurs at 197 meV which is in close agreement with experimental findings of 174–180 meV.

The reported results and the close to experiment luminescence lineshape allows us to confirm that carbon dimer is the defect responsible for the 4.09 eV luminescence line in hexagonal boron nitride.

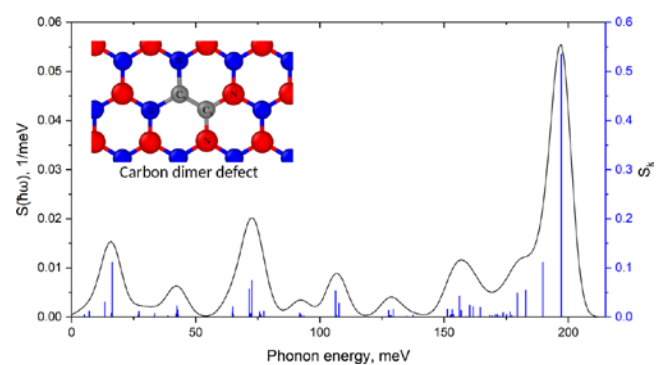


Fig. 2. The spectral function of electron-phonon coupling $S(\hbar\omega)$ (left vertical axis and black solid line) and partial Huang-Rhys factors S_k (right vertical axis and blue bars).

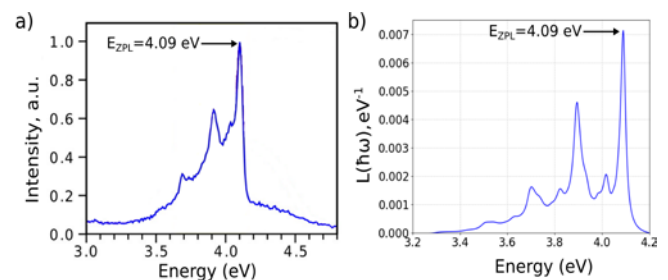


Fig. 3. a) Experimental cathodoluminescence (CL) emission spectra, b) calculated normalised luminescence lineshape.

References

1. R. Bourrellier *et al.* Nano letters **16**(7) p. 4317-4321 (2016).
2. M. Mackoitis-Sinkevičienė *et al.* Applied Physics Letters **115**(21) p. 212101 (2019).
3. A. Alkauskas *et al.* New Journal of Physics **16**(7) p. 073026 (2014).
4. A. Vokhmintsev *et al.* Journal of Luminescence **208** p. 363-370 (2019).

LAZERINĖS ABLIACIJOS EFEKTYVUMAS APDIRBANT METALUS ULTRATRUMPŲJŲ IMPULSŲ VOROMIS: GRĘŽIMAS IR FREZAVIMAS

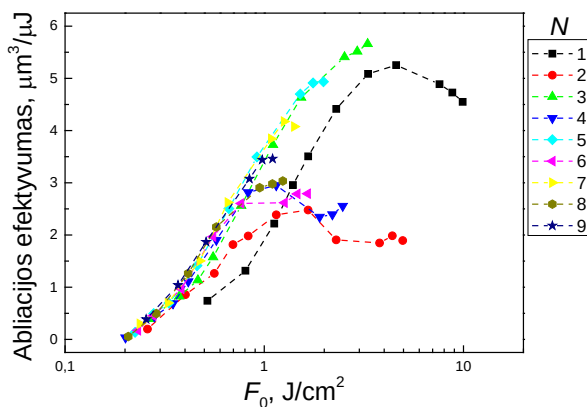
Mantas Gaidys, Andrius Žemaitis, Paulius Gečys, Mindaugas Gedvilas

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

Dėl sparčiai besivystančių technologijų, vis dažniau atsiranda mikrostruktūrų poreikis ant įvairių medžiagų. Šį poreikį sėkmingai pildo lazerinis mikroapdirbimas, nes tai yra itin tikslus, greitas ir universalus metodas. Abliacijos efektyvumas priklauso nuo daugybės parametrų, tokių kaip: vidutinė galia, impulsų pasikartojimo dažnis, impulsų trukmė ir k.t.

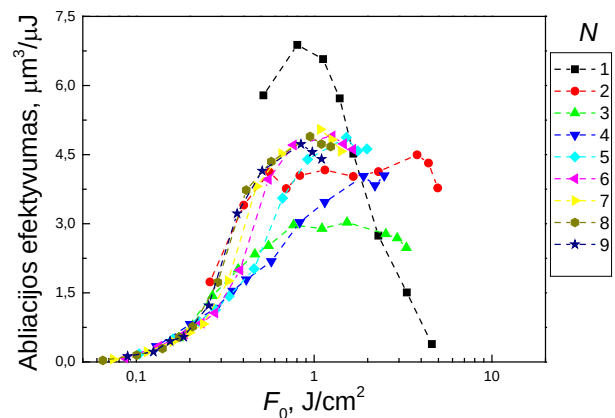
Tyrime naudojant lazerį impulsų voros ir bivoros režimuose buvo ieškoma optimalių lazerinių parametrų norint pasiekti didžiausią abliacijos efektyvumą gręžiant ir frezuojant metalus. Eksperimente buvo keičiamas impulsų skaičius voroje ir bivoroje. Impulsų trukmė buvo 210 fs, pasikartojimo dažnis 100 kHz, o voroje esančių impulsų pasikartojimo dažnis 64,68 MHz. Bivoros impulsų pasikartojimo dažnis siekė 4,88 GHz. Taip pat, bandinio paviršius buvo išvedamas iš pluošto sąsmaukos padėties, taip keičiant medžiagą pasiekiantį energijos tankį [1-2].

Lazerinio frezavimo varyje metu abliacijos efektyvumas buvo padidintas 10%, nuo $5,3 \mu\text{m}^3/\mu\text{J}$ iki $5,8 \mu\text{m}^3/\mu\text{J}$, kai trys impulsai sudarė nanosekundinę vorą lyginant su įprastu lazerio veikos režimu (1 pav.). Šis padidėjimas išmatuotas 2 – 3 J/cm² energijos tankių srityje. Šioje srityje taip pat gauta ir didžiausia abliacijos kokybė, apdirbto paviršiaus šiurkštumas buvo $R_a = 0,3 \mu\text{m}$. Bivoros režimas nebuvo efektyvus vario abliacijai.

