



Fizikos
fakultetas



FIZINIŲ IR
TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ
CENTRAS



VILNIUS
TECH
Vilniaus Gedimino
technikos universitetas



kauno
technologijos
universitetas



45-oji

Lietuvos Nacionalinė Fizikos Konferencija

2023 spalio 25- 27 d., Vilnius

PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS

Konferencijos draugai:



Konferenciją remia:



Lietuvos
mokslo
taryba

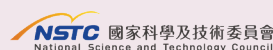


LIGHT
CONVERSION



BROLIS

MONO SPEKTRA



Vilniaus universitetas
Fizinių ir technologijos mokslų centras
Kauno technologijos universitetas
Vilniaus Gedimino technikos universitetas (VILNIUS TECH)
Lietuvos fizikų draugija

45-oji LIETUVOS NACIONALINĖ FIZIKOS KONFERENCIJA

2023 m. spalio 25-27 d., Vilnius

PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS



VILNIAUS
UNIVERSITETO
LEIDYKLA

2023

Bibliografinė informacija pateikiama

Lietuvos integralios bibliotekų informacinės sistemos (LIBIS) portale ibiblioteka.lt.

ISBN 978-609-07-0981-8 (skaitmeninis PDF)

DOI: <https://doi.org/10.15388/LNPC.2023>

Leidinį rengė

LNFK45 organizacinis komitetas

Vilniaus universiteto leidykla, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

info@leidykla.vu.lt, www.leidykla.vu.lt

Knygos internete knygynas.vu.lt

Mokslo periodikos žurnalai zurnalai.vu.lt

Konferencijos data:

Vilnius, 2023 m. spalio 25-27 d.

Konferencijos vieta:

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, A101

Konferencijos pirmininkas:

Lietuvos fizikų draugijos prezidentė prof. Gražina Tautvaišienė

Programos komitetas

Aidas Matijošius (VU)	Audrius Dubietis (VU)
Petras Balkevičius	Dalia Kaškelytė (VU)
Irmantas Kašalynas (FTMC)	Ričardas Rotomskis (VU)
Gediminas Račiukaitis (FTMC)	Valdas Sirutkaitis (VU)
Vidmantas Remeikis (FTMC)	Jūras Banys (VU)
Gintaras Valušis (FTMC)	Robertas Grigalaitis (VU)
Vladas Vansevičius (FTMC)	Edita Palaimienė (VU)
Rigonda Skorulskienė (VU)	Šarūnas Svirskas (VU)
Giedrius Laukaitis (KTU)	Egidijus Anisimovas (VU)
Saulius Mickevičius (VDU)	Gediminas Gaigalas (VU)
Artūras Jukna (Vilnius TECH)	Valdas Jonauskas (VU)
Aurelijus Rinkevičius (VU)	Gediminas Juzeliūnas (VU)
Darius Abramavičius (VU)	Aušra Kynienė (VU)
Kristijonas Genevičius (VU)	Roma Lazauskaitė (VDU)
Justinas Čėponkus (VU)	Sigitas Tamulevičius (KTU)
Jevgenij Chmeliov (VU)	Gražina Tautvaišienė (VU)
Saulius Antanas Juršėnas (VU)	Mažena Mackoit-Sinkevičienė (VU)
Gintautas Tamulaitis (VU)	Mangirdas Malinauskas (VU)
Juozas Vidmantis Vaitkus (VU)	Andrius Juodagalvis (VU)
Ramūnas Aleksiejūnas (VU)	

Rengimo komitetas

Aidas Matijošius (pirmininkas)
Mindaugas Mačernis
(pirmininko pavaduotojas)
Dovydas Banevičius
(pirmininko pavaduotojas)
Mažena Mackoit-Sinkevičienė
Vidas Regelskis
Robertas Maldžius
Šarūnas Svirskas
Edvardas Kazakevičius
Šarūnas Mickus
Miglė Kuliešaitė
Justas Lebedevas
Simonas Draukšas

TURINYS

Konferencijos programa	4
Plenariniai pranešimai	11
Kviestiniai pranešimai	15
Žodiniai pranešimai	34
Stendiniai pranešimai. Sesija 1	81
Stendiniai pranešimai. Sesija 2	175
Apie konferenciją skaičiais	266

Konferencijos programa

Spalio 25 d., TREČIADIENIS

8:00	Fojė	Registracija				
9:00-9:30	A101	Atidarymas. Sveikinimo žodis VU vicerektorė Edita Sužiedėlienė , LMT pirmininkas Gintaras Valinčius , LMA prezidentas Jūras Banys , EPS prezidentas Luc Berge , ŠMSM ministro patarėjas Ignas Gaižiūnas , Lietuvos chemikų draugijos prezidentė Almira Ramanavičienė , Lietuvos matematikų draugijos prezidentas Artūras Štikonas , Lietuvos fizikos mokytojų asociacijos prezidentė Rigonda Skorulskienė , FTMC direktorius Gintaras Valušis , Užsienio fizikų draugijų video sveikinimai, VU FF dekanas LNFK-45 programinio ir organizacinio komiteto pirmininkas Aidas Matijošius				
9:30-11:00	A101	Plenariniai pranešimai				
9:30-10:15	P1	Grażina Tautvaišienė (VU, LFD)	„Lietuvos fizikų draugijai – 60“			
10:15-11:00	P2	Luc Bergé (Europos fizikų draugijos prezidentas, CEA, CELIA, Prancūzija)	„Laser-driven intense terahertz fields“			
11:00-11:15	Fojė	Bendra dalyvių nuotrauka				
11:15-11:30	Fojė	<i>Kavos pertraukėlė</i>				
11:30-13:00	A101	Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas G. Juzeliūnas (VU)				
11:30-12:00	K1	Bruno Robert (Pietų Paryžiaus universitetas)	„Vibrational Landscape of Excitons in Photosynthetic Proteins“			
12:00-12:30	K2	Emilia Witkowska (Lenkijos MA Fizikos institutas)	„Theoretical physics at IF PAN in Warsaw“			
12:30-13:00	K3	Hans Kjeldsen (Orhus universitetas, Danija)	„Measuring detailed properties of stars and exoplanets“			
13:00-14:00	<i>Pietų pertrauka</i>					
14:00-15:30	A101	Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas J. Banys (VU)				
14:00-14:30	K4	Laszlo Veisz (Umea Universitetas, Švedija)	„Synthesis of relativistic quasi-single-cycle light fields and their application in attosecond physics“			
14:30-15:00	K5	Valdas Pašiškevičius (Karališkasis technologijų institutas KTH, Švedija)	„Femtosecond pulse self-compression in second-order nonlinear media: Surfing soliton and polariton waves“			
15:00-15:30	K6	Audrius Dubietis (VU)	„Optinio parametrinio čirpuotų impulsų stiprinimo pasiekimai“			
15:30-16:00	Fojė	<i>Kavos pertraukėlė</i>				
Paralelinės sesijos						
16:00-17:30	A101	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas D. Abramavičius (VU)		D401	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas R. Aleksiejūnas (VU)	
16:00-16:30	K7	Vytautas Klimavičius (VU)	„Funkcinių medžiagų kietojo kūno BMR spektroskopija“	K8	Mantas Šimėnas (VU)	„Link elektronų sukinių mikrobangų kvantinės atminties“
16:30-16:45	O1	Kęstutis Aidas (VU)	„Joninių skysčių struktūros ir BMR spektrinių savybių modeliavimas MD simuliacijomis bei jungtiniais QM/MM metodais“	O5	Artūras Jukna (Vilnius Tech)	„Abrikosovo magnetinių sukurių prietaiso jėgos valdymas išoriniu magnetiniu lauku ir sukurių kanalo forma YBCO superlaidininko darinyje“
16:45-17:00	O2	Andrius Gelžinis (VU, FTMC)	„Fukoksantinių ir chlorofilų baltyminių kompleksų fluorescencijos gesinimas“	O6	Roland Tomašiūnas (VU)	„GaN antros eilės netiesinių optinių bangolaidžių formavimas ir tyrimas“
17:00-17:15	O3	Steponas Raišys (VU)	„Fotonų konversijos didinimas didelio ploto polimeriniuose sluoksniuose panaudojant multirezonansinius TADF spinduolius“	O7	Romualdas Čepas (VU)	„Skersaryšinamos fluoreno pagrindo skylių pernašos medžiagos perovskitiniams saulės elementams“
17:15-17:30	O4	Mindaugas Mačernis (VU)	„Molekulių dinamikos skaičiavimai nestandartiniam kompleksams“	O8	Simona Streckaitė (FTMC)	„Isterbiu legiruoti cezio švino halidų perovskitų milteliai“
Paralelinės sesijos						
17:30-19:00	Specialus renginys			STENDINĖ SESIJA 1		
17:30-19:00	A101	Lietuvos fizikų draugijos veiklų apžvalga: Evaldas Tornau ir Andrius Bernotas - "Lietuvos fizikos žurnalas", Edita Palaimienė - Jaunųjų fizikų mokykla "Fotonas", Edmundas Kuokštis - Papildomo ugdymo mokykla "Fizikos olimpas", Jevgenij Chmeliov - Mokinių fizikos olimpiados. Sandra Pralgauskaitė - Gerosios įsitraukimo į fizikos mokslą patirtys. Mažena Mackoit-Sinkevičienė - Renginiai moksleiviams.		Fojė	Aplinkos ir energetikos fizika bei technologijos Astrofizika, astronomija ir kosmologija Biofizika ir medicinos fizika Cheminė fizika ir technologiniai taikymai Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara Fizikos pedagogika ir edukologija, istorija, terminija ir mokslo politika Nanomokslas ir nanotechnologijos Teorinė, statistinė ir skaičiuojamoji fizika Kitos su fizika susijusios temos	

Konferencijos programa

Spalio 26 d., KETVIRTADIENIS

8:30	Fojė	Registracija				
9:00-10:15	A101	Plenariniai pranešimai. Pirmininkas G. Valušis (FTMC)				
9:00-9:45	P3	Tomas Čeponis (VU) Lietuvos mokslo premija 2021	„Ištin didelių įtėkių poveikių daletėlių sensoriams tyrimai“			
9:45-10:15	K9	Skirmantas Ališauskas (DESY - FS-LA, Vokietija)	„DESY FLASH laikines-skyros eksperimentams naudojamų lazerinių sistemų apžvalga ir ateities planai“			
10:15-10:45	Fojė	Kavos pertraukėlė				
10:45-12:45	A101	Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas A. Dubietis (VU)				
10:45-11:15	K10	Vygantas Mizeikis (Sizuokos universitetas, Japonija)	„Tridimensinių optinių metastruktūrų realizavimas naudojant femtosekundinę lazerinę litografiją“			
11:15-11:45	K11	Gintaras Valušis (FTMC)	„Parametrinis aukštadažnės spinduliuotės stiprinimas ir harmonikų generacija GaAs/AlGaAs supergardenėse“			
11:45-12:15	K12	A. Lisauskas, K. Ikamas (VU) K. Baršausko premija 2021	„Kompaktiški elektroniniai terahercų dažnių šaltiniai ir detektoriai“			
12:15-12:45	K13	Gediminas Gaigalas (VU) A. Jucio premija 2021	„Antrinis kvantavimas ir papildomos simetrijos atomo fizikoje: teorija ir praktinis pritaikymas“			
12:45-14:00	Pietų pertrauka					
14:00-15:00	Ekskursija į „Light Conversio“, UAB (būtina išankstinė registracija)					
Paralelinės sesijos						
14:00-15:15	A101	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas R. Rotomskis (VU)		D401	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas V. Mizeikis (Sizuokos universitetas, Japonija)	
14:00-14:15	O9	Nerija Žurauskienė (FTMC)	„Tiesiogiai susintetinto MW-PECVD grafeno biojutiklis SARS-CoV-2 spyglio (S) baltymo detekcijai“	O14	Šarūnas Meškis (KTU)	
14:15-14:30	O10	Saulius Bagdonas (VU)	„Tetrapirolinių junginių fotovirsimų ypatumai sąlygoti molekulinės struktūros ir kintančių mikroaplinkos veiksnių“	O15	Kernius Vilkevičius (FTMC)	
14:30-14:45	O11	Greta Butkienė (NVI)	„Retaisiais žemųjų metalais legiruotos nanodalelės tikslinei navikų teranostikai“	O16	Asta Tamulevičienė (KTU)	
14:45-15:00	O12	Rimantė Bandzevičiūtė (VU)	„Šviesolaidinė ATR IR spektroskopija žmogaus šlapimo pūslės vėžinių audinių diagnostikoje“	O17	Vita Petrikaitė (FTMC)	
15:00-15:15	O13	Danielis Rutkauskas (FTMC)	„Plataus lauko antros harmonikos generacijos mikroskopija su mašininėmis mokymosi skydliaukės vėžio detekcijai“	O18	Domantas Peckus (KTU)	
15:15-15:45	Fojė	Kavos pertraukėlė				
Paralelinės sesijos						
15:45-16:45	A101	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas P. Vitta (VU)		D401	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas E. Anisimovas (VU)	
15:45-16:00	O19	Tadas Malinauskas (VU)	„Nuotolinė GaN epitaksija per grafeną“	O23	Viktor Novičenko (VU)	
16:00-16:15	O20	Kazimieras Nomeika (VU)	„Nepusiausvirųjų krūvininkų dinamika išsigimusiame N-poliškumo GaN“	O24	Mažena Mackoit – Sinkevičienė (VU)	
16:15-16:30	O21	Žydrūnas Podlipskas (VU)	„Kiek dislokacijų galima sutalpinti InGaN junginyje neparandant našumo?“	O25	Simonas Draukšas (VU)	
16:30-16:45	O22	Justinas Jorudas (FTMC)	„AlGaIn/GaN peteliškės tipo (BT) jutiklių tyrimas 300 K ir 80 K temperatūrose teraherciniame dažnių ruože“	O26	Vytautas Dudėnas (VU)	
Paralelinės sesijos						
17:00-18:30	Specialus renginys			STENDINĖ SESIJA 2		
17:00-18:30	A101	2023 metų fizikos ir chemijos Nobelio premijos bei jų sąsajos su Lietuvos mokslininkų darbais 1. Bronius Kaulakys (VU) „Nobelio fizikos 2021 metų premija. Laureatai ir jų tyrimai“. 2. Rimantas Budriūnas (VU, Light Conversion) „Kiek lietuviškų lazerių naudoja Nobelio premijų laureatai? 2018 ir 2023 metų fizikos Nobelio premijų reikšmė Lietuvos lazerininkams“. 3. Ričardas Rotomskis (VU) „2023 metų Nobelio premijos, už kvantinių taškų atradimą ir sintezę, atšvaistai Lietuvos mokslo padangėje“.		Fojė	Elektronika ir optoelektronika Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos Instrumentai ir matavimų technologijos Lazerių fizika ir technologijos Puslaidininkų ir kietųjų kūnų fizika Šviesos technologijos ir kvantinė optika	
19:00-22:00	VU, Saulėtekio al. 9, I rūmai		KONFERENCIJOS VAKARAS			

Konferencijos programa

Spalio 27 d., PENKTADIENIS

8:30	Foje	Registracija				
9:00-10:30	A101	Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas M. Malinauskas (VU)				
9:00-9:30	K14	Gediminas Račiukaitis (FTMC, LLA)	„Kur lazerių vieta sumaniame ir žalėjančiame pasaulyje?“			
9:30-10:00	K15	Gintautas Tamulaitis (VU)	„Bendradarbiavimo su CERN galimybės ir iššūkiai per vienos mokslininkų grupės prizmę“			
10:00-10:30	K16	Darius Abramavičius (VU)	„Sužadintų molekulinų kompleksų kvantinė dinamika: stochastiškumas ir negrįžtamumas“			
10:30-11:00	Foje	Kavos pertraukėlė				
Paralelinės sesijos						
11:00-12:30	A101	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas M. Vengris (VU)		D401	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas G. Tautvaišienė (VU)	
11:00-11:30	K17	Julius Vengelis (VU)	„Kontinuumo generacija fotoninių kristalų šviesolaidžiuose: derinamo dažnio femtosekundinio kaupinimo režimas“	O31 (15min)	Renata Minkevičiūtė (VU)	„Anglis ir azotas: raktai į žvaigždžių evoliuciją“
				O32 (15min)	Marius Maskoliūnas (VU)	„Gravitacinis mikrolėšis – įrankis pastebėti nematomus objektus“
11:30-11:45	O27	Mangirdas Malinauskas (VU)	„X-fotonė lazerinė 3D nanolitografija“	O33	Ashutosh Sharma (VU)	„Lengvųjų elementų santykių tyrimas žvaigždėse su planetomis“
11:45-12:00	O28	Virgilijus Vaičaitis (VU)	„Plačiajuostės terahercų dažnio spinduliuotės generavimas oro plazmoje, indukuotoje kompaktiško Yb:KGW lazerio impulsais“	O34	Leonid Pilyugin (VU)	„Paukščių Tako dvynės“
12:00-12:15	O29	Balys Momgaudis (VU)	„Superkontinuumo generacija safyre naudojant femtosekundinių lazerinių impulsų voras“	O35	Erikas Cicėnas (VU)	„Konvoliucinis neuroninis tinklas žvaigždžių spiečių aptikimui dangaus apžvalgose“
12:15-12:30	O30	Julius Lukošius (EKSPLA)	„Suminio dažnio generacijos spektroskopijos metodų palyginimas“	O36	Kastytis Zubovas (FTMC, VU)	„Fosilinių galaktinių tėmių evoliucija“
12:30-14:00	Pietų pertrauka					
Paralelinės sesijos						
14:00-15:30	A101	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas G. Gaigalas (VU)		D401	Žodiniai pranešimai. Pirmininkas A. Juodagalvis (VU)	
14:00-14:30	K18	Saulius Rudys (VU)	„Apžvalgos radaras lengvame bepilotyje orlaivyje“	O41	Aušra Kynienė (VU)	„Integruoto gamtos mokslų kurso modelio“
				O42	Rigonda Skorulskienė (KJG)	„ChatGPT ir Bard panaudojimo galimybės mokantis fizikos“
14:30-14:45	O37	Marijus Ambrozas (VU)	„Pikselinių detektorių lustų prototipų, skirtų CMS II fazės atnaujinimui, kalibracijos tyrimas“	O43	Liudvikas Kimtys (VU)	„Prof. Henrikas Jonaitis : mokytojas, mokslininkas, didis humanistas... (110-jų gimimo metinių progai)“
14:45-15:00	O38	Karolis Kazlauskas (VU)	„Mėlyno TADF-OLED ilgaamžiškumo didinimas panaudojant legiravimą iterbiu“	O44	Evaldas Matijošaitis (VU)	„Gamtamokslinio tyrimo kompetencijų ugdymas fizikos laboratoriniuose darbuose“
15:00-15:15	O39	Aleksejus Kononovičius (VU)	„1/f triukšmas elementariuose (ne)persiklojančių stačiakampių impulsų modeliuose“	O45	Sandra Pralgauskaitė (VU)	„Kaip keičiasi Lietuvos fizikų požiūris į Europos lyčių lygybės politiką?“
15:15-15:30	O40	Šarūnas Masys (VU)	„Nanodeimantų paramagnetinių defektų geometrijos optimizavimas taikant sparčiuosius metodus“	O46	Judita Puišo (KTU)	„Lietuvos fizikė - sesuo Marija Margareta Milevičiūtė“
15:30-16:00	Foje	Kavos pertraukėlė				
16:00	A101	KONFERENCIJOS UŽDARYMAS. Geriausio jaunojo mokslininko ir geriausio standinio pranešimo apdovanojimai				

Konferencijos programa

STENDINĖ SESIJA 1, Spalio 25 d., 17:30 – 19:00

	DALYVIAI	APLINKOS FIZIKA
P1	Andrius Urba (FTMC)	Stereolitografijos būdu iš cirkonio dioksido atspausdinto gyvsidabrio halogenidų sorbcijai skitro sorbento privalumai ir trūkumai
P2	Darius Valiulis (FTMC)	Kietų dalelių taršos sezoninė kaita Peshawar ir Lahore (Pakistanas) didmiesčiuose, jos įtaka vėžinių ir lėtinių plaučių ligų atveju augimui
P3	TOUQEER GILL (FTMC)	Anglies aerolių kilmės Maniloje, Filipinuose apibūdinimas: lyginamasis tyrimas dviejose vietose
P4	Kamilė Kandrotaitė (FTMC)	Akustinis ultrasmulkių dalelių filtras dujų išmetimo sistemoms
P5	Laurynas Bučinskas (FTMC)	Stabiliųjų anglies ir sieros izotopų pritaikymas KD1 šaltinių identifikacijai ir atskyrimui COVID-19 pandemijos metu
P6	Agnė Mašalaitė (FTMC)	Metinė anglies turinčių aerolių dalelių kaita vertinant per izotopinės sudėties prizmę
P7	Andrius Puzas (FTMC)	„Nulinio taško“ ¹³⁷ Cs bei Pu izotopinės sudėties foniniai tyrimai radiacinei aplinkai Rytų Lietuvoje įvertinti
P8	Agnė Minderytė (FTMC)	Apšviečiant aerolių daleles miesto aplinkoje: juodosios anglies šaltinių kilmės atskyrimas ir optinis aerolių dalelių klasifikavimas Vilniuje ir Varšuvoje šiltuoju sezonu 2022
P9	Andrius Garbaras (FTMC)	Aerolių dalelių dinamikos tyrimai uždaroje šaudykloje
P10	Gražina Gigaļūnaitė-Vonsevičienė (Vilnius Tech)	Radionuklidų savitųjų aktyvumų tyrimas Baltijos jūros pakrantės smėlio bandiniuose
P11	Rita Plukienė (FTMC)	Proporcingumo daugiklių metodo taikymai metalinių radiaktyviųjų atliekų charakterizavimui PREDIS projekte
P12	Kristina Mikalauskienė (FTMC)	Nedestrukcinis radioaktyviųjų kietųjų atliekų charakterizavimas pasitelkiant gama spektrometrinius Komptono/fotomaišės santykio matavimus bei MCNP6 modeliavimą
P13	Džiugas Vyšniauskas (VU)	Radionuklidų susidarymo aukšto įsodrinimo branduolinio reaktoriaus kure vertinimas
P14	Laurynas Juodis (FTMC)	Didesnio efektyvumo CeBr3 detektoriaus panaudojimas radioaktyviųjų atliekų savitojo aktyvumo matavimams in-situ
ASTROFIZIKA, ASTRONOMIJA IR KOSMOLOGIJA		
P15	Ugnė Jonauskaitė (VU)	Žvaigždžių su patvirtintomis masyviomis egzoplanetomis cheminė sudėtis
P16	Rasa Karpuškienė (VU)	Ultravioletinių P II linijų f-vertės gautos iš astrofizikinių stebėjimų ir teorinių skaičiavimų
P17	Eimantas Kriščiūnas (FTMC)	Andromedos galaktikos žvaigždžių spiečių sistema
P18	Karolis Daugevičius (FTMC)	Žvaigždžių spiečių tyrimo galimybės artimoje Visatoje
P19	Carlos Viscasillas Vázquez (VU)	Pažangi karštųjų nykštukų klasifikacija naudojant Gaia DR3 ir dirbtinio intelekto
P20	Martynas Laužikas (FTMC)	Aktyvaus galaktikos branduolio kuriamos tėkmės poveikis žvaigždėdarai
P21	Matas Tartėnas (FTMC)	Stacionaraus eulerinio gardelės panaudojimas greitai grįžtamojo ryšio injekcijai SPH aktyviųjų galaktikų modeliuose
P22	Barkha Bale (VU)	Maišymas magnetiškai aktyviuose RS CVn milžiniuose
P23	Erika Pakštienė (VU)	Astroseisminiai amžiai Galaktikos archeologijoje
P24	Edita Stonkutė (VU)	Žvaigždės su planetomis. Aukštos skiriamosios gebos spektroskopiniai stebėjimai su Molėtų astronomijos observatorijos 1,65 m teleskopu
P25	Markus Ambrosch (VU)	Anglis ir azotas kaip papildomų maišymo procesų indikatoriai evolucionavusiose žvaigždėse
P26	Dmitrij Semionov (VU)	Jauno mažo tankio padrikojo spiečiaus FSR 0384 astrofotometrinis tyrimas
P27	Justas Zdanavičius (VU)	Padrikųjų spiečių Berkeley 86 ir Berkeley 87 tyrimas
BIOFIZIKA IR MEDICINOS FIZIKA		
P28	Evelina Kazlauskė (VGTU)	Kvantinio taško ir fotosensibilizatoriaus-chlorino e6 komplekso stabilumo tyrimai ląstelių auginimo terpėse
P29	Laura Kaziūnaitė (VU)	Natūralios kilmės fotosensibilizatoriaus vario chlorofilino fotostabilumo tyrimai
P30	Aušrinė Navickaitė (VU)	Nitellopsis obtusa atsako į aplinkos veiksnius tyrimas fluorescencijos spektroskopijos metodu
P31	Gerda Anužienė (VU)	Patogeninių bakterijų ir mielių identifikavimas FTIR ATR spektriniu metodu
P32	Viktoras Mažeika (VU)	Antros harmonikos generavimo mikroskopija ir dviguba Stokso poliarimetrija kolageno vaizdinimui
P33	Gabrielė Vasiliauskaitė (VU)	Magnio ir vario chlorofilinų-chitozano kompleksų fotostabilumo tyrimai
P34	Martynas Gavutis (FTMC)	Inkaruotų lipidų membranų struktūriniai tyrimai neutronų reflektometrijos metodu
P35	Rasa Miliukaitė (VU)	CuInZnS/ZnS kvantinių taškų poveikis vienlaščių dumblių autofluorescencijai
P36	Irma Dumbrytė (VU)	Danties struktūrinio vientisumo atskleidimas mikroįtūrkimo vietoje jungiant rentgeno spindulių kompiuterinę mikrotomografiją su fotoluminescencine spektroskopija ir mašininėmis mokymosi
P37	Martynas Riauka (VU)	Netiesinė multimodalinė poliarimetrinė mikroskopija melanomos diagnostikai ir prognostikai, naudojant mašininį mokymąsi
P38	Aistė Pešenytė (VU)	Baltymų struktūriniai tyrimai naudojant DEER spektroskopiją
P39	Agnė Kalnaitytė-Vengeliene (VU)	Sulfonatofenil porfirinų agregatų formavimosi ir savybių priklausomybė nuo pH ir koncentracijos
P40	Emilė Pečiukaiytė (K)	Apkonvertuojančių nanodalelių paviršiaus modifikavimas ir teranostinio komplekso su chlorinu e6 formavimas
P41	Džiugas Jurgutis (K)	Chemoterapinių vaistų poveikio žmogaus krūties vėžio ląstelių lipidinių pūslelių poliškumui tyrimas taikant raudonai fluorescuojantį BODIPY fluoroforą
P42	Yaraslau Padrez (FTMC)	Antros harmonikos generacijos mikroskopijos skydliaukės mazgų vaizdų svarbiausių statistinių parametų įvertinimas
P43	Kirill Skovorodko (FTMC)	Darbo vietos ir personalo apšvitos stebėjimas ir vertinimas radioembolizacijos su Ho-166 metu
P44	Juozas Vidmantis Vaitkus (VU)	Lyčių skirtumai stuburo disko fluorescentiniuose spektruose
P45	Greta Tamoliūnaitė (VU)	Fotosensibilizatorių TPPS ₂ ir TPPS ₃ palyginamieji spektriniai savybių ir agregacijos tyrimai kintant vandeninės aplinkos pH
CHEMINĖ FIZIKA IR TECHNOLOGINIAI TAIKYMAI		
P46	Sandra Barysaitė (VU)	CP29 fotosintetinis kompleksas: chlorofilų geometrija ir elektroninės būsenos
P47	Gabrielė Rankelytė (VU)	Baltyminės aplinkos elektrostatinė įtaka šviesorankos kompleksų pigmentų sužadintosioms būsenoms
P48	Žyginta Einorytė (VU)	Glibenklamido vandeniniuose joninių skysčių mišiniuose modeliavimas

Konferencijos programa

DALYVIAI		CHEMINĖ FIZIKA IR TECHNOLOGINIAI TAIKYMAI
P49	Einaras Sipavičius (VU)	[C ₄ mim][NO ₃] joninio skysčio ir jo mišinių su vandeniu tarpmolekulinės struktūros ir BMR parametrų modeliavimas
P50	Lukas Mikalauskas (VU)	Bioaktyviųjų joninių skysčių BMR tyrimas
P51	Jogilė Mačytė (VU)	Valerijono rūgšties struktūrinė analizė molekulių virpesinės spektroskopijos teoriniais ir eksperimentiniais metodais
P52	Ivan Halimski (FTMC)	Spektrinių savybių pokyčiai indukuoti trans-stilbeno agregatų susidarymu polistireno matricioje
P53	Delianas Palinauskas (VU)	BODIPY molekulių su mezo-formilo pakaitais fluorescencijos gyvavimo trukmės priklausomybės nuo tirpiklio sudėties teorinis tyrimas
P54	Benjaminas Malmiga (VU)	Kavitanduose inkapsuluotų alkanų struktūros bei dinamikos modeliavimas MD simuliacijomis
P55	Vilius Čirgelis (FTMC)	Selagibenzofenonų ir jų kompleksų su grafeno kvantiniais taškais optinių savybių tyrimas
P56	Jonas Franukevičius (VU)	Valentiškai nesurištos P-P sistemos BMR netiesioginės branduolių sąveikos J kitimo tyrimas su tankio funkcionalų teorija ir Car-Parrinello molekulių dinamika
P57	Rokas Dobužinskas (VU)	Skirtingo riebalų rūgščių kristališkumo įtaka HOMO ir LUMO lygmenims
P58	Dominyka Grašytė (VU)	SERS spektrinio metodo taikymas šlapimo pūslės vėžio diagnostikai iš šlapimo pūslės nuoplovų
P59	Simona Bučinskaitė (VU)	Kaprono rūgšties monomerų bei vandenilinio ryšio kompleksų struktūra. Matricinės izoliacijos IR spektroskopijos tyrimas
P60	Gediminas Kreiza (VU)	Legiruoti organiniai kristalai su itin aukšta atgalinės interkombinacinės konversijos sparta
P61	Aušra Vektariene (VU)	Ambidentinių anijonų aktyvumo tyrimas kvantinės chemijos metodais 1,4- ir 1,5- benzodiazepinonuose
P62	Tautvydas Taraškevičius (VU)	1,1-dichlorgermaciklopentano konformacinis tyrimas virpesinės spektroskopijos ir teoriniais metodais
P63	Rokas Garbačas (VU)	Transformatorių neuronų tinklų taikymas DFT molekulinį struktūrų optimizavimui skaičiavimams spartinti
P64	Mindaugas Karaliūnas (FTMC)	Naftos, kuro ir alyvos tyrimas Furjė transformacijos infraraudonojo spektroskopija terahercų srityje
ELEMENTARIŲ DALELIŲ, ATOMŲ IR BRANDUOLIŲ FIZIKA, MATERIJS SANDARA		
P65	Ignas Pocius (VU)	Dvigubo mikrobangų rezonatoriaus modeliavimas, gamyba bei taikymas EPR spektroskopijoje
P66	Augustinas Stepšys (VDU)	Kelių kūnų sistemų ryšio energijos skaičiavimai algebriniame branduolio modelyje
P67	Janina Grinevičiūtė (FTMC)	Dielektrinių lazerinių greitintuvų modeliavimas pasirinktiems parametrams
P68	Valdas Jonauskas (VU)	Jonizacijos elektronais N ²⁺ jone tyrimas
P69	Andrius Juodagalvis (VU)	Matavimo neapibrėžtumų koreliacijų įtaka matavimo ir modeliavimo rezultatų palyginimo kiekybiniam įvertinimui
NANOMOKSLAS IR NANOTECHNOLOGIJOS		
P70	Hassan Zhairabany (KTU)	Molibdeno legiruotų deimantų tipo anglies plėvelių mikrostruktūros ir nanotribologinių savybių tyrimas
P71	Kipras Čepaitis (FTMC)	1D plazmoninių gardelių formavimas naudojantis tiesioginiu lazeriniu rašymo metodu
P72	Frydrichas Mireckas (VU)	Hibridinių kompozitų su anglies nanodalelėmis žemo dažnio triukšmas
P73	Rodrigas Liudvinavičius (FTMC)	Titano pasluoksniu įtaka mikrogumbelių formavimui ir plazmoniniam sužadinimui plonoje aukso dangoje naudojant tiesioginį lazerinį rašymą
P74	Marius Saulėnas (VGTU)	Apkonvertuojančių nanodalelių dengtų aukso-baltymo nanoklasteriais teranostinių savybių tyrimai
P75	Germantė Paulikaitė (FTMC)	Ti ₃ C ₂ T _x Maksenų nanostruktūrų sintezė ir sąveikos su metileno mėlio organinėmis molekulėmis tyrimas
P76	Mantas Migauskas (VU)	Katodoluminescencija GaN kristaluose, užaugintuose ant grafeno/SiC padėklų
P77	Marija Kalnaitytė (FTMC)	Koloidinių Ag nanodalelių su SiO ₂ apvalkalu pritaikymas modelinio 4-MBA monosluoksniu spektrinio intensyvumo pokyčio analizei SERS metodu
P78	Muhammad Haris (KTU)	Aukšta sisteminė fotoelektrocheminio (PEC) vandens skaidymo kinetika naudojant plazmoninius nanokompozitus BiVO ₄
P79	Nadzeya Khinevich (KTU)	Žadinimo bangos ilgiui pritaikomi SERS padėklai biotiklų tykimams
TEORINĖ, STATISTINĖ IR SKAIČIUOJAMOJI FIZIKA		
P80	Teodora Kirova (LU)	Leucino ir Izoleucino atpažinimas paremtas fragmentacijos rezultatais electromagnetiniame lauke
P81	Rytis Kazakevičius (VU)	Anomalioji difuzija ir ilga atmintis rinkėjo modelyje
P82	Vidas Regelskis (VU)	Yang-Baxter lygtis
P83	Vincentas Mulevičius (VU)	Kondensacija dvimatėse topologinėse materijos fazėse
P84	Justas Kvedaravičius (VU)	Statistinių ir mastelinių erdvinės įvairovės indeksų dinamikos lizingo modelyje
P85	Goda Bankovskaitė (VU)	Likopeno su ciklodektrinu kompleksų Ab initio tyrimas
P86	Irmantas Ratas (FTMC)	Sinapsinio plastiškumo įtaka pirmo tipo neuronų sinchronizacijos režimams
P87	Tatjana Pyragienė (FTMC)	Neuroninių tinklų desinchronizavimas stabilizuojant nežinomas pusiausvyros būsenas
P88	Valdemaras Milkus (VU)	Vandens lašelio tūrio prognozavimas mikroskysčių gardelėse
P89	Valdemaras Milkus (VU)	Laštelių išsėdimas mikroskysčių gardelių eksperimentuose
P90	Pavel Rynkun (VU)	Ce ³⁺ jono energijos spektro ir radiacinių šuolių teorinis tyrimas
P91	Viktoras Pyragas (FTMC)	Košy triukšmo poveikis kvadratiškai integruojančių ir spaikuojančių neuronų tinklui esant ne-Košy heterogeniškumams
P92	Olga Suvorova (VU)	Didelės skvarbos medžiagų matavimams metodika mikrobangų intervale
P93	Justina Vaičiaitė (FTMC)	Užšaldytų modų artinys klasikinėse sistemose