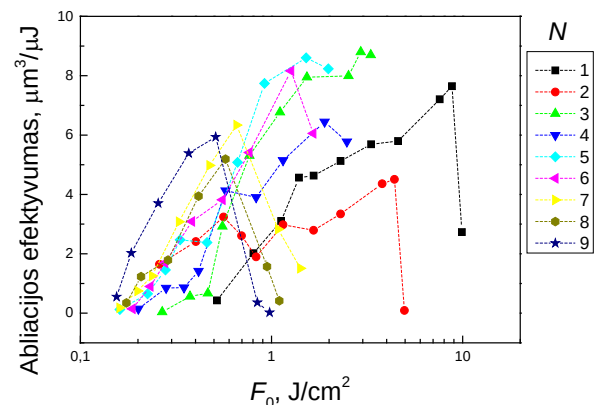


1 pav. Lazerinio frezavimo abliacijos efektyvumo priklausomybė nuo energijos tankio varyje voros veikoje esant skirtingiems impulsų skaičiams nanosekundinėje voroje.

Abliuojant nerūdijantį plieną įprasta pavienių impulsų veika buvo pasiektas $6,9 \mu\text{m}^3/\mu\text{J}$ abliacijos efektyvumas, tačiau nei impulsų voros, nei bivoros veika nepagerino šio rezultato (2 pav.). Lazerinio gręžimo varyje metu abliacijos efektyvumas buvo padidintas 16%, nuo $7,6 \mu\text{m}^3/\mu\text{J}$ iki $8,8 \mu\text{m}^3/\mu\text{J}$, kai trys impulsai sudarė nanosekundinę vorą (3 pav.).



2 pav. Lazerinio frezavimo abliacijos efektyvumo priklausomybė nuo energijos tankio nerūdijančiame pliene voros veikoje esant skirtingiems impulsų skaičiams nanosekundinėje voroje.



3 pav. Lazerinio gręžimo abliacijos efektyvumo priklausomybė nuo energijos tankio varyje voros veikoje esant skirtingiems impulsų skaičiams nanosekundinėje voroje.

Literatūra

1. A. Žemaitis, M. Gaidys, P. Gečys, G. Račiukaitis, M. Gedvilas, Opt. Lasers Eng. **114**, 83–89 (2019).
2. A. Žemaitis, P. Gečys, M. Barkauskas, G. Račiukaitis, M. Gedvilas, Sci. Rep. **9**, 12280 (2019).

SOURCE APPORTIONMENT OF BLACK CARBON AEROSOL IN BACKGROUND ENVIRONMENT (PREILA, LITHUANIA)

Daria Pashneva, Julija Pauraitė, Agnė Minderytė, Vadimas Dudoitis, Vidmantas Ulevicius, Kristina Plauškaitė, Steigvilė Byčenkienė

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

Black carbon (BC) is a solid form of mostly strongly light-absorbing component of aerosol particles at all wavelengths and is formed by the incomplete combustion of biomass and fossil fuel. BC influences climate through multiple mechanisms, i.e. absorbs both incoming and outgoing radiation of all wavelengths, which contributes to warming of the atmosphere and dimming at the surface; BC deposited on snow and ice darkens the surface and decreases reflectivity (albedo), thereby increasing absorption and accelerating melting, BC also alters the properties and distribution of clouds, affecting cloud reflectivity and lifetime ("indirect effects"), stability ("semi-direct effect"), and precipitation. Characterizing atmospheric aerosols at background areas are important for better understanding the influence of anthropogenic emissions on climate forcing and health effect [1].

Continuous real-time measurements of optical absorption by aerosol particles were investigated at Preila for the period from December 2017 to March 2018. Preila is a settlement in the Neringa region, on the Preilos bay. The settlement is part of the Preila-Pervalka parish centre. Preila is 6 km north of Nida, which is a large tourist destination. The village is surrounded by many hills Preilos, Vecekrugas and Karvaiciai.

In this study, equivalent black carbon (eBC) mass concentration was measured by using a Magee Scientific Company AethalometerTM, Model AE31 Spectrum, manufactured by Aerosol d.o.o., Slovenia. The optical transmission of carbonaceous aerosol particles was measured sequentially at 7 wavelengths

($\lambda = 70, 450, 520, 590, 660, 880$ and 950 nm). eBC was derived at 880 nm. All data was processed and evaluated. Weingartner correction was applied for values. The data points corresponding to invalid, extreme and missing values (zero or negative values) have been removed from the dataset.

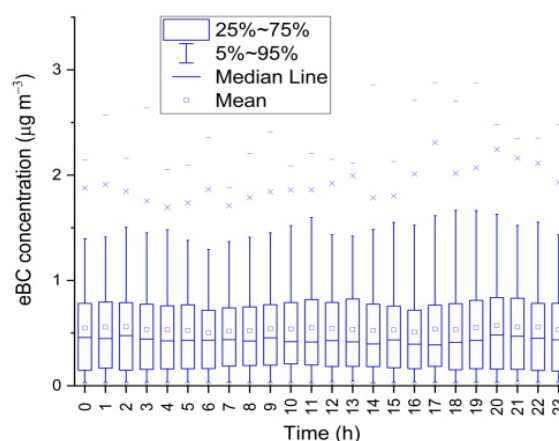


Fig. 1. Hourly variations of eBC in Preila during the study period.

The mean hourly variation of eBC is displayed in Fig. 1. It is shown that an evening peak occurring between 17:00 and 21:00. The increasing eBC during the evening could be attributed to more wood burning for residential heating and the homecoming traffic.

References

- [1] U.S. EPA, "Report to Congress on Black Carbon," *Dep. Inter. Environ. Relat. Agencies Appropriations Act, 2010*, no. March, p. 388, 2012.

HYDROTHERMAL SYNTHESIS OF PHOTOELECTROCHEMICALLY ACTIVE TUNGSTEN OXIDE LAYERS

Evelina Griniuk, Laura Michailova, Asta Grigučevičienė, Vidas Pakštas,
Jurga Juodkazytė, Milda Petrulėvičienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: evelina.griniuk@chgf.stud.vu.lt

Hydrogen production via photoelectrochemical (PEC) water splitting is expected to play an important role in solving the problems related with global environmental pollution and energy crisis. The photocatalytic activity of most single component semiconductor photocatalysts is still far from satisfactory due to the fast recombination of the photoinduced charge carriers, which inhibits the migration of photoelectrons and holes towards semiconductor/electrolyte interface to participate in the redox reactions [1]. Therefore, it is crucial to develop efficient and cost-effective photoelectrodes for water oxidation/reduction in PEC applications [2].