Konferencijos programa

STENDINĖ SESIJA 2, Spalio 26 d., 17:00 – 18:30		
	DALYVIAI	ELEKTRONIKA IR OPTOELEKTRONIKA
P1	Ihor Krapivin (FTMC)	Vandens kiekio naftos dujinėje ir skystoje būsenose įvertinimas terahercų laikinės spektroskopijos metodu
P2	Domantas Vizbaras (VU)	Netiesinė terahercų spinduliuotės detekcija su grafeno lauko tranzistoriniais detektoriais
P3	Kęstutis Ikamas (VU)	250 GHz detektoriaus apertūros didinimas panaudojant 3x3 masyvą
P4	Tomas Grinys (VU)	Nuotėkio srovės tyrimas InGaN šviestuke dalyvaujant fononams
P5	Daniil Pashnev (FTMC)	Moduliuojamas amplitudės ir fazės THz spektrų su 2D plazmonais AlGaIn/GaN heterostrukūrose veikiamose nuolatine įtampa
P6	Sandra Pralgauskaitė (VU)	Artimosios infraraudonosios srities lazerinių diodų žemo dažnio triukšmo charakteristikos
P7	Miroslav Saniuk (FTMC)	Antenomis susieti AlGaIn/GaN didelio elektronų judrio tranzistoriai THz dažnio bangoms detektuoti
P8	Surya Revanth Ayyagari (FTMC)	Plataus THz spektrų ruožo Silicio ketvirčio bangos plokštės
P9	Kamilė Tulaitė (VU)	Purino pagrindu susintetintų D-A ir D-A-D' cheminių fluorescencinių jutiklių lyginamoji analizė
FUNKCINĖS MEDŽIAGOS IR DARINIAI, MEDŽIAGŲ TECHNOLOGIJOS		
P10	Šarūnas Jankauskas (KTU)	Mikrobangų plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu suformuotų grafeno/n-tipo Si(100) prietaisų fotovoltinės savybės
P11	Ilona Zamaraitė (VU)	Poliarizacijos perjungimo mechanizmai van der Waals sluoksniuose kristaluose
P12	Gabija Soltanaitė (VU)	Katodoluminescencijos dinamika skirtingos sudėties granatiniuose scintiliatoriuose
P13	Dzmitry Tsyhanok (VU)	Hibridiniai kompozitai su vario nanodalelėmis padengtais anglimi ir daugiasieniais anglies nanovamzdeliais elektromagnetiniams taikymams
P14	Manvydas Dapkevičius (VU)	Funkcionalizuotų perileno darinių taikymas fotonų konversijoje
P15	Julianija Nikitina (FTMC)	Periodiškai moduliuotų fotoninių struktūrų taikymas lazerinės spinduliuotės valdymui
P16	Edvardas Kazakevičius (VU)	Relaksacijos trukmių pasiskirstymo funkcijos in situ stebėjimas Na ₃ VTi(PO ₄) ₂ F ₃ stiklo kristalizacijos metu
P17	Vilma Kavaliukė (VU)	Ce _{0.9} Gd _{0.1} O _{1.95} kietųjų elektrolitų keramikų sintezė, kepinimas ir impedanso spektroskopija
P18	Justas Lekavičius (VU)	NIR fotonų konversija TES-ADT molekulinėje sistemoje
P19	Žygimantas Logminas (VU)	Grūdo dydžio poveikis fosfatais suklijuotų magnetoelektrinėms savybėms
P20	Šarūnas Svirkas (VU)	Relaksoriaus savybių tyrimas BaTiO ₃ pagrindu pagamintuose kietuosiuose tirpaluose
P21	Marius Navickas (VU)	Fotofizikinių procesų tyrimas fosfino oksido tipo fotoiniatoriuose
P22	Gediminas Usevičius (VU)	Struktūrinio fazinio virsmo CH ₃ NH ₃ PbCl ₃ hibridiniame perovskite tyrimas EPR spektroskopija
P23	Sergejus Balciunas (VU)	Amonio cinko formiato, legiruoto šarminiais metalais, dielektrinės savybės
P24	Liutauras Marcinauskas (KTU)	Chromo oksido ir Cr ₂ O ₃ kompozito dangų tribologinių savybių tyrimai
P25	Vadzim Haronin (VU)	Nb jonais legiruotų keramikų BiFeO ₃ -BaTiO ₃ dielektriniai tyrimai
P26	Vadzim Haronin (VU)	PbHf _{1-x} Sn _x O ₃ kristalų dielektriniai tyrimai
P27	Vadzim Haronin (VU)	Impulsinio lazerinio garinimo būdu užaugintų PZT epitaksinių sluoksnių elektrinės savybės
P28	Darya Meisak (VU)	Mikrobangų ekranavimo priklausomybė nuo temperatūros fosfatais surištose CoFe ₂ O ₄ -xBaTiO ₃ keramikose
P29	Martynas Kinka (VU)	Dielektrinės ir triboelektrinės UIO-66/PEBA kompozitų savybės
P30	Tomas Šalkus (VU)	Al _{0.04} Sc _{0.06} Zr _{0.9} O _{1.95} kietojo elektrolito impedanso spektrų modeliavimas ekvivalentine grandine ir analizė DRT matodu
P31	Kristina Bočkutė (KTU)	Padėklo įtaka bario cerato plonų dangų mikrostruktūrai ir elektrinėms savybėms
P32	Artyom Plyushch (VU)	Magnetoelektrinė sąveika fosfatais surištose BaTiO ₃ - xCoFe ₂ O ₄ multiferoiniuose kompozituose.
P33	Justinas Turčak (VU)	¹⁷¹ Yb jonų, implantuotų į CaWO ₄ paviršių, EPR tyrimai
P34	Jorūnas Dobilas (VU)	Manganitų plonųjų sluoksnių elektrinių bei magnetinių savybių tyrimas Monte Karlo metodu
P35	Aurimas Dubauskas (VU)	Rentgeno spinduliuote paveiktų kalcio pirofosfatų polimorfų kietojo kūno BMR tyrimas
P36	Andrejus Litvakas (KTU)	Nusodinimo temperatūros įtaka bismuto ferito ir bismuto titanato plonų plėvelių feroelektrinėms savybėms
P37	Andrius Ibenskas (FTMC)	Br ₂ I ₂ Py molekulių monomerinių, dimerinių ir polimerinių struktūrų modeliavimas
P38	Mindaugas Ilickas (KTU)	Fotocheminiu būdu susintetintų sidabro nanodalelių struktūriniai ir antivirusiniai tyrimai
P39	Edita Palaimienė (VU)	Ag _{1-x} Li _x NbO ₃ (x≤0,08) keramikos dielektrinė spektroskopija
P40	Eglė Martinaitytė (VU)	(1 - x)Na _{0.5} Bi _{0.5} TiO ₃ -xCdTiO ₃ kietųjų tirpalų dielektriniai ir pjezoelektriniai tyrimai
P41	Darius Virbukas (KTU)	SDC plonasluoksnių keramikų paviršiaus struktūros ir elektrinių savybių tyrimas
INSTRUMENTAI IR MATAVIMŲ TECHNOLOGIJOS		
P42	Vidmantas Kalendra (VU)	EPR su kriogeniniais stiprintuvais nepriklausančiais nuo bandinio temperatūros
P43	Robertas Maldzius (VU)	Signalų integravimo metodika matuojant poliarizaciją daugiasluoksniuose popierius-dielektrikas dangose
KVANTINĖ OPTIKA IR KVANTINĖ INFORMACIJA		
P44	Jonas Jeffrey Haist (VU)	Didelės galios lazerinės spinduliuotės sukurtų rentgeno spindulių srauto matavimas CMOS kameros dozimetru
P45	Domantas Burbas (VU)	Stiprios tolivelikės sąveikos ir geometrinė frustracija trumpesnėse už bangos ilgį Ramano gardelėse
LAZERIŲ FIZIKA IR ŠVIESOS TECHNOLOGIJOS		
P46	Jaroslav Kodz (FTMC)	Sanjako efektu pagrįstas neapgręžiamas optinis fazės variatorius
P47	Edvinas Aleksandravičius (VU)	Filamentacijos slopinimas netiesinėje kero terpėje fotoniniais kristalais
P48	Tadas Latvys (VU)	Sub-mikrometrinis apdirbimas fs-UV interferenciniu metodu
P49	Matas Krivičius (VU)	VECSEL IR srčiai be priekinio aušinimo
P50	Raimundas Burokas (FTMC)	Kompaktiško priverstinės Ramano sklaidos keitiklio kaupinamo GHz pasikartojimo dažnio ultratrumpųjų impulsų paketais kūrimas

Konferencijos programa

DALYVIAI		LAZERIŲ FIZIKA IR ŠVIESOS TECHNOLOGIJOS
P51	Ona Balachninaitė (VU)	Femtosekundinių lazerių indukuotos plazmos spektroskopiniai medžiagų tyrimai: plazmai indukuoti naudojamo lazerio bangos ilgio (UV ir IR) įtaka
P52	Žyginas Dabulis (VU)	Medžiagų paviršiaus cheminės sudėties vaizdinimas naudojant femtosekundinių lazerių indukuotos plazmos spektroskopijos metodą
P53	Augustė Černeckytė (FTMC)	Pakopinės rotacinės priverstinės Ramano sklaidos žadinimas vienetinių pikosekundžių trukmės lazerio impulsais
P54	Miglė Kuliešaitė (VU)	Polarizaciją išlaikančio fotoninių kristalų šviesolaidžio netiesinio atsako vertinimas naudojant fazės pokytį tarp statmenų poliarizacinių modų
P55	Aivaras Kazakevičius (FTMC)	Depolarizacijos kompensavimas 10 mJ, 100 W, 10 kHz hibridinėje lazerinėje sistemoje
P56	Matas Bernatonis (FTMC)	Elektrinių parametrų charakterizavimas „peteliškių“ formos THz jutikliuose su integruota difrakcine plokščia optika
P57	Gaudenis Jansonas (VU)	Polarizacinis skirtuminės bangos pašalinimas didinant optinio parametrinio stiprinimo efektyvumą
P58	Miglė Kuliešaitė (VU)	Didelio pasikartojimo dažnio ir vidutinės galios derinamo bangos ilgio UV-VIS femtosekundinės lazerinės sistemos kūrimas
P59	Justas Berškys (FTMC)	Airy tipo nehomogeniška polarizuoti pluoštai ir jų savybės
P60	Klemensas Laurinavičius (FTMC)	Azimutinės ir radialinės poliarizacijos vektoriųjų Beselio X impulsų tyrimas
P61	Jokūbas Pimpė (VU)	Kontinuumo erdvinio spektro matavimai įvairiose terpėse
P62	Karolis Redeckas (FTMC)	THz pluošto formavimas, taikant metamedžiagomis praturtintus plokščius lęšius
P63	Kasparas Stanaitis (FTMC)	Nebrangios THz optikos medžiagos: parafino ir polistereno palyginimas
P64	Augustė Stravinskaitė (VU)	Subnanosekundinių impulsų kombinuotos parametrinio stiprinimo sistemos optimizavimas
P65	Viktorija Tamulienė (VU)	Plačiajuotis terahercų spinduliuotės filtravimas periodinėje silicio struktūroje
P66	Simona Armalytė (VU)	Subnanosekundinių impulsų parametrinio šviesos stiprintuvo su fan-out gardelės dizaino MgO:PPLN kristalu ir kontinuumo užkrate optimizavimas
P67	Sergejus Orlovas (FTMC)	Dėl vaizdo kokybės įvertinimo neparaksialiniame vieno pikselio teraherciniame vaizdinime
P68	Giedrė Čepurnaitė (FTMC)	Kvantinių kaskadinių lazerių aktyviosios terpės fotolitografija ir konfigūravimas
PUSLAIDININKIŲ IR KIETŲJŲ KŪNŲ FIZIKA		
P69	Lukas Šiaulytis (VU)	Nepusiausvirųjų krūvininkų pernašos tyrimas InGaN sluoksniuose su skirtinga In koncentracija
P70	Andrea zelioli (FTMC)	InGaAs/GaAs ir GaAsBi/GaAs daugybinių kvantinių duobių didelio ploto fotoluminescencijos žemelapiai VECSEL gamybai
P71	Aivaras Špokas (FTMC)	GaAsBi staciakampių kvantinių duobių auginimo technologijos optimizavimas artimosios infraraudonosios srities emiteriams
P72	Gustas Petrusėvičius (FTMC)	Daugybinių GaAsBi kvantinių duobių artimosios infraraudonosios spinduliuotės šviestukas, skirtas integravimui ant silicio padėklo
P73	Karolina German (VU)	p-tipo GaN auginimas MOVPE būdu naudojant indžio surfaktantą
P74	Mikas Iršėnas (VU)	Ceriu legiruotų daugiakomponenčių granato tipo scintiliatorių, kurių sudėtyje yra skirtingi retųjų žemių elementų jonai, optinės savybės
P75	Simona Streckaitė (FTMC)	Energijos perdavimo procesai iterbiu legiruotuose cezio švino halidų perovskituose
P76	Viktorija Mickūnaitė (VU)	Katodoluminescencija nitridiniuose junginiuose esančių defektų aplinkoje
P77	Barbora Škėlaitė (FTMC)	Polarizacijai jautri rezonansinė terahercų emisija iš n tipo GaAs/GaAs struktūrų su metaliniais metapaviršiais
P78	Gertrūda Pociūtė (VU)	Scintiliacinių charakteristikų tyrimas MOCVD GaN su chemiškai išdintu paviršiumi po apšvitos protonais
P79	Arnoldas Solovjovas (VU)	Stipraus kolegiravimo Mg ²⁺ jonais poveikis šviesos emisijai ceriu legiruotuose daugiakomponenčiuose granatiniuose sintiliatoriuose
P80	Ernestas Kasparavičius (FTMC)	Perovskitinių saulės elementų fotolaidumo savybių tyrimas
P81	Margarita Biveinytė (VU)	Impulsinių krūvininkų dreifo charakteristikų tyrimas Si dalelių sensoriuose su vidiniu stiprinimu
P82	Augustas Baliukonis (VU)	Radiacinių defektų spektroskopija silicio pin struktūros dalelių sensoriuose
P83	Vytautas Janonis (FTMC)	Kryptingas koherentinis šiluminis spinduliavimas iš tiesinių ir apskritų n-GaN gardelių
P84	Ihor Zharchenko (FTMC)	Tyrinėjimas neišvengiamo karštų nešiotųjų efekto GaAs p-n jungtyje
P85	Patrik Ščajev (VU)	Cinku legiruotas cezio švino jodido perovskitas optoelektroniniams taikymams
P86	Oleg Kiprijanovič (FTMC)	YBaCuO plonų sluoksnių, perjungtų nanosekundiniais srovės impulsais, ominių sričių parametrai
P87	Linas Ardaravičius (FTMC)	Elektronų pernaša 2D AlGaIn/(AlIn)/GaIn ir 3D GaIn dariniuose stipriame elektriniame lauke
P88	Paula Baltaševičiūtė (VU)	Paviršinės rekombinacijos greičio augimas Si po švitinimo greitaisiais neutronais
P89	Jūras Mickevičius (VU)	Priverstinė spinduliuotė ir optinis stiprinimas InGaIn dariniuose
TECHNOLOGINIAI TAIKYMAI		
P90	Karolis Stankevičius (VU)	XDraw algoritmo taikymai difrakcijos modeliavimui naudojant 3D vektorinius pastatų duomenis



Lietuvos
Nacionalinė
Fizikos
Konferencija

**PLENARINIAI
PRANEŠIMAI**

Lietuvos fizikų draugijai – 60

Lithuanian Physical Society – 60

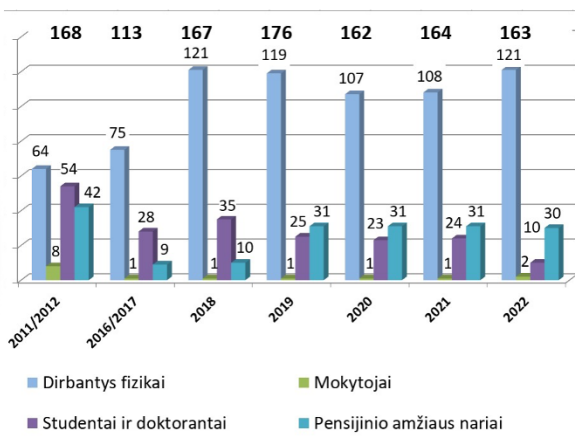
Grażina Tautvaišienė¹, J. V. Vaitkus, G. Valušis, J. Šulskus, M. Mackoit-Sinkevičienė, A. Juodagalvis, G. Laukaitis,
J. Banys, P. Balkevičius, G. Juzeliūnas, O. Rancova, V. Remeikis, Ž. Rutkūnienė, R. Skorulskienė, M. Sriubas

¹Lietuvos fizikų draugija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

grazina.tautvaisiene@tfai.vu.lt

Lietuvos fizikų draugija (LFD) buvo įsteigta 1963 m. kovo 29 d. Draugijos tikslas – vienyti Lietuvos fizikus, koordinuoti ir remti jų veiklą, siekiant prisidėti prie fizikos mokslo Lietuvoje plėtotės ir rūpinantis fizikos mokymu aukštosiose mokyklose ir kitose švietimo įstaigose. Fizikų potencialas yra sutelktas Fizinių ir technologijos mokslų centre, Vilniaus universiteto Fizikos fakultete, Kauno technologijos universiteto Matematikos ir gamtos mokslų fakultete, Vytauto Didžiojo universiteto Gamtos mokslų fakultete, Vilniaus Gedimino technikos universiteto Fundamentinių mokslų fakultete, Lietuvos energetikos institute, Baltijos pažangiųjų technologijų institute, su fizika susijusiose verslo įmonėse, tokiose kaip “Ekspla”, “Light Conversion”, “Brolis Semiconductors”, “EK SMA Optics” ir kt.