Among the numerous reported photoanode materials including α - Fe_2O_3 , BiVO_4 , WO_3 , TiO_2 , ZnO and Ag_3PO_4 , tungsten (VI) oxide is considered to be one of the most attractive visible-light-responsive materials for PEC water splitting due to its narrower band gap (E_g 2.4–2.8 eV) compared to TiO_2 and ZnO , appropriate valence band (VB) position (approximately 3.0 V vs. NHE), which provides a sufficient potential for water, oxidation [2]. Method and conditions of synthesis usually determine the morphology of photoactive layers, which is very important for efficient transport of photogenerated charge carriers.

In this work tungsten oxide coatings were synthesized using hydrothermal approach. Coatings were synthesized at 120°C, 140°C, 160°C and 180°C temperatures for 24 h. The composition of coatings was investigated using X-ray diffraction technique (Fig. 1). Surface area and roughness of coatings were analyzed using 3D optical microscope (Fig. 2). Photoelectrochemical performance was investigated in three electrode cell in 0.5 M H_2SO_4 solution under light irradiation.

References

1. Y. Deng, L. Tanga, Ch. Fenga, G. Zenga, Z. Chena, *Applied Catalysis B: Environmental*, **235**, 225–237 (2018).
2. G. Zheng, J. Wang, G. Zu, H. Che, Ch. Lai, H. Li, V. Murugadoss, Ch. Yan, J. Fan and Z. Guo, *J. Mater. Chem. A*, **7**, 26077, (2019).

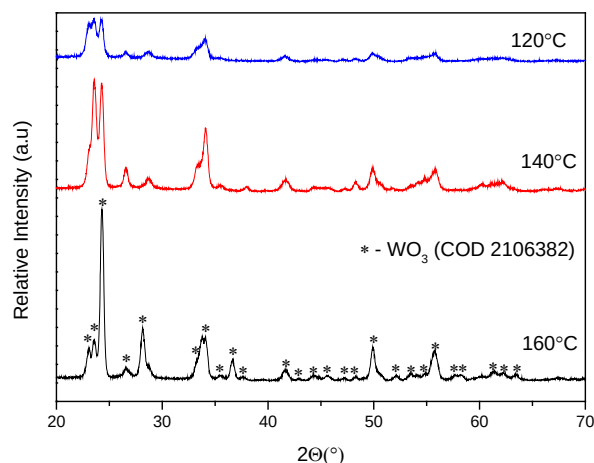


Fig. 1. XRD patterns of samples synthesized at different temperatures.

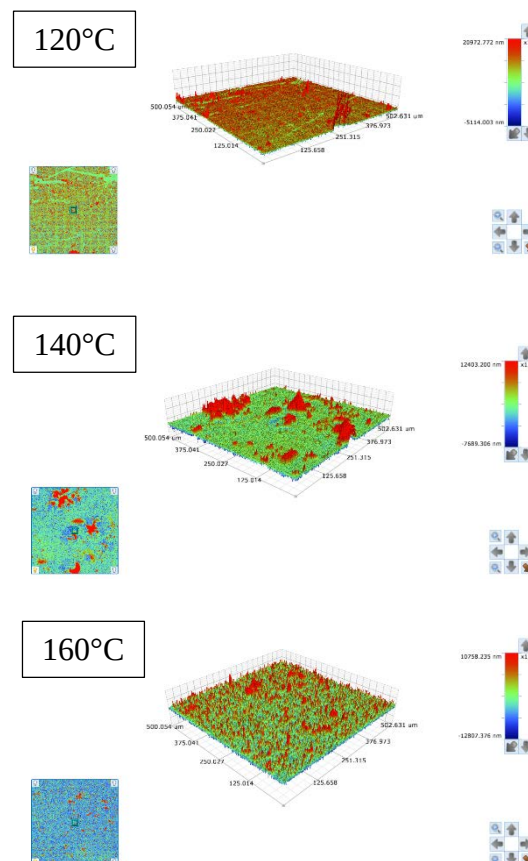


Fig. 2. Pictures of surface area and roughness of coatings.

INFLUENCE OF EDTA ON TUNGSTEN OXIDE FORMATION IN SOL-GEL PROCESS

Laura Michailova, Evelina Griniuk, Arnas Naujokaitis, Vidas Pakštas,
Gintarė Plečkaitytė, Milda Petrulėvičienė, Jurga Juodkazytė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Chemical Engineering and Technology
Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, email: laura.michailova@chgf.stud.vu.lt

The scarcity and growing demands for fossil fuels require to develop efficient and sustainable methods for fuel production using renewable energy sources. Photoelectrochemical (PEC) water splitting to produce H_2 using semiconductor photoelectrodes and solar energy is a promising approach to address these issues. Tungsten (VI) oxide WO_3 with a moderate band gap of 2.4–2.8 eV has been considered as suitable visible light responsive photoanode for PEC water splitting. Moreover, WO_3 is characterized by moderate hole diffusion length (~ 150 nm) compared with $\alpha\text{-Fe}_2O_3$ (2–4 nm) and better electron mobility ($\sim 12 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) compared to TiO_2 ($\sim 0.3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [1].

Properties of tungsten oxide coatings strongly depend on synthesis conditions and additives used in the synthesis. A variety of synthesis techniques such as sol-gel, microwave, hydrothermal, solvothermal, chemical precipitation, and flame spray pyrolysis have been used to prepare WO_3 nanomaterial [2]. Particle size, porosity and morphology of tungsten oxide can be controlled with the help of structure directing agents.

In this work sol-gel approach was applied to synthesize tungsten oxide coatings using ethylenediaminetetraacetic acid (EDTA) as a structure directing agent. It was investigated how different molar ratios of W:EDTA influence the morphology and photoelectrochemical response of the films. Following W:EDTA ratios were investigated: 1:0.5, 1:1, 1:1.67 and 1:2. Morphology of coatings was analyzed using scanning electron microscope (SEM). Photoelectrochemical activity of WO_3 films was studied by means of cyclic voltammetry in three electrode cell in 0.5 M H_2SO_4 solution under illumination.

It was found that morphology of coatings strongly depends on amount of EDTA used in the synthesis (Fig. 1). Voltammetric investigations (Fig. 2) revealed differences in photoelectrochemical performance and

electrochemically active surface area of the coatings.