Ryškiausias Lietuvos fizikus sutelkiantis renginys – Nacionalinė fizikų konferencija. Šiais metais surengta jau 45-ąją kartą, konferencija sutraukė virš 200 dalyvių. Panašus yra ir LFD narių skaičius. Apžvelgus pastarojo dešimtmečio tendencijas (1 pav.) matome, kad dirbančių fizikos srityje skaičius yra ženkliai padidėjęs, tačiau studentų aktyvumas turėtų būti didesnis. Tačiau, prie LFD veikia Europos fizikų draugijos „Young Minds“ (liet. Jaunųjų protų) Vilnius skyrius, kuriam nuo 2016 m. vadovauja LFD viceprezidentė M. Mackoit-Sinkevičienė. Studentai, doktorantai ir jaunieji mokslininkai aktyviai veikia šioje organizacijoje. Vienas iš LFD tikslų ir siekių yra populiarinti gamtos mokslus visuomenėje, ypatingai jaunimo tarpe, kad jauni žmonės rinktųsi fizikos studijas, prisidėtų prie fizikos mokslo plėtos.



1 pav. Pastarojo dešimtmečio Lietuvos fizikų draugijos narių statistika.



2 pav. Europos fizikų draugijos istorinė vieta – Teodoro Grotuso laboratorija Žeimelyje, inauguruota 2022 m. liepos 2 d.

LFD atstovauja Lietuvos fizikams užsienyje. 1992 m. LFD buvo priimta į Europos fizikų draugiją (EPS), vienijančią 42 šalių fizikų draugijas. 2002 m. tapome Tarptautinės fundamentinės ir taikomosios fizikos sąjungos (IUPAP), vienijančios 60 teritorinių vienetų, nariais. Palaikome draugiškus santykius su JAV, Lenkijos, Prancūzijos ir kitomis fizikų draugijomis.

Ypač glaudus bendradarbiavimas vyksta su Europos fizikų draugija. 2022 m. liepos 2 d. buvo inauguruota pirmoji Baltijos šalyse EPS istorinė vieta – Teodoro Grotuso laboratorija Žeimelyje (2 pav.). 2022 m. Vilniuje įvyko 14-ji EPS „Atomų, molekulių ir fotonų“ konferencija, o 2025 m. planuojame surengti 51-ąją EPS Plazmos fizikos konferenciją. Lietuvoje platinamas EPS „Europhysics News“ žurnalas.

Iš IUPAP taip pat esame sulaukę dėmesio. 2018 m. Vilniuje vyko šios sąjungos vadovybės posėdis, dabartinė LFD prezidentė Gražina Tautvaišienė 2014 m. buvo išrinkta šios pasaulinės fizikų sąjungos viceprezidente, LFD viceprezidentas Gintaras Valušis ir Gražina Tautvaišienė dirbo savo mokslinių sričių komisijose.

LFD aktyviai prisideda organizuojant tarptautines konferencijas, remia moksleivių olimpiadas, organizuoja ir remia daugybę mokslo populiarinimo renginių ir veiklų, palaiko „Lietuvos fizikos žurnalas“ leidybą bei skleidžia informaciją apie leidinius fizikos tematika. LFD svetainė: <https://www.lietuvas-fizikai.lt>

Reikšminiai žodžiai: Lietuvos fizikų draugija.

Laser-Driven Intense Terahertz Fields

Luc Bergé

Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
CEA, DAM, DIF – 91297 Arpajon - France
& Université de Bordeaux – CNRS – CEA
Centre Lasers Intenses et Applications (CELIA), UMR 5107, 33405 Talence, France

Terahertz pulses are very popular because of their numerous applications, for example in security screening, medical imaging, time-domain spectroscopy and remote detection [1]. Located between microwaves and optical waves in the electromagnetic spectrum, terahertz waves can now be exploited in molecular spectroscopy from plasma emitters produced by femtosecond laser pulses ionizing gases such as air.

At non-relativistic laser intensities, gas plasmas created by two-color optical pulses supply suitable emitters free of any damage. Electrons are tunnel ionized by the asymmetric light field usually composed of a fundamental wavelength and its second harmonic [2]. The resulting “photocurrent” generates an ultrabroadband terahertz radiation, which finds direct applications in the coherent spectroscopy of complex molecules [3,4]. At relativistic intensities, plasma waves are characterized by a nonlinear longitudinal field used in laser-wakefield acceleration. Accelerated electrons crossing the plasma-vacuum interface then emit coherent transition radiation operating in the terahertz band [5,6].

This talk will review the different physical mechanisms involved in the terahertz emission by laser-gas interaction at moderate or relativistic intensity. First, recent results on plasma-based THz spectroscopy of crystal powders will be presented in the context of the project ALTESSE. Second, new perspectives in the production of ultra-intense terahertz pulses from electron acceleration in relativistic plasmas will be discussed. Finally, THz radiation originating from the ponderomotively-driven electron dynamics in strongly magnetized plasmas [7,8] will be addressed.

Particle-in-cell simulations will display evidence that THz pulses transmitted in this regime can reach field strengths > 100 GV/m and allow laser-to-THz conversion efficiencies exceeding 2% by adjusting the B-field strength and the background electron plasma density.

References

- [1] M. Tonouchi, *Nat. Photon.* **1**, 9691 (2007).
- [2] K.-Y. Kim, A. J. Taylor, J. H. Glowina, and G. Rodriguez, *Nat. Photonics* **2**, 605 (2008).
- [3] L. Bergé, K. Kaltenecker, S. Engelbrecht, A. Nguyen, S. Skupin, L. Merlat, B. Fischer, B. Zhou, I. Thiele, and P. U. Jepsen, *EPL* **126**, 24001 (2019).
- [4] A. Talbi, B. Zhou, P. U. Jepsen, S. Skupin, A. Courjaud and L. Bergé, *EPL* **143**, 10001 (2023).
- [5] J. Déchard, A. Debayle, X. Davoine, L. Gremillet, and L. Bergé, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 144801 (2018).
- [6] J. Déchard, X. Davoine, and L. Bergé, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 264801 (2019).
- [7] C. Tailliez, X. Davoine, A. Debayle, L. Gremillet, and L. Bergé, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 174802 (2022).
- [8] C. Tailliez, X. Davoine, L. Gremillet, and L. Bergé, *Phys. Rev. Res.* **5**, 023143 (2023).

Itin didelių įtėkių poveikių dalelių sensoriams tyrimai

Study of the impact of extreme fluences on radiation sensors

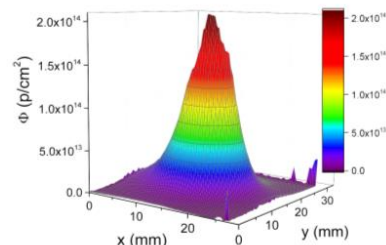
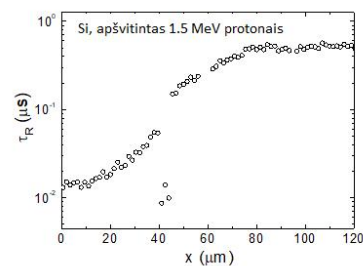
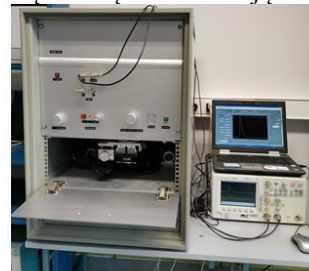
Tomas Čeponis, Eugenijus Gaubas, Juozas Vaitkus

Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
tomas.ceponis@ff.vu.lt

Didelių įtėkių poveikis spinduliuočių detektorių medžiagoms iš esmės keičia jų savybes ir procesų jose pobūdį [1], todėl būtini sisteminiai ir visapusiški šių reiškinių tyrimai. Nors šiuolaikinėje praktikoje yra plačiai išvystytos mažų įtėkių dozimetrijos technologijos ir instrumentinės sistemos, didelių įtėkių dozimetrijoje gausu problemų, nulemtų ženklios dalelių sensorių parametų kaitos matavimų metu. Tai siejasi su itin aštriais spinduliuočių poveikiais detektorių medžiagoms, kai atsiranda nauji sąveikų reiškiniai, kai pasireiškia ženklus procesų netiesiškumas ir susidaro kaskadinės bei klasterinės detektorių medžiagos pažaidos. Šiame tyrimų cikle ir buvo nagrinėjami reiškiniai, būdingi dideliais įtėkiais apšvitintuose dalelių detektoriuose, naudojamuose moderniausiuose didelio skaisčio, priešpriešinių pluoštelių dalelių greitintuvuose, branduoliniuose reaktoriuose, didelio intensyvumo radionuklidų šaltinių spinduliuotei registruoti. Pagrindinis šių tyrimų tikslas buvo sukurti naujas matavimų metodikas, tinkamas veikti karštos apšvitų zonose didelių įtėkių poveikių (in situ) metu. Šių metodikų kūrime buvo siekiama surasti būdus, leidžiančius tiesiogiai kontroliuoti detektorių pažaidų esminius faktorius, tokius kaip sandūros barjerų kaitą, medžiagos netvarkumo susidarymą. Aiškinantis detektorių medžiagų degradavimo esmines priežastis buvo sukurti radiacinių defektų aptikimo bei jų parametų spektroskopijos būdai [2,3]. Siekiant sukurti radiacijai atsparius detektorius buvo ištirtos radiacinių defektų sistemos įvairiose medžiagų klasėse: elementariuosiuose puslaidininkiuose Si bei Ge, klasikinėse spinduliuočių detektorių medžiagose CdTe, CdZnTe bei naujose detektoriams formuoti medžiagose, tokiose kaip ZnSe, CdS-Cu₂S, AlGaIn ir įvairios technologijos GaN medžiagose. Siekiant giliau suprasti detektorių atsaką netiesinių reiškinų srityje buvo nagrinėjami srovės impulsų formą nulemiantys faktoriai didelės injekcijos sąlygomis, griūtinio signalų vidinio stiprinimo režimuose, moderniuose mažo signalo griūtinių diodų (LGAD) konfigūracijos detektoriuose. Tuo tikslu buvo sukurtos specializuotos metodikos detektorių skersiniam (pjūvyje) skenavimui, krūvininkų transporto parametų įvertinimui netvarkiose, spinduliuočių pažeistose struktūrose, radiacinių emisijos centrų kontrolei.

Naujai sukurtų bei adaptuotų metodų realizavimui buvo sukurta visa seka instrumentų (pvz., 1 pav. pavaizduotas defektų pasiskirstymo skeneris ir pluoštelių vaizdinimo įrenginys VUTEG-4). Šie įrenginiai buvo įdiegti įvairios paskirties eksperimentams Helsinkio, Louvain la Neuve, FTMC greitintuvų laboratorijose arba

tėbėra instaliuoti CERN'e. Tuo būdu, sukurtos metodikos ir jų realizavimo sistemos yra aktualios moderniausių, didelio skaisčio dalelių greitintuvų sukurtamų spinduliuočių detektavimo problemoms spręsti. Surasti pažaidos mechanizmų ypatumai, būdingi radiacinių defektų didelių koncentracijų srityje.



1 pav. Radiacinių defektų pasiskirstymo skeneris ir pluoštelių vaizdinimo įrenginys VUTEG-4.

Pranešime bus apžvelgti svarbiausi šios pakraipos tyrimų rezultatai, apimantys sukurtas metodikas, jų taikymo sritis bei esmines įvairių medžiagų pažaidos charakteristikas.

Reikšminiai žodžiai: jonizuojančioji spinduliuotė, radiaciniai defektai, dalelių sensoriai.

Literatūra

- [1] C. Claeys, E. Simoen, *Basic Radiation Damage Mechanisms in Semiconductor Materials and Devices*, (Springer, Berlin, 2002).
- [2] E. Gaubas, E. Simoen, and J. Vanhellefont, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **5** P3108 (2016).
- [3] E. Gaubas, T. Ceponis, J.V. Vaitkus, *Pulsed capacitance technique for evaluation of barrier structures*, (LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, 2013).



Lietuvos
Nacionalinė
Fizikos
Konferencija

**KVIESTINIAI
PRANEŠIMAI**

Vibrational Landscape of Excitons in Photosynthetic Proteins

Bruno Robert, Manuel Llansola-Portoles and Andy Pascal
Institute of integrative Biology of the Cell, CEA Saclay, 91191 Gif sur Yvette

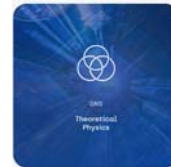
In the last two decades, the observation oscillations at ultrafast timescales in photosynthetic complexes has given rise to a number of fascinating hypotheses about the origin of the extremely high quantum efficiency of the primary steps of the photosynthetic process. These hypotheses generally put forward the importance of the vibrational modes coupled with the involved electronic transitions leading to the transduction of light energy. An essential question us thus to characterize the vibrational landscape of the excited states involved. However, in most photosynthetic proteins, excitonic coupling between closely located chlorophylls leads to the formation of molecular excitons, *i.e.* electronic excited states where the wavefunction is shared by two or more molecules.

We have performed careful analyses of the vibrational modes coupled with the electronic transitions of such states in a number of light-harvesting systems, and compared them with the mode observed for the corresponding isolated pigments. Our study yields to i) the determination of the extent of these molecular excitons, and the structure of the molecules involved, and ii) the characterization of vibrational modes only observed when pigments are bound to photosynthetic proteins. Presence of these additional modes likely opens new channels for excitation energy transfers, by vibration-assisted mixing of the excited states.

Theoretical Physics at IF PAN

Emilia Witkowska
Institute of Physics Polish Academy of Sciences
Aleja Lotników 32/46 02-668 Warsaw

October 2023 marks the seventieth anniversary of the establishment of the Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences (IF PAN) in Warsaw, Poland. On this occasion, I will present the past and the current profile of IF PAN. I will highlight recent research results integrating them with the historical facts and anecdotes concerning the first scientific environment and facilities as well as the creation of scientific divisions. Finally, I will put special emphasis on the research activities of the relatively newly formed division of theoretical physics.



www.ifpan.edu.p

Measuring detailed properties of stars and exoplanets

Hans Kjeldsen¹

¹Stellar Astrophysics Centre, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Ny Munkegade 120, 8000 Aarhus C, Denmark

hans@phys.au.dk

Asteroseismology – the study of stellar oscillations – is a relatively new and growing research field in astrophysics. The analysis of frequencies and other properties of stellar oscillations (see figure 1) allows us to constrain fundamental parameters of stars such as density, mass, radius, age, rotation period and chemical composition.

Oscillations are found in stars of all masses and essentially all stages of evolution. The amplitudes and phases are controlled by the energetics and dynamics of the near-surface layers and the frequencies are determined by the internal sound-speed and density structure of the star. Observationally, the frequencies can be determined with extremely high accuracy compared to any other quantity relevant to the internal properties of the stars. Analysis of the observed frequencies, including comparison with computed stellar models, allows determination of the properties of the stellar interiors as well as global stellar properties. Typically, one can determine the stellar mean densities to an accuracy of 1%, radii to 2–3%, masses to 5%, and ages to 5–10% of the main-sequence lifetime. For rotating stars, the angle of inclination can also be determined.

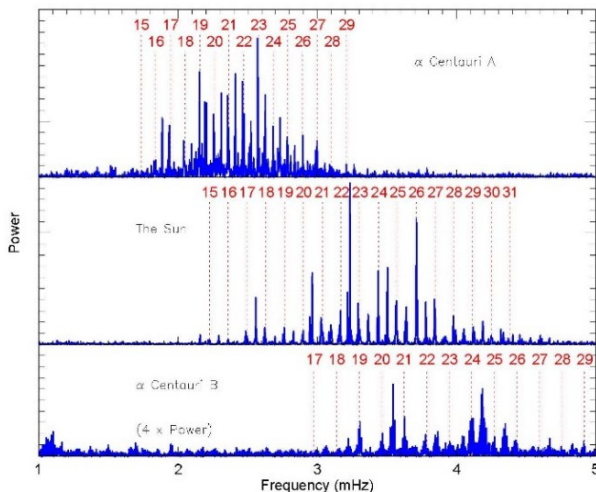


Figure 1. The power spectrum of oscillations in the stars α Cen A [1], the Sun and α Cen B [3]. The figure shows the details of the p -mode frequency structure, and indicated is the so-called large frequency separations for each star, which contain information on the stellar mean density.