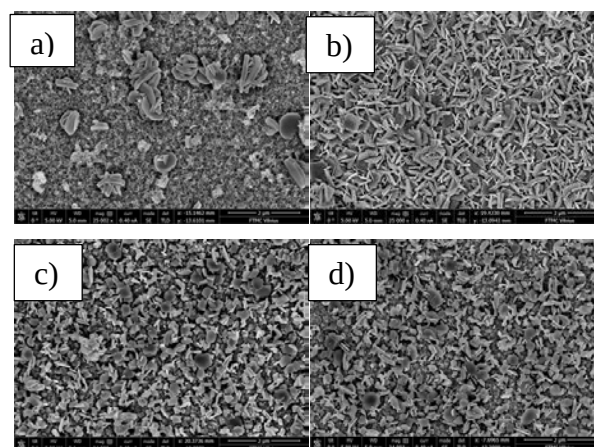


Fig. 1. Tungsten oxide coatings synthesized with different molar ratio of W:EDTA a) 1:0.5; b) 1:1; c) 1:1.67; d) 1:2.

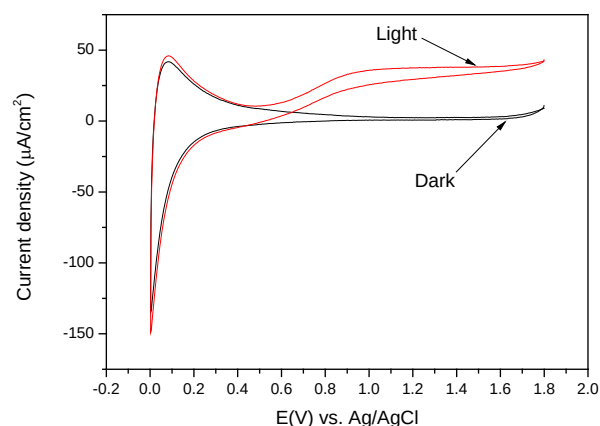


Fig. 2. Cyclic voltammograms of WO_3 sample prepared with W:EDTA ratio 1:2; 0.5 M H_2SO_4 , potential scan rate 50 mV/s, intensity of illumination $\sim 100 \text{ mW cm}^{-2}$.

References

1. G. Zheng, J. Wang, H. Liu, V. Murugadoss, G. Zu, H. Che, Ch. Lai, H. Li, T. Ding, Q. Gao and Z. Guo, *Nanoscale*, **11**, 18968–18994 (2019).
2. T. Govindaraj, C. Mahendran, V. S. Manikandan, R. Suresh, *J Mater Sci: Mater Electron*, **40**, 1–15 (2020).

WILDFIRES IN UKRAINE - IMPACT ON VILNIUS AIR QUALITY

A. Minderytė¹, J. Pauraitė¹, I. Garbarienė¹, G. Mainelis², J. Ovadnevaitė³, S. Kecorius⁴,
K. Plauškaitė¹, V. Dudoitis¹, L. Davulienė¹, S. Byčenkienė¹

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

² The State University of New Jersey, Department of Environmental Sciences, 14 College Farm Road NJ, USA

³ National University of Ireland, School of Physics, C-CAPS, University Road H91 TK33 Galway, Ireland

⁴ Leibniz Institute for Tropospheric Research, Permoserstraße 15 04318 Leipzig, Germany
email: agne.minderyte@ftmc.lt

Rising number of regions worldwide suffer from extreme weather events with drier and warmer periods due to proceeding climate change. Thus, it is expected that the grow in the number of wildfires and increased air pollution periods will continue to increase [1]. To the southeast of Lithuania in eastern Ukrainian region of Luhansk widely spread wildfires were burning for several weeks before the smoke event in Vilnius which we examine in this study.

On the 2nd October air quality monitoring stations recorded increased air pollution with particulate matter (PM) across Lithuania. In this study we demonstrate that increased PM and equivalent black carbon (eBC) mass concentrations in Vilnius were observed due to air mass long range transport from locations suffering from wildfires in eastern Ukraine (Fig. 1).

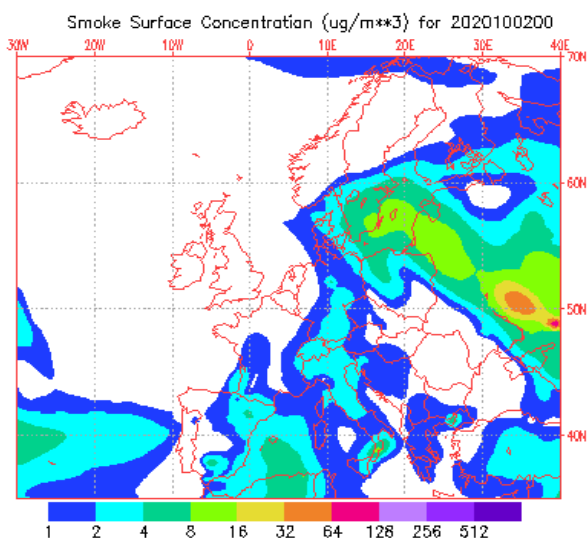


Fig. 1. Smoke surface concentration in long-range mass transport trajectories on 2020 Oct 2nd. Image retrieved via NRL NAAPS satellite measurements.

During 30th of September – 6th of October 2020 Aethalometer (Magee Scientific Company Aethalometer Model AE31 Spectrum) was deployed at the measurement site in Vilnius for determining the equivalent mass concentration of eBC, by measuring the attenuation of light intensity as light passes through a filter with sample. The systematic errors that occur during filter

replacement were removed by introducing the Weingartner correction [2]. Instrument was deployed in the building of FTMC main campus and was operating for both outdoor and indoor measurements.

From the determined eBC mass concentration we assess the corresponding indoor and outdoor air quality burden in Vilnius caused by the fires. As can be seen in Fig. 2 during the smoke event days eBC mass concentration increased 2.22 times in outdoor air comparing with non-event days. Furthermore, the impact of increased eBC mass concentration was observed on indoor air quality. Here eBC levels increased 2.20 times.

Thus, it can be concluded that long range transport of smoke particles from Ukraine caused significant impact on both outdoor and indoor air quality.

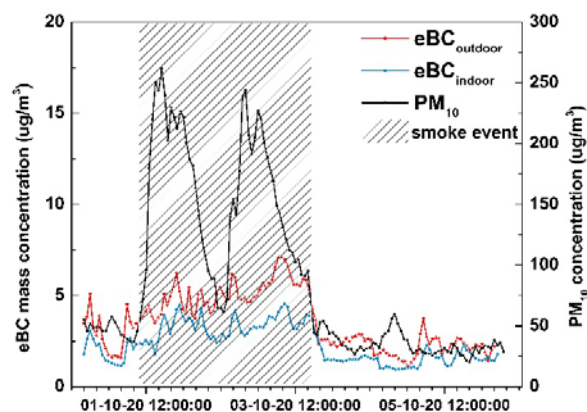


Fig. 2. Time series of eBC and PM₁₀ mass concentrations.