Planetary transits (when an exoplanet will cross the disc of the host star) and the occultations (when the exoplanet passes behind the disc of the star) is a geometrical effect

that in general will scale with the absolute size of star (the stellar radius). The transit depth in the light curve is determined as the relative dip in the light curve during transit (see figure 2). The transit depth is a direct measure of the relative size of the exoplanet. Apart from the transit depth one can also measure the accurate orbital period for the exoplanet as the time difference between the centre of two transits in the light curve.

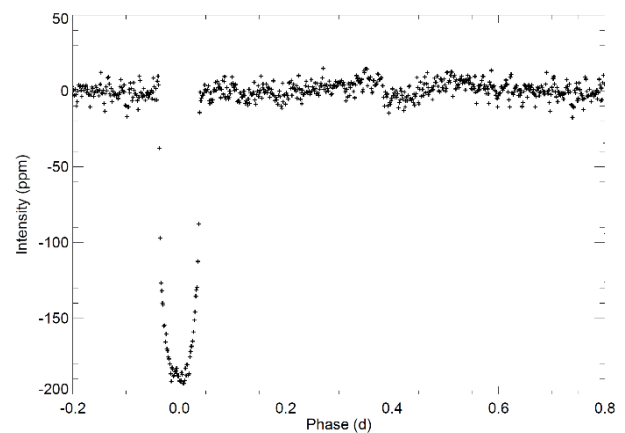


Figure 2. An example of an exoplanet transit in the star Kepler-10 [2]. The relative depth of the transit can be used to determine the relative size of the exoplanet ($R(\text{planet})/R(\text{star}) = 0.01254 \pm 0.00013$).

If we combine asteroseismology with planetary transit measurements one can obtain very accurate absolute values for the properties of both the host star as well as the exoplanet in orbit around a given star. Those measurements can be used to test structure and evolution of stars and exoplanets in a large number of specific cases. In this talk I will discuss detailed measurements of stars and exoplanets and present some of the results which are obtained by use of high-quality time series data from space combined with ground-based spectroscopy. I will also discuss and demonstrate why and how international research collaborations are essential for the success of those research activities.

Key words: stars, exoplanets, space missions, asteroseismology

References

- [1] Bedding, Kjeldsen, Butler, et al. (2004), ApJ, 614:380–385
- [2] Fogtman-Schulz; et al., (2014), ApJ, 781:67 (8pp)
- [3] Kjeldsen, Bedding, Butler, et al. (2005), ApJ, 635:1281–1290.

Synthesis of relativistic quasi-single-cycle light fields and their application in attosecond physics

Laszlo Veisz¹, Peter Fischer¹, Aitor De Andres¹, Alexander Muschet¹, Fritz Schnur¹, Sajjad Vardast¹, Sreehari Kaniyeri¹, Kárpát Ferencz^{2,3}, Roushdey Salh¹

¹Department of Physics, Umeå University, Linnaeus väg 24, 90187, Umeå, Sweden

²Wigner Research Centre for Physics, H-1121 Budapest, Hungary

³Optilab Kft., Sulyok u. 2, H-1031 Budapest, Hungary

Laser-plasma physics at ultrahigh intensities is normally driven by lasers with few-10 fs or longer pulse duration, while attosecond physics utilizes few-femtosecond sub-TW lasers. Certain applications involving the generation of intense and isolated attosecond x-ray or electron pulses, however, require the combination of the former systems that are not available from lasers. We report on the optical parametric synthesis of quasi-single cycle waveforms that can reach ultra-relativistic intensities up to 10^{21} W/cm². A pulse duration below 4.5 fs is achieved by amplifying the spectrum between 580 – 1020 nm in two separate spectral regions (see Fig. 1) in two consecutive optical parametric chirped pulse amplifiers. One stage pumped by 355 nm is optimized below 700 nm, while another pumped by 532 nm is optimized above 700 nm. This combination of amplifiers is called optical parametric synthesizer (OPS) [1], which serially synthesizes the spectrum (full spectrum propagates through all amplifiers). Three such OPS double stages provide 440-500 mJ energy in the short light pulse corresponding to 100 TW peak power. Furthermore, the high dynamic range temporal contrast of the system is excellent, which makes it a possible driver in relativistic experiments with nanometric solid targets. Typical applications in attosecond physics will be shortly introduced, such as high-harmonic generation from relativistic laser-plasmas [1,2], high-harmonic generation in gases [1,3], and nonlinear attosecond x-ray interaction [4].

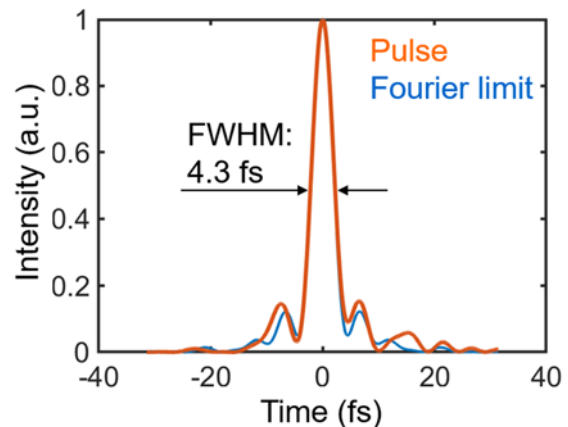
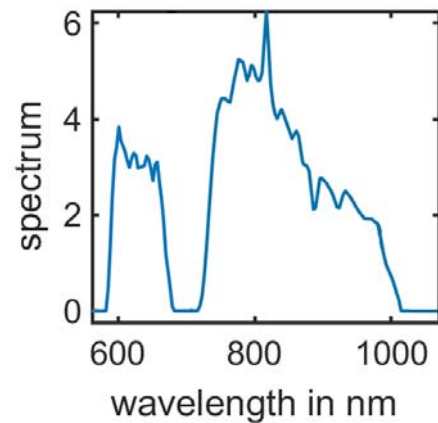


Fig. 1 [left] Spectrum of the Light Wave Synthesizer 100 OPS system, [right] Fourier limit and measured temporal intensity having 4.3 fs FWHM duration.

Literature

- [1] D. E. Rivas, et al. "Next Generation Driver for Attosecond and Laser-plasma Physics," *Sci. Rep.* 7, 5224 (2017).
- [2] D. Kormin, et al. "Spectral interferometry with waveform dependent relativistic high-order harmonics from plasma surfaces," *Nat. Commun.* 9, 4992 (2018).
- [3] D. E. Rivas, et al. " Propagation-enhanced generation of intense high-harmonic continua in the 100-eV spectral region," *Optica* 5, 1283 (2018).
- [4] B. Bergues, et al. "Tabletop nonlinear optics in the 100-eV spectral region," *Optica* 5, 237 (2018).

Femtosecond pulse self-compression in second-order nonlinear media: Surfing soliton and polariton waves

Valdas Pasiskevicius

Royal Institute of Technology, KTH, Roslagstullsbacken 21, 10691 Stockholm, Sweden

High-peak power solid-state ultrashort pulse lasers and chirped pulse amplified systems based on Yb³⁺-doped hosts offer high wall-plug efficiencies owing to relatively low quantum defect. That is also advantageous for average power scaling. As a result, such systems are finding widespread use in scientific and industrial applications. The spectral gain bandwidth in the most popular Yb³⁺-doped hosts typically limits the pulse length to hundreds of femtoseconds. Further spectral broadening is achieved by self-phase modulation in suitable Kerr media with subsequent pulse post-compression [1] or exploiting pulse self-compression using soliton propagation [2]. In the standard dielectric Kerr media with a positive Kerr coefficient, self-compression can happen only in the net anomalous dispersion regime. In the near-infrared spectral range, the net anomalous dispersion propagation can be realized using suitably designed chirped mirrors or exploiting dispersion control in gas-filled hollow-core waveguides. Alternatively, soliton propagation and pulse self-compression can be realized in net normal dispersion regime in second-order nonlinear interaction where the effective Kerr nonlinearity can be designed to be negative [3, 4].

This work investigated pulse self-compression and supercontinuum generation in second-order nonlinear crystals pumped in the net normal dispersion propagation regime. Two different pulse self-compression methods were realized. The first method relies on the design of the effective Kerr coefficient in quasi-phase-matched second-order ferroelectrics [5]. The structures were designed so that the effective Kerr nonlinearity was negative in the normal dispersion spectral range and positive in the anomalous dispersion regime. Pulse self-

compression and supercontinuum exceeding one octave have been obtained. The second spectral broadening and self-compression method relies on pulse interaction with self-generated phonon polariton shock waves in polar second-order nonlinear crystals. It is known that femtosecond pump pulses generate Cerenkov-type radiation in the THz spectral range in a second-order nonlinear medium due to optical rectification [6]. When associated with the phonon resonances, we found that this shock wave can back-act very efficiently on the original pump pulse, causing pulse spectral broadening and self-compression in the normal dispersion regime. These projects were performed in close collaboration with groups from Vilnius University Laser Center, Lund University, and Light Conversion Ltd.

References

- [1] V. Hariton, A. Bin Wahid, G. Figueira, K. Fritsch, O. Pronin, *Opt. Lett.*, 47, 1246 (2022).
- [2] L. F. Mollenauer, R. H. Stolen, J. P. Gordon, W. J. Tomlinson, *Opt. Lett.*, 8, 289 (1983).
- [3] S. J. Holmgren, V. Pasiskevicius, F. Laurell, *Opt. Express*, 13, 5270 (2005).
- [4] J. Moses, F. W. Wise, *Opt. Lett.*, 31, 1881 (2006).
- [5] A.-L. Viotti, R. Lindberg, A. Zukauskas, R. Budriunas, D. Kucinskas, T. Stanislaukas, F. Laurell, V. Pasiskevicius, *Optica*, 5, 711 (2018).
- [6] D. A. Kleinman, D. H. Auston, *IEEE J. Quantum Electron.*, 20, 964 (1984).

Optinio parametrinio čirpuotų impulsų stiprinimo pasiekimai

Advances in optical parametric chirped pulse amplification

Audrius Dubietis

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

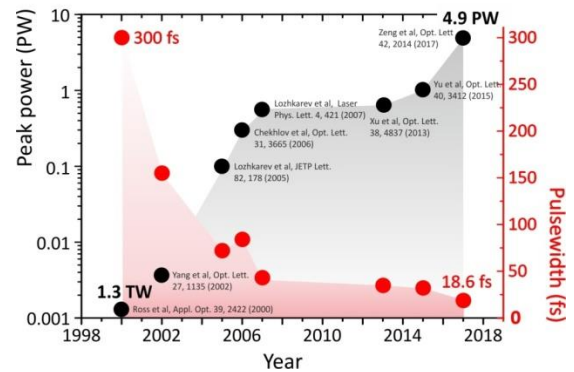
1985 metais D. Strickland ir G. Mourou Ročesterio universitete išrado Čirpuotų impulsų stiprinimo (*Chirped Pulse Amplification, CPA*) metodą¹, kuris išspindė fundamentinę su lazerinio stiprintuvo optiniu pažeidimu susijusią ultratrumpųjų šviesos impulsų stiprinimo problemą, taip atverdami praktiškai neribotas galimybes stiprinti šviesos impulsus iki didžiausių imanomų energijų. CPA metodas paskatinio spartų ultrasparčių kietojo kūno lazerių technologinį progresą, kuris savo ruožtu įkvėpė su lazeriais susijusių eksperimentinių mokslų suklestėjimą, atverdama naujas fizikinių, technologinių ir tarpdisciplininių tyrimų kryptis².

1992 metais A. Dubietis, G. Jonušauskas ir A. Piskarskas Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centre pademonstravo “modifikuotą CPA” metodą, kuriame vietoje lazerinio stiprintuvo pasiūlė naudoti parametrinį šviesos stiprintuvą³. Toks stiprinimo metodas, kuris buvo neužilgo pavadintas Optiniu parametriniu čirpuotų impulsų stiprinimu (*Optical Parametric Chirped Pulse Amplification, OPCPA*), puikiai suderina CPA metodo ir parametrinio šviesos stiprinimo teikiamus privalumus. Skirtingai nei lazerinis stiprinimas, parametrinis šviesos stiprinimas yra nerezonansinis procesas, t. y. jame nedalyvauja realūs medžiagos lygmenys, dėl to pasiekiamas didelis stiprinimas išvengiant šiluminių nuostolių. Toks stiprinimo būdas suteikia lankstumą pasirenkant norimą bangos ilgį ir užtikrina labai plačią stiprinimo juostą, kuri svarbi stiprinant pačius trumpiausius impulsus optiniame diapazone. OPCPA metodas greitai laiku pelnė pripažinimą, ir šandien OPCPA ir CPA metodai yra įvardijami kaip alternatyvų neturintys būdai generuoti labai didelės galios ultratrumpuosius šviesos impulsus. Šiuolaikinių petavatinių ($1 \text{ PW}=10^{15} \text{ W}$) lazerinių sistemų architektūros yra paremtos OPCPA ir CPA metodais ir įvairiomis jų kombinacijomis, taikant hibridines stiprinimo technologijas, ir netgi išskirtinai vien tik OPCPA metodą (1 Pav.)

Iki tol neįsivaizduojamos šviesos impulsų smailinės galios tapo ranka pasiekiamos, tačiau kita vertus, OPCPA kaip metodo, kuris gali būti taikomas ir labai kompaktiškomis (vadinamosioms *table-top*) lazerinėms sistemoms, pripažinimas vėlavo bent dešimčia metų. Tikras lūžis šioje srityje įvyko apie 2004 metus, o per pastarąjį dešimtmetį įvyko tokių OPCPA metodu paremtų sistemų kūrimo bumas (2 Pav.)⁴, kurį paskatino poreikis generuoti vis ilgesnio bangos ilgio keleto optinių ciklų trukmės impulsus stiprių laukų fizikos eksperimentams ir spartus diodais kaupinamų ultratrumpųjų impulsų kietojo kūno lazerių progresas.

Šių dienų kompaktiškos OPCPA sistemos leidžia generuoti pačius trumpiausius, daugiau nei optinės

oktavos spektro pločio impulsus, kurių smailinė galia siekia dešimtis teravatų ($1 \text{ TW}=10^{12} \text{ W}$), vidutinė galia jau peržengė 100 W ribą, o spinduliuotės bangos ilgių pasirinkimas toli pralenkė šiuolaikinių kietojo kūno lazerinių stiprintuvų galimybes.



1 Pav. Labai didelės galios lazerinių sistemų, kurios išskirtinai remiasi OPCPA metodu, raida.

Kompaktiškos OPCPA sistemos yra pasiekusios aukštą mokslinės ir technologinės brandos lygį, kai kurios iš jų jau gaminamos komerciškai ir sėkmingai naudojamos pačiuose įvairiausiuose priešakiniuose tyrimuose, pradedant optinių dažnių sinteze ir baigiant atosekundinių impulsų generacija Rentgeno diapazone bei stiprių laukų fizika.

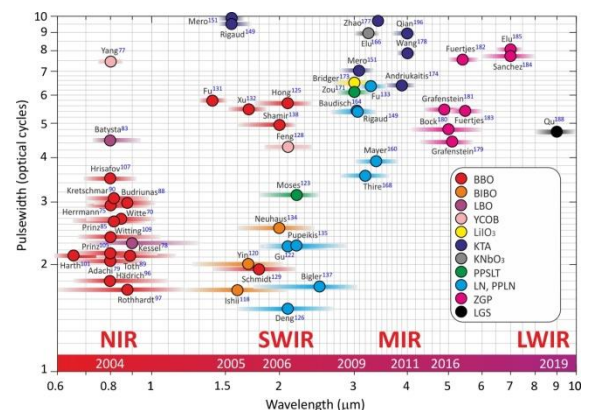


Fig. 2. Kompaktiškų OPCPA sistemų raida.

Keywords: optical parametric chirped pulse amplification (OPCPA).

Literatūra:

- [1] D. Strickland and G. Mourou, *Opt. Commun.* **56**, 219 (1985).
- [2] G. Mourou, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 030501 (2019).
- [3] A. Dubietis, G. Jonušauskas, and A. Piskarskas, *Opt. Commun.* **88**, 437 (1992)
- [4] A. Dubietis and A. Matijošius, *Opto-Electron. Adv.* **6**, 220046 (2023).

Funkcinių medžiagų kietojo kūno BMR spektroskopija

Solid state NMR of functional materials

Vytautas Klimavičius¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas,
Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva
vytautas.klimavicius@ff.vu.lt

Kietojo kūno Branduolių Magnetinis Rezonansas (BMR) yra informatyvus eksperimentinis metodas, paremtas sukinių šuolių tarp energijos lygmenų, atsirandančių esant stipriam magnetiniam laukui, detektavimu. Kartu su magiškojo kampo sukimu (MAS) ir įvairiomis impulsų sekomis kietojo kūno BMR suteikia informacijos apie įvairius tiriamų sistemų aspektus molekulinio lygmeniu, tokius kaip: cheminę aplinką, chemines jungtis, tarpatominius atstumus, kvadrupolinius parametrus ir kt. Dėl viso to kietojo kūno BMR yra galingas eksperimentinis metodas tiriant funkcines medžiagas, specialiai sukurtas kaulų inžinerijai, šviesos, sensorių technologijoms, energiją kaupiantiems prietaisams, išmaniosioms bei funkcinėms polimerinėms medžiagoms ir kt.

Pranešimo metu bus pristatyti naujausi tyrimai atliekami VU Cheminės fizikos instituto BMR laboratorijoje. Kad tenkintų platesnės auditorijos interesus, pranešimo pradžioje bus pristatytas trumpas kietojo kūno BMR įvadas, pagrindinės BMR stebimos sąveikos ir eksperimentiniai metodai, plačiai taikomi funkcinių medžiagų tyrimuose. Vėliau bus pristatyti kietojo kūno BMR taikymai tiriant įvairias organines, neorganines ir hibridines funkcines medžiagas.

Kietojo kūno BMR tyrimai yra plačiai taikomi neorganinių funkcinių medžiagų tyrimuose. Kaip pavyzdžiai bus pristatyti kalcio fosfatų, būtent Mg- ir Zn-vitlokity ($\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$) naujausi ^1H , ^{31}P 1D ir 2D BMR tyrimai [1, 2]. Minėtos medžiagos yra perspektyvios kaulų inžinerijoje kaip kaulų regeneracijai taikomi užpildai. Taip pat bus pristatyti naujos struktūros granatų, kur dalis itrio ir aliuminio kristalinėje struktūroje yra pakeista natriu ir vanadžiu ($\text{Y}_{3-x}\text{Na}_x\text{Al}_5\text{V}_y\text{O}_{12}$) BMR tyrimai. Granatų tyrimuose labai vertingos informacijos suteikė kvadrupolinių branduolių, tokių kaip: ^{27}Al , ^{51}V , ^{23}Na 1D MAS BMR bei ^{27}Al 2D MQMAS (diaugiakvantinis metodas) tyrimai. Šio tipo medžiagos gali būti pritaikytos šviesos ir sensorių technologijose.

Hibridiniai funkciniai dariniai tokie kaip: N-legiruota mezoporėta anglis [3] ar NASICON (*Na Super Ionic CONductor*) tipo hibridinės medžiagos yra pritaikomi naujos kartos prietaisuose, tokiuose kaip: superkondensatoriai ar vandens pagrindo Na-jonų baterijos, elektros energijai kaupti, kurie yra būtini norint pereiti prie atsinaujinačios energetikos. N-legiruotos anglies tyrimams buvo pasitelkta žemųjų temperatūrų ^{15}N MAS tyrimai, kurie leido susieti superkondensatoriaus talpos padidėjimą su molekuline elektrodo struktūra [3]. NASICON tipo hibridinių

medžiagų, vystomų kaip vandeninių natrio baterijų elektrodai, tyrimams daugiausiai taikoma ^{23}Na ir ^{31}P MAS BMR *ex-situ* metodas, kuris leidžia įvertinti elektrodų degradaciją molekulinio lygmeniu. Taip pat siekiama pritaikyti ir *in-situ* plačiąjuostį BMR metoda stebėti elektrocheminio prietaiso degradacijos dinamiką realiuoju laiku.

Kaip organinių funkcinių medžiagų pavyzdžiai bus aptariami supramolekulinių agregatų, kurie pagrįsti biklo[3.3.1]nonano karkaso geometrija ir vandeniliniiais ryšiais [4]. Bus aptartos ^1H , ^{13}C , ^{15}N MAS 1D ir 2D, taip pat DNP sustiprintų metodų taikymai šiuose tyrimuose. Supramolekuliniai agregatai gali būti pritaikyti molekulinėje elektronikoje, nano-katalizėje ar kaip molekuliniai varikliai. Kitas funkcinių polimerų BMR tyrimų pavyzdys bus yra ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P pMPC (poly(2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine) BMR tyrimai [5]. Šio tipo polimeras yra vienas labiausiai biosuderinamų sintetinių polimerų ir gali būti pritaikytas medicininių prietaisų gamyboje.

Dėkojame Vilniaus universiteto Mokslo rėmimo fondui (MSF-JM-5/2022) ir Lietuvos mokslo tarybai (S-MIP-23-47) už dalies tyrimų finansavimą.

Reikšminiai žodžiai: kietojo kūno BMR, funkcinės medžiagos, kaulų inžinerija, polimerai, granatai, energijos medžiagos.

Literatūra

- [1] A. Kizalaite, V. Klimavičius, V. Balevicius, G. Niaura, A.N. Salak, J.C. Yang, S.H. Cho, T. Goto, T. Sekino, A. Zarkov, *CrystEngComm*, 25 (30), 4370-4379 (2023)
- [2] A. Kizalaite, V. Klimavičius, J. Versockiene, E. Lastauskiene, T. Murauskas, R. Skaudzius, T. Yokoi, M. Kawashita, T. Goto, T. Sekino, A. Zarkov, *CrystEngComm*, 24(28), 5068-5079 (2022)
- [3] E. Zhang, Y.C. Wu, H. Shao, V. Klimavičius, H. Zhang, P.L. Taberna, J. Grothe, G. Buntkowsky, F. Xu, P. Simon, S. Kaskel, *JACS*, 144(31), 14217-14225 (2022)
- [4] A. Jozeliūnaitė, T. Javorskis, V. Vaitkevičius, V. Klimavičius, E. Orentas, *JACS*, 144(18), 8231-8241 (2022)
- [5] V. Klimavičius, V. Klimkevičius, K. Aidis, S. Balčiūnas, J. Banys, R. Makuska, V. Balevicius, *React.Funct.Pol.*, DOI: 10.1016/j.reactfunctpolym.2023.105727 (2023)

Link elektronų sukinių mikrobangų kvantinės atminties

Towards spin-based microwave quantum memory

Mantas Šimėnas^{1,2}, James O'Sullivan², Oscar W. Kennedy², Joseph Alexander², Christoph W. Zollitsch², Vidmantas Kalendra¹, Jūras Banys¹, John J.L. Morton²

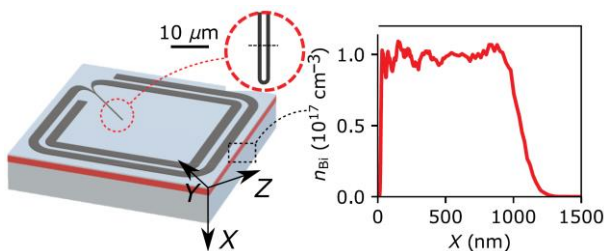
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius, Lietuva

²London Centre for Nanotechnology, University College London, JK
mantas.simenas@ff.vu.lt

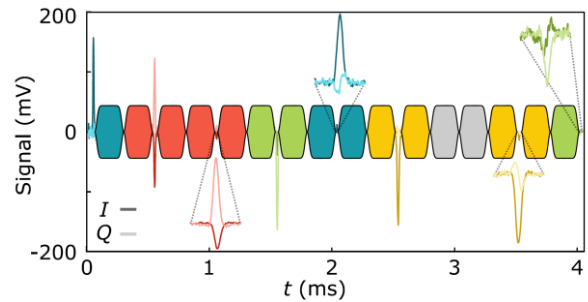
Viena iš perspektyviausių kvantinių technologijų platformų yra elektronų sukinių kietojo kūno medžiagose, kurie gali pasižymėti itin ilgu kvantinio koherentiškumo laiku lyginant su kitomis kvantinių bitų (kubitų) realizacijomis (pvz. superlaidžiais kubitais) [1]. Ilgas kvantinės būsenos koherentiškumo laikas yra būtinas norint atlikti daug kubitų manipuliavimo (skaičiavimo) operacijų bei efektyvią skaičiavimo klaidų korekciją. Elektronų sukinių taip pat yra viena iš esminių hibridinio ateities kvantinio kompiuterio architektūros dalių, kur skaičiavimo operacijos būtų atliekamos superlaidžių kubitų, o kvantinės būsenos būtų saugomos elektronų sukinių kubitų mikrobangų kvantinėje atmintyje [2].

Šiame darbe apžvelgsime mūsų naujausius įvairių sukinių kubitų elektronų sukinių rezonanso (ESR) tyrimus bei jų taikymą kvantinių mikrobangų atminčių vystyme. Viena iš naujausių tokių elektronų kubitų sistemų yra VI-grupės elementai implantuoti itin arti (~20 nm) silicio paviršiaus [3]. Mūsų tyrimai parodė, kad paviršius jonizuoja implantuotus ¹²⁵Te izotopus bei taip sukuria ESR aktyvius paramagnetinius Te⁺ centrus. Nepaisant paviršiaus įtakos, šie kubitai geba išlaikyti itin ilgą (~1 ms) koherentiškumo laiką. Taip pat pristatysime kitų donorų kubitų implantuotų į Si paviršių bei lokalizuotų kubitų Y₂SiO₅ kristaluose ESR tyrimus, naudojant superlaidžius mikrobangų mikrorazonatorius [4,5] (1 pav.), bei jų taikymą operatyviosios kvantinės atminties eksperimentiniame realizavime [2] (2 pav.).

Tokių kubitų taikymas bei tyrimai reikalauja naujo tipo itin jautrių mikrobangų sąsajų bei matavimo instrumentų. Šiame darbe taip pat apžvelgsime mūsų sukurtus superlaidžius mikrorazonatorius, veikiančius mK temperatūroje, bei ESR spektrometrus su kriogeniniais itin žemo triukšmo mikrobangų stiprintuvais [6,7], kurie leido atlikti tokių medžiagų ESR tyrimus.



1 pav. Superlaidus mikrobangų rezonatorius ant Si padėklo su arti paviršiaus implantuotais Bi donorų kubitais. Implantavimo profilis pateiktas kairėje [4].



2 pav. Eksperimentinis operatyviosios kvantinės atminties realizavimas naudojant čirpuotus mikrobangų impulsus bei Si:Bi kubitus, surištus su superlaidžiu mikrobangų mikrorazonatoriumi [2].

Reikšminiai žodžiai: sukiny, kubitai, kvantinė atmintis, elektronų sukinių rezonansas.

Literatūra

- [1] A. M. Tyryshkin, et al. Nat. Matter. **11**, 143 (2012).
- [2] J. O'Sullivan, et al. Phys. Rev. X **12**, 041014 (2022).
- [3] M. Šimėnas, et al. Phys. Rev. Lett. **129**, 117701 (2022).
- [4] J. O'Sullivan, et al. Phys. Rev. Appl. **14**, 064050 (2020).
- [5] J. Alexander, et al. Phys. Rev. B **106**, 245416 (2022).
- [6] M. Šimėnas, et al. J. Magn. Reson. **322**, 106876 (2021).
- [7] V. Kalendra, et al. J. Magn. Reson. **346**, 107356 (2023).

DESY FLASH laikinės-skyros eksperimentams naudojamų lazerinių sistemų apžvalga ir ateities planai

Pump-probe lasers at DESY FLASH facility: current status and future upgrades

Skirmantas Ališauskas¹

¹Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Notkestr. 85, 22607 Hamburg, Germany
skirmantas.alisauskas@desy.de

Vokietijoje, Hamburge esantis laisvųjų elektronų lazeris FLASH (angl. *Free-electron LASer (FEL) in Hamburg*) yra aukšto pasikartojimo dažnio (iki 5000 impulsų per sekundę) FEL, generuojantis femtosekundinės trukmės derinamo bangos ilgio rentgeno/ultravioletinę spinduliuotę (4-90 nm), o vieno impulso energija gali siekti 500 μ J [1, 2]. Trumpi FEL impulsai yra ypač patrauklūs laikinės-skyros eksperimentams (angl. *pump-probe*), kuriuose šviesos impulsai naudojami tyrinėti sistemos dinaminės savybės, kur vienas lazerio impulsas naudojamas inicijuoti (angl. *pump*) tam tikrą reakciją, o antrasis impulsas naudojamas zonuoti (angl. *probe*) pirmojo impulso sukeltą dinamiką. Tai leidžia, pavyzdžiui, nuskaityti fotochemines reakcijas su kelių dešimčių femtosekundžių laikine skyra. Apie 80 % mokslinių tyrimų FLASH papildomai reikalauja ir spinduliuotės UV-NIR spektrinėje srityje. Pagrindinė DESY užduotis yra suteikti mokslininkams prieigą prie FLASH spinduliuotės, kur mokslininkai gali vykdyti eksperimentus, trunkančius iki vienos savaitės, 24 valandas per parą. Daugiau informacijos apie aplikacijų padavinimą galima rasti <https://door.desy.de>.

FLASH impulsus spinduliuoja voromis (angl. *burst*): impulsai iki 1 MHz tankiu yra spinduliuojami tik 0,8 ms su 10 Hz pasikartojimo dažniu. Šis specifinis FEL impulsų išdėstymas kelia iššūkius optiniams lazeriams, kurių spinduliuotė turi būti sinchronizuota su FEL spinduliuotę laikinės-skyros eksperimentuose. Ypač populiarios titano-safyro lazerinės sistemos lengvai generuoja milidžaulinius kelių dešimčių femtosekundžių trukmės impulsus, bet jos yra ribotos vidutinės galios ir jų impulsų pasikartojimo dažnis neviršija 10 kHz, todėl negali būti taikomos FLASH, bet yra plačiai naudojamos mažo pasikartojimo FEL centruose. Tuo tarpu, iterbio (Yb) lazerinės sistemos gali siekti kilovatinės (kW) galias, bet jų impulsų trukmė yra ribojama stiprinimo juosta, ir dažniausia viršija kelis šimtus femtosekundžių. Norint generuoti kelių dešimčių femtosekundžių trukmės impulsus reikalingus laikinės-skyros eksperimentams, mes Yb lazerines sistemas naudojame kaip kaupinimo šaltinius čirpuotų impulsų optiniam parametriniam stiprintuvui (angl. *OPCPA*) kaupinti. OPCPA technologija mums leidžia generuoti derinamo bangos ilgio (centrinis bangos ilgis 700-900 nm) ir spektrinio pločio impulsus, kurių trukmė yra derinama nuo 15 fs iki 100 fs. Deja, OPCPA turi didelį trūkumą – mažą kvantinį efektyvumą (~10%), todėl tai savo ruožtu reikalauja naudoti didelės galios kaupinimo lazerius (mūsų atveju 0,5-5 kW).

Kaip alternatyva neefektyviam OPCPA, galima naudoti tiesiogines impulsų spūdos (angl. *post-compression*) schemas. Tokie metodai remiasi spektro plėtra dėka fazės moduliacijos (angl. *SPM*) netiesinėje terpėje, ir spektriškai išplėsto impulso fazės korekcija. Neseniai atsirado naujas impulsų spūdos metodas, naudojant impulsų spektrinę plėtra daugelio lėkio celėse (angl. *multi-pass cell* arba *MPC*) [3]. Šis metodas pasižymi didele impulsų laikine spūda (iki 40 kartų) ir efektyvumu (>90 %, įskaitant kompresorių) bei yra kompaktiškas. Pirmieji MPC prototipai jau yra įdiegti FLASH lazerinėse laboratorijose ir jų spinduliuotė jau naudojama laikinės-skyros eksperimentams [4, 5].

Dėl visos lazerinės sistemos dydžio ir sudėtingumo mes įdiegėme lazerines sistemas laboratorijose, iš kurių čirpuoti impulsai yra transportuojami keliasdešimt metrų iki optinių stalų netoli laikinės skyros eksperimento vietų (FLASH vienu metu gali teikti FEL spinduliuotę dviem eksperimentams į skirtingas tyrimo stotis [2]), kur impulsai yra suspaudžiami ir galiausiai pluoštai yra fokusuojami į vykdomų mokslinių tyrimų bandinius.

Literatūra

- [1] W. Ackermann *et al.*, *Nat. Photonics* **1**, 336 (2007).
- [2] B. Faatz *et al.*, *New J. Phys.* **18**, 062002 (2016).
- [3] J. Schulte *et al.*, *Opt. Lett.* **41**, 4511 (2016).
- [4] A-L. Viotti *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **28**, 36 (2021).
- [5] M. Seidel *et al.*, *Laser Photonics Rev.* **16**, 2100268 (2022)

Tridimensinių optinių metastruktūrų realizavimas naudojant femtosekundinę lazerinę litografiją

Realization of three-dimensional optical metastructures using femtosecond laser lithography

Vygantas Mizeikis

Resarch Institute of Electronics Shizuoka University, 3-5-1 Johoku Naka-ku Hamamatsu 432-8011 Japan
mizeikis.vygantas@shizuoka.ac.jp

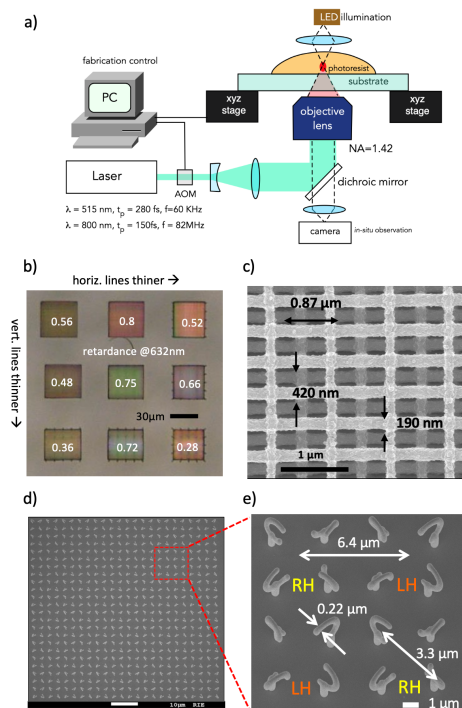
Medžiagų optines savybes galima keisti ir netgi sukurti naujas neįprastas savybes kurių neturi gamtoje randamos medžiagos naudojant optines metastruktūras, susidedančias iš periodiškai ar atsitiktinai erdvėje išdėstytų struktūrinių elementų mažesnių nei naudojamas elektromagnetinės bangos ilgis. Tokiose struktūrose sklindančių šviesos bangų amplitudę ir fazę nulemia daugkartiniai atspindžiai ir rezonansinės sąveikos tarp struktūrinių elementų, o ne jas sudarančių medžiagų pamatinės optinės savybės. Metastruktūros įgalina kontroliuoti šviesos bangų spinduliavimą, sklidimą, sugertį, poliarizaciją ir kitus procesus ar savybes naudojant labai mažo dydžio dirbtinius darinius, kurie ateityje gali būti pritaikyti kuriant optines integruotas grandines[1].