References

- [1] A. Ontawong, S. Saokaew, B. Jamroendarasame, and A. Duangjai, "Impact of long-term exposure wildfire smog on respiratory health outcomes," *Expert Rev. Respir. Med.*, vol. 00, no. 00, pp. 1-5, 2020.
- [2] E. Weingartner, H. Saathoff, M. Schnaiter, N. Streit, B. Bitnar, and U. Baltensperger, "Absorption of light by soot particles: Determination of the absorption coefficient by means of aethalometers," *J. Aerosol Sci.*, vol. 34, no. 10, pp. 1445-1463, 2003.

Acknowledgments

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

MODELLING SEMICONDUCTOR ALLOYS USING SPECIAL QUASI-RANDOM STRUCTURES

Rokas Silkinis¹, Audrius Alkauskas^{1,2}

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

²Kaunas University of Technology, Department of Physics
Studentų str. 50, LT-51368 Kaunas

Binary III-V semiconductors in their pure form are rarely used in optoelectronic applications. Much more often ternary alloys are employed. Alloying two semiconductors enables the tuning of many of its properties, such as the band gap and the lattice constant (Fig. 1).

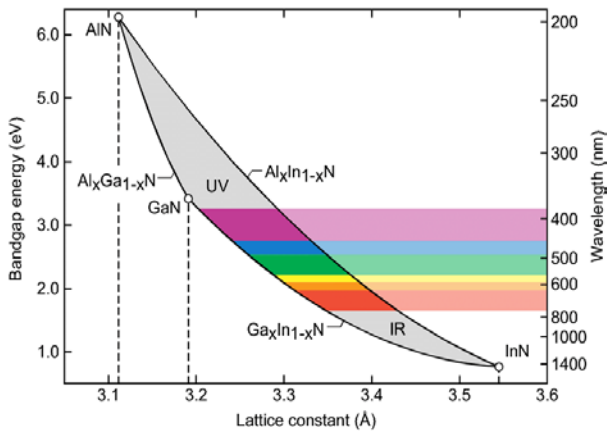


Fig. 1. Lattice constant versus band gap energy for nitride alloys (courtesy of Radoslaw Zwierz).

Theoretical analysis of periodic crystals consists of using density functional theory (DFT) for a small periodic element, called a supercell. Random alloys no longer have the periodicity of bulk crystals, which significantly complicates their theoretical analysis. So-called special quasi-random structures (SQRS)¹ are periodic arrangements of atoms that for a given supercell size approximate the truly random structure most accurately.

In this presentation we discuss the utility of SQRS in modelling AlGaIn alloys that are important for optoelectronic applications in the ultraviolet spectral region. First-principles DFT calculations were performed using Perdew-Burke-Ernzerhof form of the generalized gradient approximation (PBE-GGA). With the help of *mcsqs* algorithm from the *Alloy Theoretic Automated Toolkit* (ATAT)³ package, an optimal $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ supercell of 16 atoms was calculated (Fig. 2).

The effective band structure of $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ supercell was calculated using band unfolding algorithm *BandUP*⁴ (Fig. 3). It can be seen that the potentials created by the Al and Ga atoms in the alloy seem to be very similar.

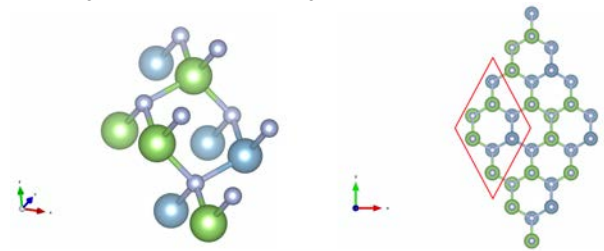


Fig. 2. Supercell of $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (16 atoms).

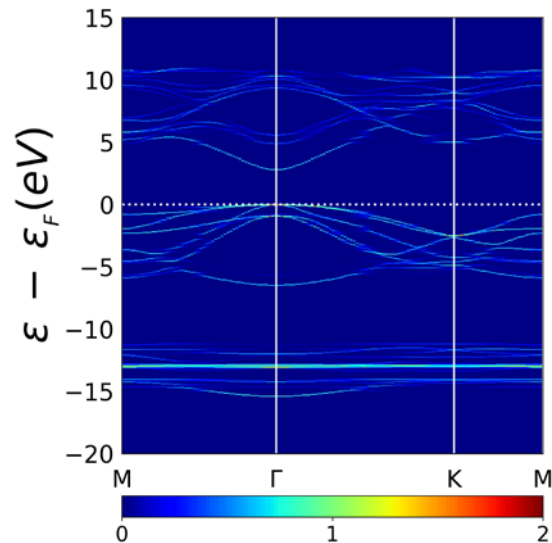


Fig. 3. The effective band structure of $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

The results seem to indicate that the concept of band structure can be a valid tool when analysing aperiodic ternary alloys.

References

1. A. Zunger, S.-H. Wei, L. G. Ferreira, and J. E. Bernard, Phys. Rev. Lett. **65**, 353 (1990).
2. V. Popescu and A. Zunger, Phys. Rev. B **85**, 085201 (2016).
3. A. van de Walle, M. D. Asta, and G. Cedar, Calphad **26**, 539 (2002).
4. P. V. C. Medeiros, S. Stafström, and J. Björk, Phys. Rev. B **89**, 041407 (2014).

BLACK SILICON BASED SUBSTRATE FOR SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTROSCOPY OF LIVING CELLS

Lena Golubewa, Ieva Matulaitienė, Renata Karpicz

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

Black silicon (bSi) is an etched silicon surface containing micro-cone arrays that effectively suppress reflection from UV to near infrared radiation while improving light scattering and absorption. This makes bSi coated with a nanometer layer of plasmonic metal, i.e. gold, an attractive substrate material for detecting biomacromolecules and living cells using surface enhancement Raman spectroscopy (SERS). In the present study we perform Raman measurements of 4-mercaptobenzoic acid (4-MBA) and living rat glioma cells C6 grown on the bSi/Au substrates, accompanied by numerical simulation by the finite element method and analysis of the density functional theory, and show that at an excitation wavelength of 785 nm, the SERS enhancement factor (EF) of the bSi / Au substrate achieves the value of 10^8 . The EF was calculated using the following equation [1]:

$$EF = \frac{I_{bSi/Au} / N_{bSi/Au}}{I_{bulk} / N_{bulk}}, \quad (1)$$

where $I_{bSi/Au}$ ($N_{bSi/Au}$) and I_{bulk} (N_{bulk}) are Raman intensities (numbers of irradiated molecules) of 4-MBA monolayer on the bSi/Au substrate and bulk 4-MBA on the SiO_2 substrate obtained at the same laser power and time accumulation, respectively. We demonstrate that such EF due to a combination of the electromagnetic and chemical enhancement mechanisms.

We also provide experimental determination of 4-MBA SERS spectra stability on the bSi/Au substrate over a long period of time and demonstrate the uniformity and efficiency of bSi/Au SERS substrate.

These findings make the SERS-active bSi/Au substrate suitable for detecting trace amounts of organic molecules with the outstanding sensitivity and specificity in relation to a small organic molecule of 4-mercaptobenzoic acid and living C6 rat glioma cells components (nucleic acids / proteins / lipids). The bSi/Au SERS-active substrate could be applied to the

investigation of the living cells' malignant transformation basing on the characteristic protein disulphide Raman bands as a marker.

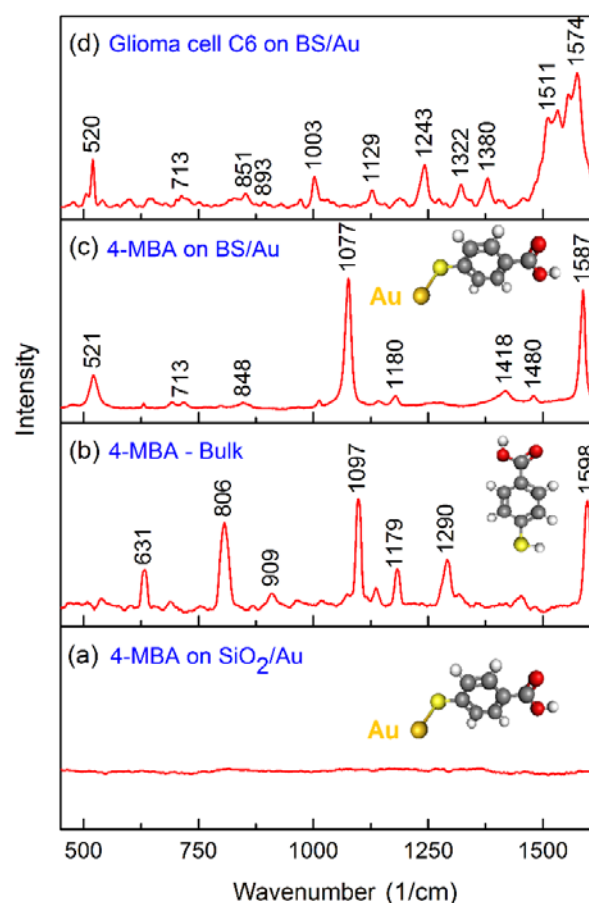


Fig. 1. Raman spectra of 4-MBA monolayer on SiO_2 /Au smooth substrate (a), of bulk 4-MBA (b), and SERS spectra of 4-MBA (c) and living rat glioma cell (d) on the bSi/Au substrate. The excitation wavelength is 785 nm [2].

Thus, bSi/Au is a highly sensitive and selective, scalable, and low-cost substrate for the lab-on-a-chip SERS biosensors that can be integrated into silicon-based photonics device.

References

1. C.J. Orendorff, A. Gole, T.K. Sau, and C. J. Murphy, *Anal. Chem.* **77**, 3261-3266 (2005).
2. L.Golubewa et al. *ACS AMI* (2020) (accepted).

ULTRASPARTUS TRIDIMENSINIS (3D) ŽMOGAUS TINKLAINĖS VAIZDINIMAS SU OPTINE KOHERENTINE TOMOGRAFIJA

Karolis Adomavičius, Ieva Žičkienė, Egidijus Aukorius

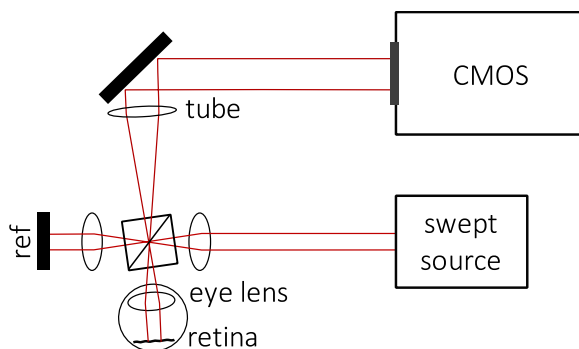
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolis.adomavicius@ftmc.lt

Dawid Borycki, Sławomir Tomczewski, Maciej Wojtkowski

Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland

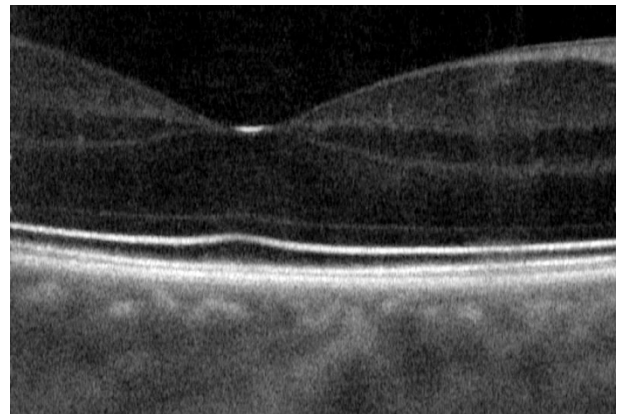
Optinė koherentinė tomografija (OKT) yra interferometrinis vaizdinimo metodas – plačiai taikomas akies vaizdinimui – kuris gali greitai užregistruoti tridimensinius vaizdus iš optiškai sklaidančių terpių, pasitelkiant mažo laikinio koherentiškumo šviesą.