Egzistuoja daug optinių metastruktūrų tipų, pradedant paprasčiausiomis 1D ar 2D difrakcinėmis gardelėmis, baigiant sudėtingais 3D dariniais. Pastaraisiais dešimtmečiais buvo pasiūlyta daug teorinių metastruktūrų modelių ir jų naujų galimų optinių funkcijų, bet tik nedidelė dalis yra įgyvendinta praktiškai. Pagrindinė kliūtis yra sunkumai gaminant tokias struktūras. Netgi jei jų elementai teoriškai turi 1D ar 2D geometriją, realizuoti jie privalo būti kaip 3D elementai, o jų dydis turi būti žymiai mažesnis už bangos ilgį (0.4-0.8 μm matomai šviesai, iki kelių μm infraraudonai spinduliuotei). Šiuo metu nėra universalaus metodo įgalinančio tokių 3D struktūrų gamybą užtikrinant aukštą fabrikacijos skiriamąją gebą, kas riboja galimybes praktiškai patikrinti jų funkcionalumą ir taikymus.

Šiame pranešime bus pristatyti femtosekundinės (fs) lazerinės litografijos (LL) metodo[2] taikymai funkcionalių optinių metastruktūrų gamybai. Šis metodas naudoja stipriai fokusuoto fs lazerio spindulio erdvinį 3D skenavimą pradinės medžiagos, dažniausiai fotorezisto, tūryje (1 pav. (a)), ir leidžia palyginus nesunkiai pagaminti įvairias nano- ir mikro-struktūras. Fotoniniai kristalai yra periodinės dielektrinės struktūros kurių paruošimas naudojant įprastinę planarinę litografiją yra sudėtingas ir daug laiko reikalaujantis procesas, ypač 3D atveju. Pav. 1(b) vaizduoja keletą 3D fotoninių kristalų pagamintų LL metodu ir demonstruoja kai kurias jų neįprastas optines savybes: struktūrinę spalvą kuri kinta priklausomai nuo kristalo gardelės periodo ir užpildymo dielektriku laipsnio, ir dvejetainį lūžio rodiklį atsirandantį dėl specialiai sukurtos struktūrinės anizotropijos (skaičiai virš struktūrų rodo jų kuriamą fazių skirtumą išreikštą bangos ilgiais). Viena iš kristalų detalus vaizdas iliustruojantis gamybos kokybę, tipiškus fotoninių kristalų gardelės parametrus ir jos anizotropiją yra

parodytas 1 pav. (c). Kitas LL metodo taikymo pavyzdys pateiktas 1 pav. (d,e) yra metalo-dielektrinis metapaviršius susidedantis iš periodiškai išdėstytų vienos vijos 3D spiralinių elementų ir leidžiantis pasiekti beveik tobulą 100% sugertį infra-raudoname bangų diapazone[3]. Ateityje tikimasi pritaikyti panašius metapaviršius šilumos spinduliuotės kontroliavimui.

Pranešime bus pateikta daugiau detalių apie šias ir kitas metastruktūras, jų pagrindinius fizikinius principus, optines savybes, o taip pat privalumus ir trūkumus.



1 pav. (a) Lazerinės litografijos metodo praktinis įgyvendinimas, (b) 3D fotoninių kristalų matricos optinis atvaizdas, (c) vieno iš pavyzdžių parodyto (b) fragmento detalus vaizdas, (d,e) pagaminto spiralinio metapaviršiaus atvaizdai.

Reikšminiai žodžiai: lazerinė litografija, 3D mikrofabrikacija, fotoniniai kristalai, optiniai metapaviršiai.

Literatūra

- [1] *Metamaterials: Physics and Engineering Explorations*, N. Engheta and R.W. Ziolkowski, eds. (John Wiley & Sons, 2006).
- [2] M. Malinauskas, et al., *Light-Science & Appl.* **5**, e16133 (2016).
- [3] I. Faniayev, V. Mizeikis, *Opt. Mater. Express* **7**, 1453–1462 (2017).
- [2] P.M. Boersenberger, D.S. Weiss, *Organic Photoreceptors for Imaging Systems* (New York, Basel, Hong Kong, 1993).

Parametrinis aukštadažnės spinduliuotės stiprinimas ir harmonikų generacija GaAs/AlGaAs supergordelėse

Parametric gain of high frequency radiation and harmonic generation in GaAs/AlGaAs superlattices

Gintaras Valušis¹, Vladislavas Čižas¹, Liudvikas Subačius¹, Natalia V. Alexeeva¹, Dalius Seliuta¹, Timo Hyart², Klaus Köhler³, Kirill N. Alekseev^{1,4}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²Department of Applied Physics, Aalto University, 00076 Aalto, Espoo, Finland

³Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Tullastraße 72, Freiburg D-79108, Germany

⁴Department of Physics, Loughborough University, Loughborough LE11 3TU, United Kingdom

gintaras.valusis@ftmc.lt

Terahercinių (THz) dažnių diapazonas (0,1 – 10 THz, 1 THz yra 10^{12} Hz) yra labai patrauklus įvairiems spektroskopiniams ir vaizdinimo taikymams [1]. Viena iš pagrindinių problemų, kuri vis dar išlieka siekiant išplėsti tokių taikymų asortimentą, yra kompaktiškų ir efektyvių spinduliuotės emiterių, galinčių dirbti kambario temperatūros sąlygomis, trūkumas.

Šiame pranešime mes pristatome pirmą kartą eksperimentiškai stebėtą disipacinį parametrinį aukštadažnės spinduliuotės stiprinimą GaAs/AlGaAs supergordelėse kambario temperatūroje. Nors ankstesni teoriniai darbai [2,3] atskleidė, kad disipacinis aukštadažnės spinduliuotės stiprinimas gali būti stebimas plačiame dažnių ruože, eksperimentinio šio parametrinio reiškinio patvirtinimo iki šiol nebuvo.

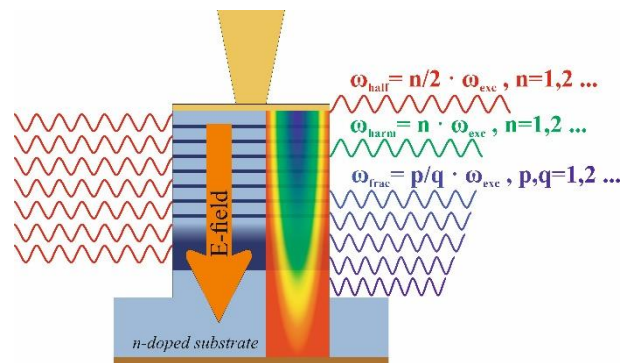
Tyrimo objektas buvo siliciu legiruota GaAs/AlGaAs supergordelė susidedanti iš 30 periodų, kurių kiekvienas buvo 5 nm GaAs: Si legiruotas kvantinis šulinys ir 1 nm $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ barjeras, tuo būdu formuojantis plačią 104 meV minijuostą. Struktūra buvo auginama naudojant n+ legiruotą GaAs padėklą (storis -- 500 μm ; legiravimas – $10^{18} cm^{-3}$), naudojant molekulinį pluoštelių epitaksiją (MBE). Supergordelės legiravimo lygis $N=10^{16} cm^{-3}$ buvo parinktas $L = 180$ nm struktūros ilgiui, kad būtų patenkintas Kroemerio elektrinio stabilumo kriterijus, atsižvelgiant į kritinį $E_{cr} \approx 5,5$ kV/cm dydžio elektrinį lauką nurodyto pločio minijuostai.

Mūsų eksperimente tirtos kvantinės struktūros darbo taškas buvo Esaki-Tsu neigiamo diferencinio dreifo greičio ruože. Kai toks bandinys buvo patalpintas į mikrobangų elektrinį lauką bangolaidyje, buvo nustatyta, jog jis stiprina į jį krintančią 8.2 – 12.4 GHz dažnio spinduliuotę [4]. Stebimi išsigitusio ir neišsigitusio parametrinio stiprinimo režimai, pasireiškiantys įvairių harmonikų generacija. Parametrinis stiprinimo mechanizmas remiasi elektromagnetinių bangų konversija į neslopinamas išilgines dreifo-relaksacines modas supergordelėje. Šios lėtos plazminės bangos, plintančios tūkstantį kartų lėčiau už šviesą medžiagoje, įgalina gauti didelį stiprinimą, siekiantį $10000 cm^{-1}$ [4].

Parodyta, jog supergordelė generuoja plačiąjuostį harmonikų spektrą, kuris gali pasiekti THz dažnių sritį. Dėl didelio supergordelės netiesiškumo kiekviena emisijos linija dalyvauja keliuose daugiafotoniniuose procesuose vienu metu.

Mes teigiame, kad jei supergordelė yra Esaki-Tsu režime, nustoja galioti įprastiniai Manley-Rowe sąryšiai, todėl yra galimi tiek konversijos aukštyn (*up-conversion*), tiek konversijos žemyn (*down-conversion*) procesai [4]. Taigi, supergordelės elgiasi sudėtingiau nei įprastinės optinės parametrinės sistemos [5].

Parodyta, jog bendru atveju spinduliuotės stiprinimo supergordelėse mechanizmas gali būti sudarytas iš nuo fazės nepriklausančio Bloch'o stiprinimo ir fazei jautraus parametrinio stiprinimo komponentų [6].



1 pav. Elektromagnetinės spinduliuotės stiprinimo bei harmonikų generacijos puslaidininkinėje supergordelėje iliustracija. Metalinė antena (viršuje) koncentruoja krintančią elektromagnetinę spinduliuotę į supergordelę, kurioje yra sužadinama išilginė plazmoninė banga.

Reikšminiai žodžiai: parametrinis stiprinimas, puslaidininkinės supergordelės, harmonikų generacija.

Literatūra

- [1] G. Valušis, A. Lisauskas, H. Yuan, W. Knap, and H. G. Roskos, *Sensors* **21**, 4092 (2021).
- [2] T. Hyart, A.V. Shorokhov, and K. N. Alekseev, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 220404 (2007).
- [3] T. Hyart, N.V. Alexeeva, J. Mattas, and K.N. Alekseev, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 140405 (2009).
- [4] V. Čižas, L. Subačius, N. V. Alexeeva, D. Seliuta, T. Hyart, K. Köhler, K. N. Alekseev, and G. Valušis, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 236802 (2022).
- [5] S. Longhi, *Opt. Lett.* **41**, 1813 (2016).
- [6] V. Čižas, N. V. Alexeeva, K. N. Alekseev, and G. Valušis, *Nanomaterials* **13**, 1993 (2023).

Kompaktiški elektroniniai terahercų dažnių šaltiniai ir detektoriai

Compact electronic sources and detectors for the THz frequency range

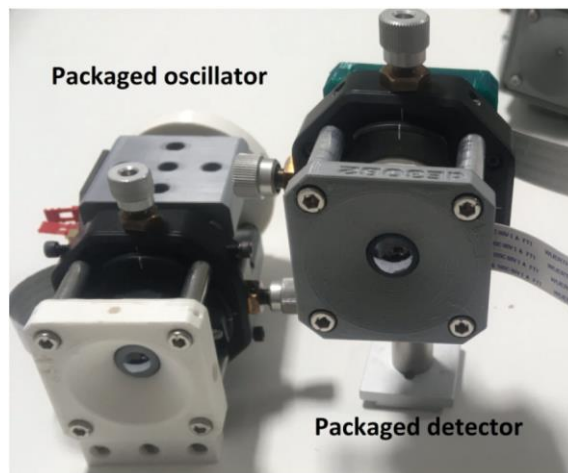
Kęstutis Ikamas^{1,2}, Alvydas Lisauskas¹

¹Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus Universitetas, LT-10257, Vilnius, Lietuva

²Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo 5A, 10322, Vilnius, Lietuva

alvydas.lisauskas@ff.vu.lt

Per kelis paskutiniuosius dešimtmečius stebimas vis didėjantis susidomėjimas terahercų (THz) dažnių juostos spinduliuotės generavimu bei detekcija[1]. Šių dažnių elektromagnetinė spinduliuotė nėra jonizuojanti tačiau gali prasiskverbti per daugumą dielektrinių medžiagų. Be to, daugelis junginių ir medžiagų šioje dažnių srityje pasižymi charakteringomis spektrinėmis absorbcijos linijomis, įgalinančiomis atlikti jų identifikaciją. Didelė motyvacija THz technologijų plėtojimui kyla iš visuomenės poreikio didinti belaidžio ryšio duomenų perdavimo spartą. Tačiau tam, kad THz technologijos būtų tinkamos plataus masto panaudojimui, būtina sukurti kompaktiškų, ekonomiškų bei efektyvių technologinių sprendimų veikiančių kambario temperatūros sąlygomis[2]. Visgi, dauguma iki šiol naudojamų THz sistemų yra sudarytos iš didelių gabaritų ir/arba sudėtingos priežiūros reikalaujančių elementų tokių kaip: elektroniniai daugintuvai, didelių gabaritų molekuliniai šuolių lazeriai, laiko srities spektroskopijos (TDS) sistemos, lazeriais paremtais foto maišikliais, lėtu optoakustiniu Golėjaus narveliu arba piroelektriniu prietaisu, ar net pasitelkia kriogeniškai aušinamus bolometrus. Ši u' silaikiusi būsena, kai THz technologijos daugiausia lieka panaudojamos tik mokslinėse laboratorijose, gali jau gana greitai pasikeisti. Tokį pasikeitimą įgalins naujų elektronika paremtų komponentų, veikiančių THz dažnių diapazone bei pasiremiančių pagrindinėmis puslaidininkinių įtaisų gamybos technologijomis, kaip pavyzdžiui komplimentari metalo oksido puslaidininkinių (KMOP) technologija, įdiegimas. Šio tipo technologijų privalumai, tokie kaip didelė išeiga ir elementų charakteristikų pasikartojamumas leidžia pasitelkti įvairius galios sumavimo metodus, pavyzdžiui, panaudoti integruotas daugiaelementes antenas šaltinių išėjimo galiai padidinti. Jau parodyta, kad KMOP technologijose įdiegti THz detektoriai yra konkurencingi pažangiausiems detekcijos metodams[3]. Tuo pačiu integralių šaltinių charakteristikos nuolat gerėja ir palengva artėja prie galios lygių, kuriuos galima pasiekti naudojant III/V medžiagų sistemos įrenginius[4].



1 pav. Nuotrauka su kompaktine 250 GHz šaltinio ir detektoriaus pora.

Šiame pranešime bus aptartos pagrindinės koncepcijos THz spinduliuotės detekcijai ir generavimui panaudojant KMOP technologijas. Bus aptarti skirtingi KMOP technologijose emiterio ir detektoriaus poros pateiktos 1 pav., veikimo būdai, įskaitant duomenų perdavimą, spektroskopiją ir vaizdų registravimo metodus.

Reikšminiai žodžiai: terahercai, osciliatoriai, detektoriai, KMOP.

Literatūra

- [1] D. M. Mittleman, Opt. Express, 26, 8, pp. 9417–9431, Apr 2018.
- [2] G. Valušis, et. al. Sensors, 21, 12, p. 4092, Jan 2021.
- [3] E. Javadi, et. al. Sensors, 21(9), p. 2909; 2021,
- [4] P. Hillger, et. al. IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol. 9, p. 1–19 2019.

Antrinis kvantavimas ir papildomos simetrijos atomo fizikoje: teorija ir praktinis pritaikymas

Secondary quantization and additional symmetries in atomic physics: theory and practical application

Gediminas Gaigalas

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius
gediminas.gaigalas@tfai.vu.lt

Atominiai duomenys plačiai naudojami įvairiose mokslo srityse: atomo spektroskopijoje, plazmos fizikoje, astrofizikoje ir t.t. Straipsnyje [1] parodyta, kad laboratorinė spektroskopija stipriai atsilieka nuo teleskopinių stebėjimų ir atominių parametrų poreikis ir apimtis sparčiai auga. Eksperimentinis atominių duomenų gavimas dažnai yra labai sudėtingas, reikalauja brangios aparatūros ir didelių eksperimentatorių pastangų. Išankstinis teorinis spektrų modeliavimas leidžia supaprastinti ir atpiginti eksperimentus.

Atominių duomenų poreikis ypač išaugo, kai pirmą kartą mokslo istorijoje (2015 m. rugsėjo 14 d.) buvo aptiktos gravitacinės bangos. 2017 m. rugpjūčio mėn. gravitacinės bangos buvo užfiksuotos iš dviejų susilieusių neutroninių žvaigždžių (NŽ). Tais pačiais metais JAV mokslininkai Raineris Weissas, Barry C. Barishas ir Kipas S. Thorne'as buvo įvertinti Nobelio fizikos premija už svarbų įdirbį atrandant gravitacijos bangas ir jas tiriant. Kartu su gravitacinėmis bangomis buvo užfiksuota ir šviesa, sklaidžiama medžiagos, susidariusios besijungiant dviem NŽ. Manoma, kad medžiagoje, susidariusioje jungiantis dviem NŽ, yra gausu sunkiųjų elementų, tokių kaip auksas, platina, ar lantanidų grupės elementų. Kadangi šie elementai pasižymi skirtingomis šviesos sugerties savybėmis, kiekvieno jų sugeriamos šviesos bangos ilgis ir sugėrimo laipsnis yra unikalūs, todėl medžiagos sudėtis gali būti nustatyta pagal ją sudarančių elementų atomines charakteristikas ir naujai susidariusios kilonovos šviesos ryškumo pasiskirstymą pagal bangos ilgį. Problema ta, kad šiuo metu pasaulyje trūksta šių elementų tikslų, išsamių atominių duomenų. Todėl tik labai tikslūs teoriniai tyrimai gali užpildyti šią spragą.