Klasikinėse OKT sistemose signalas registruojamas taškiniu detektoriumi, todėl norint gauti 3D vaizdą, bandinį reikia fiziškai skenuoti tiek x , tiek y kryptimis (laikant, kad informaciją išilgai z ašies gali būti gaunama praktiškai iškart naudojant Furje registracijos metodą). Pilnojo lauko OKT (angl. FF-OCT) sistemoje (1 pav.) skenavimas yra nereikalingas nes signalas yra registruojamas iš visų bandinio taškų tuo pačiu metu naudojant ultrasparčią CMOS kamerą ($> 50\,000$ kadrų per sekundę). Derinamo bangos ilgio lazeris yra naudojamas užregistruoti multispektrinius interferencijos vaizdus iš žmogaus tinklainės. Tokių tridimensinių vaizdų Furje transformacija generuoja tikruosius tinklainės vaizdus. Tokiu būdu tridimensinis tinklainės vaizdas gali būti užregistruojamas per mažiau negu 10 milisekundžių.



1 pav. Pilnojo lauko optinės koherentinės tomografijos principinė schema.

OKT greitis yra labai svarbus vaizdinant žmogaus tinklainę *in vivo*, nes akies judesiai gali iškraipyti registruojamus vaizdus. Norint išvengti koherentinių triukšmų, tokių kaip tarpikselinė sąveika, atsiradimo, erdvinis lazerio koherentiškumas yra sumažinamas [1]. Kaip matyti 2 pav., aksialinis tinklainės vaizdas – gautas imant skerspjūvį iš registruotų tridimensinių duomenų – parodo įvairius jos sluoksnius. Tokie vaizdai, pasižymintys aukšta rezoliucija ir gyliu, yra labai naudingi diagnozuojant įvairias tinklainės patologijas. Šis metodas taip pat gali būti taikomas ir akies ragenei vaizdinti [2].



2 pav. Aksialinis (xz) žmogaus tinklainės vaizdas (pjūvis) užregistruotas su Furje-domeno FF-OCT sistema. Vaizdas ištrauktas iš tridimensinių duomenų kurie buvo užregistruoti per <10 ms. Iš viso 7 aksialiniai vaizdai buvo suvidurkinti.

Literatūra

1. E. Aukorius, D. Borycki, and M. Wojtkowski, "Crosstalk-free volumetric in vivo imaging of a human retina with Fourier-domain full-field optical coherence tomography," *Biomedical Optics Express* **10**, 6390-6407 (2019).
2. E. Aukorius, D. Borycki, P. Stremplewski, K. Liżewski, S. Tomczewski, P. Niedźwiedziuk, B. L. Sikorski, and M. Wojtkowski, *Biomedical Optics Express* **11**, 2849-2865 (2020).

OPTINĖS GARDELĖS PANAUDOJANT ŠUOLIUS TARP ŠALTŲ ATOMŲ VIDINIŲ BŪSENŲ

Povilas Račkauskas, Edvinas Gvozdiovas, Gediminas Juzeliūnas

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: povilas.rackauskas@ff.stud.vu.lt

Bozės ir Einšteino kondensatai bei išsiginusios Fermi dujos, yra ypatingos medžiagos fazės gaunamos atšaldžius iki nanokelvino eilės temperatūrų atomų dujas. Šiose mezoskopiniuose dariniuose stebimi kvantiniai reiškinių būdingi subatominių dydžių dalelėms, tad pastaruoju metu šaltieji atomai sulaukė didelio mokslinės bendruomenės susidomėjimo. Itin šaltų atomų dujos yra unikali sistema, įgalinanti emuluoti daugiadalelinius ir topologinius efektus kondensuotose medžiagose bei elementariųjų dalelių fizikoje. Pavyzdžiui, interferuojant keliems šviesos pluoštams, šaltiesiems atomams yra sukūriamos optinės gardelės, kurios yra plačiai taikomos simuliuojant įvairius kondensuotų medžiagų daugiadalelinius efektus. Todėl, labai svarbi šaltų atomų fizikos dalis yra naujų metodų kvantinių sistemų koherentinei kontrolei paieška ir tyrimas. Šiame darbe yra išplėčiamas šaltųjų atomų fizikos teoretinių įrankių rinkinys tiriant naujoviškų optinių gardelių, kurios pasižymi itin smulkia gardelės potencialo struktūra, formavimą itin šaltų atomų dujose.

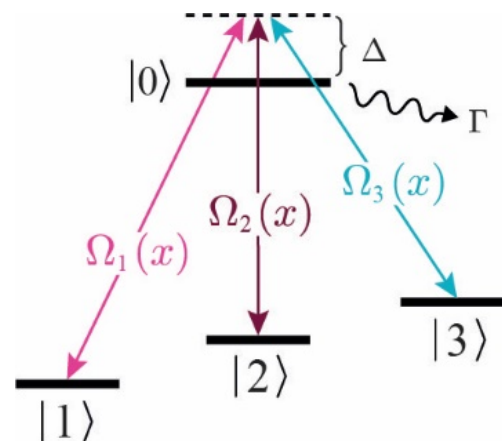
Paprastai optiniai potencialai yra suformuojami naudojant dipolines gaudykles ir pasitelkiant šviesos pluoštų Furje skleidinį. Taip kuriamų potencialų erdvinė skyra yra apribota šviesos difrakcinės ribos, todėl ilgą laiką galimybės, sukurti itin smulkiomis struktūromis pasižyminčius potencialus, buvo ribotos. Neseniai buvo pasiūlytas būdas sukurti optinius barjerus, kurie yra siauresni už formuojančios šviesos bangos ilgį naudojant Λ -schemą (lambda schemą), kai dvi žemiausios energijos atomo būsenos optiškai sukabinamos su viena sužadinta būsena [1-3]. Naudojant šį metodą, siauri optiniai barjerai yra atomo stipraus netiesinio atsako į šviesos pluošto veikimą rezultatas. Λ -schemoje formuojama ypatinga būsena vadinama tamsia, iš jos yra draudžiami šuoliai į sužadintą lygmenį.

Atomui esant sužadintoje būsenoje vyksta savaiminis spinduliavimas, kuris yra nepageidaujamas. Todėl atomus stengiamasi išlaikyti tamsioje būsenoje. Λ -schema pasižymi

viena tamsia būsena, todėl formuojamų potencialų taikymo galimybės yra ribotos. Tripodo schema, kai trys žemiausi atomo lygmenys yra optiškai sukabinti su vienu sužadintu lygmeniu (žr. 1 pav.), pasižymi dvejomis tamsiomis būsenomis [4]. Papilomas laisvės laipsnis leidžia formuoti daug sudėtingesnius potencialus, pavyzdžiui, turinčius neabelinę daugimatę struktūrą.

Šiame darbe atliekama tripodo schemos analizė ir nagrinėjamos galimybės sukurti optines gardelės su itin siauriais barjeriais bei turinčius mažesnį periodą negu formuojantys šviesos pluoštai naudojant šią schemą. Tiriama šių gardelių juostinė sandara.

Mokslinis tyrimas finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0238) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos Mokslo taryba (LMTLT).



1 pav. Tripodo schemos lygmenų diagrama.

Literatūra

1. F. Jendrzejewski, S. Eckel, T. G. Tiecke, G. Juzeliūnas, G. K. Campbell, L. Jiang, A. V. Gorshkov, Phys. Rev. A **94**, 063422 (2016).
2. M. Łącki, M. A. Baranov, H. Pichler, P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **117**, 233001 (2016).
3. Y. Wang, S. Subhankar, P. Bienias *et al.*, Phys. Rev. Lett. **120**, 083601 (2018).
4. J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, and M. Fleischhauer, Phys. Rev. Lett. **95**, 010404 (2005).

FS LAZERIU INDUKUOTŲ STRUKTŪRINIŲ POKYČIŲ STIKLUOSE TYRIMAS

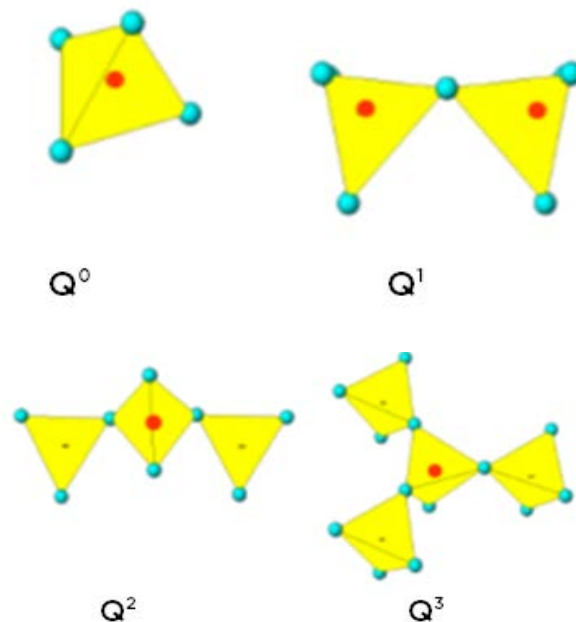
Laura Tauraitė, Kasparas Dryžas, Antanas Urbas, Sergejus Orlovas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius, Koherentinės optikos laboratorija
Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, el. p.: laura.tauraitė@ff.stud.vu.lt

Selektyvus ėsdinimas yra svarbus procesas elektronikos, optikos ir medicinos prietaisų komponentų gamyboje. Deja, cheminio ėsdinimo procesas yra laiko reikalaujantis procesas, o tai mažina gamybos našumą. Yra žinoma, kad paveikus soda-lime stiklą vainikiniu išlydžiu, pažeistose vietose ėsdinimo sparta kalio šarme (KOH) padidėja apie 80 kartų [1]. Taip pat pastebėta, jog paveikus borosilikatinį stiklą fs lazeriu kelis kartus padidėja HF rūgšties ėsdinimo sparta bei ėsdintos vietos paviršiaus lygumas. [2]. Šio darbo tikslas yra nustatyti ir palyginti kokie struktūriniai pokyčiai atsiranda stiklo struktūroje esant šarminių žemės metalų, boro ir aliuminio priemaišoms.

Soda-lime stiklas yra sudarytas iš silicio dioksido (SiO_2), natrio karbonato (Na_2CO_3) bei kalcio oksido (CaO) junginių. Struktūrinis tinklas šiame stikle yra sudarytas iš tetraedro formos silicio ir deguonies, Q grupės, junginių, kurie kartu jungiasi per tiltelinius deguonis (BO) (1 pav.). Priemaišiniai šarminiai metalai arba šarminiai žemės metalai, šiuo atveju Na ir Ca, modifikuoja stiklo struktūrinį tinklą, keisdami jo fizines ir chemines savybes. Naudojamas aliumosilikatinis stiklas sudarytas iš natrio oksido (Na_2O), magnio oksido (MgO), aliuminio oksido (Al_2O_3), silicio dioksido (SiO_2) ir kalcio oksido (CaO). Silikatiniam stikle esant aliuminio priemaišų, priklausomai nuo jų koncentracijos galimi du skirtingi procesai. Esant mažesnei aliuminio priemaišų nei šarminių metalų koncentracijai, aliuminis atlieka gardelės formuotojo funkciją ir keičia silicį gardelėje. Aliuminio tetraedrų $[\text{AlO}_4]^-$ krūvis kompensuojamas šarminio metalo. Šarminio metalo perteklius naudojamas netiltelinių deguonies jungčių (NBO) kūrimui. Esant aliuminio koncentracijai didesnei nei šarminio metalo, aliuminio tetraedro krūviai nebėra kompensuojami, todėl jis pakeičia gardelės struktūrą į oktaedro formą ir gardelę modifikuoja kaip ir šarminiai arba šarminiai

žemės metalai. Naudojamas borosilikatinis stiklas yra sudarytas iš silicio dioksido (SiO_2), boro oksido (B_2O_3), natrio oksido (Na_2O), magnio oksido (MgO) ir cinko oksido (ZnO). Borosilikatiniai stikluose boras sudaro daug skirtingų junginių ir užima silicio vietą formuojant gardelę. Boro sudaromi junginiai yra žinomi ir aprašyti [3].



1 pav. Q grupės junginių vizualizacija.

Tyrimo metu stiklo mėginiai yra paveikiami 1030 nm lazeriu. Pažeisti mėginiai analizuojami Ramano spektroskopijos metodu.

Ramano spektroskopija šiame tyrime yra atliekama 532 nm žadinamuoju pluoštu. Analizuojant gautus spektrus galima nustatyti stiklo struktūrų santykio pakeitimus. Žinant lazerio poveikį stiklo struktūrai, galima parinkti tinkamus lazerio veikos parametrus ir taip pasiekti efektyviausią selektyvų ėsdinimą.

Literatūra

1. Daisuke Sakai et al 2013 Jpn. J. Appl. Phys. **52** 036701.
2. A A Serkov and H V Snelling 2020 *J.Phys. D: Appl. Phys.* **53** 135306.
3. W.L. Konijnendijk and J.M. Stevels, J. Non-Crystalline Solids 18 (1975) 307.