Atsižvelgiant į aukščiau paminėtus šiuolaikinės atomo teorijos poreikius, šiame darbe buvo plėtojama atomo teorija, kuriamos programos ir atliekami skaičiavimai. Plėtojant teoriją pagrindinis dėmesys buvo skirtas sukininės kampinės dalies integravimo metodikai, transformacijai iš jj ryšio į LS ryšį, optimalaus ryšio ieškojimui, bjortogonalinių orbitalių metodui, kuris leistų nagrinėti įvairias atomo ar jono charakteristikas dar didesniu tikslumu. Sukurtų metodų pagrindu buvo parašytos atitinkamos kompiuterinės programos, tame tarpe kompiuteriniai paketai skirti didelės apimties atomų bei jonų su atvirais sluoksniais skaičiavimams, remiantis daugiakonfigūraciniu (Dirako), Hartrio ir Foko ar konfigūracijų superpozicijos artiniais.

Darbe buvo atlikta nemažai *ab initio* teorinių skaičiavimų, kurių pagalba buvo aprobuota šiame darbų cikle sukurta metodika ir programinė įranga:

1. Teoriniuose spektroskopiniuose tyrimuose buvo atlikti didelės apimties skaičiavimai. Labai tikslūs rezultatai gauti visoms antrojo periodo elementų izoelektroninėms sekoms nuo Li iki Ne. Iš trečiojo periodo buvo nagrinėtos izoelektroninės sekos nuo Al iki S. Taip pat buvo nagrinėti atskiri atomai ir jonai, kurie yra ypač aktualūs astrofizikoje ir plazmos fizikoje. Buvo pateikti išsamūs, sistemingi ir labai dideli energijos spektro, šuolių, gyvavimo trukmių duomenų rinkiniai.

2. Serija darbų yra skirta hipersmulkiosios struktūros nagrinėjimui. Plėtojant programinę įrangą buvo teoriškai surastos Be, C, B, Mg, N tipo izoelektroninių sekų hipersmulkiosios A ir B struktūros ir Lande g_J konstantos. Taip pat šie tyrimai atlikti atskiriems atomams ir jonams reikalingiems astrofizikoje.

3. Izotopinis poslinkis buvo nagrinėtas Be, C, B, Mg, N tipo izoelektroninės sekos jonams bei Zn atomui. Tiriamieji darbai leido įvertinti sukurtų programų generuojamų duomenų tikslumą, skaičiavimo schemų subtilybes, bei kamieno elektronų koreliacijų svarbą.

4. Kristalinio lauko tyrimuose didžiausias dėmesys buvo skiriamas tris kartus jonizuoto Er analizei. Šis elementas buvo pasirinktas dėl jo svarbos termo-branduolinės sintezės reaktoriuose. Buvo atlikta energijos spektro, pagrindinės konfigūracijos draustinių šuolių analizė. Sukurtas naujas Štarko suskilimo elektriniame lauke skaičiavimui skirtas paketas ir atlikta Er IV analizė. Taip buvo plečiamos GRASP programinio paketo galimybės skaičiuoti sudėtingas elektronų konfigūracijas.

5. Kilonovos, kaip dviejų besijungiančių NŽ astronominio įvykio, kuris taip pat yra ir gravitacinių bangų šaltinis, tyrimai skatino tirti lantanidų grupės vieną kartą jonizuotus jonus, neodimio jonus (Nd II, Nd III ir Nd IV) ir kilonovai svarbius silpnų surištų būsenų šuolius. Kadangi tokius šuolius sudėtinga stebėti eksperimente, buvo pradėta plėtoti šuolių tikslumo analizės metodika, paremta skirtingomis kalibruotėmis.

6. Išsamūs simetrijų pažeidimų tyrimai, nustatant elektrinį dipolinį momentą, buvo atlikti sunkiesiems elementams Ra, Hg, Yb, Cn.

Reikšminiai žodžiai: daugiaelektroninė atomo teorija, sukininis-kampinis integravimas, antrinis kvantavimas, Racah algebra, kvazisukinys.

Literatūra

[1] Nature Editorial, Nailing the fingerprints in the stars, Nature **503**, 437 (2013).

Kur lazerių vieta sumaniame ir žalėjančiame pasaulyje?

Where is the place of lasers in a smart and greening world?

Gediminas Račiukaitis
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
gediminas.raciukaitis@ftmc.lt

XXI amžius yra paskelbtas fotonikos amžiumi. Kartu visi siekiame būti „žali“ ir klimatui neutralūs. Kaip atrodo Lietuvos lazerių mokslas ir verslas šiame kontekste? Nauji taikymai ir naujos rinkos atveria plačias galimybes, persimaišančias su visų tipų nestabilumais pasaulyje ir rinkose.

Lietuvos lazerių demo centras Taivane, besiplečiantys ryšiai su P. Korėjos pramonės gigantais rodo, kad pasirinkimas koncentruotis į industrinius lazerių taikymus buvo teisingas. Kaip mums tai išnaudoti? Puslaidininkų bumas ir „lustų aktai“, Europos komisijos paskelbtos 10 kritinių ES technologijų kryptių – ieškome savo vietos. Lazeriai medicinai prašosi daugiau mūsų dėmesio. Mūsų super lazeriai gali gydyti vėžį, bet dar daug reikia padirbėti, kol tai taps realybe. Nauja ir gundo – kvantinės technologijos saugiam ryšiui, jutikliams ar skaičiavimams, optinis ryšys žemėje ir su kosmosu.

Man, kaip baigusiam puslaidininkų fiziką, artima puslaidininkų draugystė su fotonika. Fotoninės intergruotos schemos (PIC) tikriausia bus ateities kasdienių sumanių produktų pagrindu. Ką turėtume padaryti, kad ir čia Lietuva išnaudotų savo ilgametes tradicijas ir kompetencijas?

Bendradarbiavimo su CERN galimybės ir iššūkiai per vienos mokslininkų grupės prizmę

Opportunities and challenges in collaboration with CERN through a prism of one research group

Gintautas Tamulaitis

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
gintautas.tamulaitis@ff.vu.lt

2017 m. Lietuva tapo asocijuota CERN (*Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire*) nare. Susumuojami Lietuvos mokslininkų rezultatai, rašomos ataskaitos; laikas pasidžiaugti laimėjimais, pasimokyti iš klaidų, planuoti ateities veiksmus. Šiame pranešime pirmiausiai bus trumpai pristatyta CERN organizacija, jos vieta ir reikšmė didelių energijų fizikos srityje, trumpai apžvelgta su CERN bendradarbiaujančių Lietuvos mokslininkų bendruomenės organizacinė struktūra. Šią bendruomenę šiuo metu telkia CERN-LT konsorciumas, kurio steigėjai yra Vilniaus universitetas, Kauno technologijos universitetas ir Lietuvos sveikatos mokslų universitetas. Dešimt konsorciumo mokslinių grupių veiklos tematikos apima teorinius dalelių fizikos tyrimus, CERN gautų duomenų analizę ir priemonių tai analizei kūrimą, jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių kūrimą ir jų parametų gerinimą, naujų greitintuvuose naudojamų medžiagų paieškas ir charakterizavimą, jonizuojančiosios spinduliuotės panaudojimą medicininėje diagnostikoje ir gydyme. Konsorciumas atviras prisijungti naujoms Lietuvos mokslininkų grupėms, turinčioms tarptautinio lygio mokslinį įdirbį ir realius ryšius su CERN mokslininkais. Iš aštuonių pagrindinių CERN mokslinių infrastruktūros padalinių, vadinamų eksperimentais, glaudžiausius ryšius Lietuvos mokslininkai turi su CMS (*Compact Muon Solenoid*). Aktyviai dalyvaujama mokslinių kolaboracijų *Crystal Clear Collaboration* (CCC, RD18) ir *Radiation hard semiconductor devices for very high luminosity colliders* (RD50) veiklose. CERN didelį dėmesį skiria dalelių fizikos eksperimentams sukurtų technologijų perdavimui į kitas sritis, visų pirma, medicininį vaizdinimo priemonių kūrimui ir radiobiologijai, kuri plėtojama ir LSMU. Konsorciumas koordinuoja informacijos apie naujausius CERN mokslo pasiekimus ir priešakinio mokslo sprendžiamas problemas sklaidą Lietuvoje, darbą su moksleiviais ir mokytojais, kuriam CERN skiria daug dėmesio, renginių ir kitų priemonių, rūpinasi, kad elementariųjų dalelių fizika ir su ja susijusios mokslo bei technologijų sritys atsispindėtų Lietuvos aukštųjų mokyklų programose.

Pristatant vienos mokslininkų grupės įsijungimo į CERN istoriją bus pademonstruota bendradarbiavimo su CERN specifika ir perspektyvos: nuo aukšto mokslinio lygio tyrimų link specifinių CERN uždavinių sprendimų ir, galiausiai, darbų, reikalingų, kad veiktų CERN eksperimentai. Grupės mokslinė patirtis buvo įgyta puslaidininkų fizikos srityje, o sukaupta eksperimentinė bazė leido su didele laikine skyra atlikti tyrimus

luminescencinės spektroskopijos, indukuotos optinės sugerties, šviesa indukuotų dinaminių gardelių metodais.

CERN eksperimentai yra planuojami dešimtmečiais į priekį, o dabar planuojamuose didelio šviesingumo eksperimentuose itin dideli reikalavimai keliami jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių greitaveiksmiškumui. Sparčių detektorių reikia ir siekiant geresnės erdvinės skyros bei mažesnės apšvitos dozės medicininuose vaizdinimo prietaisuose, ypač pozitroniniuose tomografuose su lėkio trukmės nustatymu. Didelė mūsų eksperimentų laikinė skyra buvo labai reikalinga naujų sparčių scintiliacinių medžiagų paieškai ir perspektyvių scintiliatorių laikinio atsako spartinimui. Užsimezgė bendradarbiavimas su kolegomis iš CCC kolaboracijos, atsirado galimybė savo tyrimams gauti naujus, perspektyvius scintiliatorius, savo tyrimų grupėje pradėjome teorinius sužadavimo pernašos scintiliatoriuose tyrimus. Tai leido charakterizuoti spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos centrus, pasiūlyti metodų tirti krūvininkų prilipimą daugiakomponenčiuose scintiliatoriuose, iširti perspektyvių scintiliatorių atsako spartą ribojančius veiksnius. Tuo metu vyko scintiliacinės medžiagos parinkimas spartiems detektoriams, kurie bus panaudoti CMS eksperimente įdiegiant naują sparčių detektorių sluoksnį *Barrel Timing Layer* (BTL). Dalyvavome tame procese, o priėmus sprendimą pasirinkti ceriu legiruotą liutecio itrio oksidortosilikatą (LYSO:Ce) suaktyvinom būtent šio scintiliatoriaus tyrimus. Pavyko rasti LYSO:Ce scintiliacinio atsako spartą atspindintį parametą, greitai ir bekontakčiu būdu nustatomą panaudojant indukuotos sugerties kinetikos matavimą. Dabar šį metodą naudojame BTL detektoriams gaminamų scintiliacinių strypų pasirinktiniam testavimui. Maždaug per metus bus pagaminti visi daugiau nei 160000 scintiliacinių strypų ir šių mūsų rutininių matavimų neberekės, todėl ieškome naujų sparčių scintiliatorių, pastaruoju metu pradėdame nanostruktūrinių scintiliatorių tyrimus. Esame sukūrę spinduliuotės detektoriaus prototipą, veikiantį indukuotos optinės sugerties pagrindu. Šiame prietaise optinis detektuojantis modulis ir registruojanti elektronika erdviškai atskirti, kas leidžia jį naudoti intensyvios spinduliuotės charakterizavimui. Taigi, mūsų tyrimų grupė jau praėjo gan tolimą kelią nuo puslaidininkų fizikos iki praktinę vertę jonizuojančiosios spinduliuotės detekcijoje turinčių darbų.

Sužadintų molekulių kompleksų kvantinė dinamika: stochastiškumas ir negrįžtamumas

Excited state quantum dynamics in molecular complexes: stochasticity and irreversibility

Darius Abramavičius, Mantas Jakučionis

²Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, Vilnius

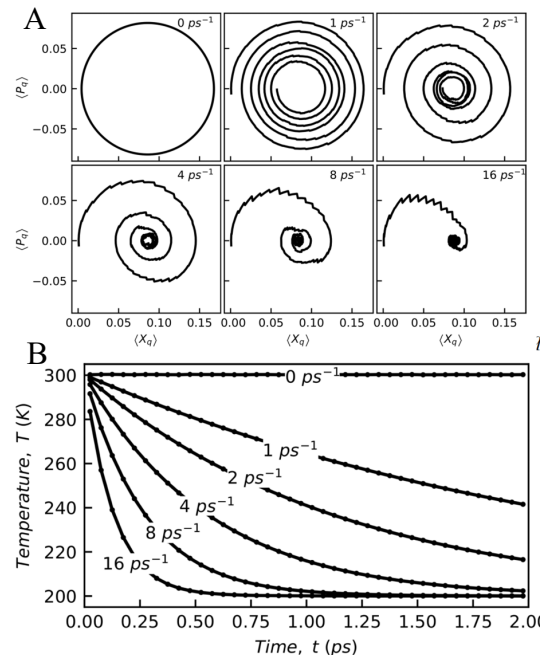
darius.abramavicius@ff.vu.lt

Kvantinių sistemų sužadintų būsenų evoliucijos tyrimai ir jos valdymas, keičiant sistemų parametrus, šiuo metu tampa ypač aktuali tematika dėl pastarojo dešimtmečio kvantinių technologijų vystymosi. Kvantinių sistemų inžinerijoje dažnai nėra lengvai prognozuojama „kvantiškumo“ gyvavimo trukmė, t. y. kvantinio išsifazavimo ir kvantinių būsenų nespindulinės relaksacijos gyvavimo trukmės. Molekulių kompleksai yra ribiniai tokių sistemų modeliai, kur elektroniniai sužadainimai - kvantinės tiriamos sistemos - ir virpesiai - tokių kvantinių tiriamų sistemų parametriniai trikdžiai – tarpusavyje stipriai sąveikauja. Nuo laiko priklausomo variacinio principo (time dependent variational principle - TDVP) metodas leidžia sistemingai aprašyti sužadintos būsenos raidą pasirinktu sudėtingumo lygiu.

Elektroninės kvantinės būsenos TDVP metode įskaitomis absoliučiai tiksliai. Metodas leidžia įtraukti molekulinis virpesius ir gardelės fononus skirtingais būdais, nuo ko priklauso aprašymo tikslumas. Gana paprasta vadinamoji Davydovo D2 variacinė teorija gali būti naudojama J agregatų sugerties ir fluorescencijos spektrinių linijų formoms apibūdinti dideliu tikslumu. Norint apibūdinti H agregatus, reikalingas daug tikslesnis ir tuo pačiu sudėtingesnis teorijos lygis, vadinamas multipletiniu D2 (mD2) metodu.

Visais šiais atvejais sprendžiamos lygtys garantuoja energijos ir judesio kiekio tvermės dėsnius. Kadangi modeliuojama baigtinio dydžio kvantinė sistema, tai reiškia, kad gaunamas judėjimas yra visiškai grįžtamasis. Negrįžtamumas ir tuo pačiu statistinės fizikos temperatūra yra įvedama modeliuojant statistinį ansamblių. Tačiau dėl sistemos baigtinumo visiškai grįžtamumo išvengti tampa neįmanoma. Be to, baigtinėje sistemoje iš principo energijos relaksacija tampa problemine.

Buvo parodyta, kad modeliuojant kvantinę dinamiką po elektroninio sužadainimo, neišvengiamai gaunamas stiprus aplinkos fononų kaitimas. Sukūrėme keletą teorinio modeliavimo metodų, kurie šį kaitimą paverčia valdomu procesu [1]. Taip gali būti įvedama kvantinių sistemų termalizacija, kaip pavaizduota pav. 1. Pavyko sukurti termalizacijos algoritmus suderinamus su TDVP D2 ir mD2 metodais.



1 pav. A. Kvantinio osciliatoriaus dinamika, keičiant elektron-fononinės sklaidos spartą. B. kvantinės aplinkos „aušimo“ priklausomybė nuo elektron-fononinės sklaidos spartos.

Reikšminiai žodžiai: kvantinė dinamika, termalizacija, eksitonų teorija.

Literatūra

- [1] Mantas Jakučionis and Darius Abramavičius, Thermalization of open quantum systems using the multiple-Davydov-D2 variational approach, Phys. Rev. A **107**, 062205, 2023.

Kontinuumo generacija fotoninių kristalų šviesolaidžiuose: derinamo dažnio femtosekundinio kaupinimo režimas

Continuum generation in photonic crystal fibers: pumping with continuously tunable frequency femtosecond pulses

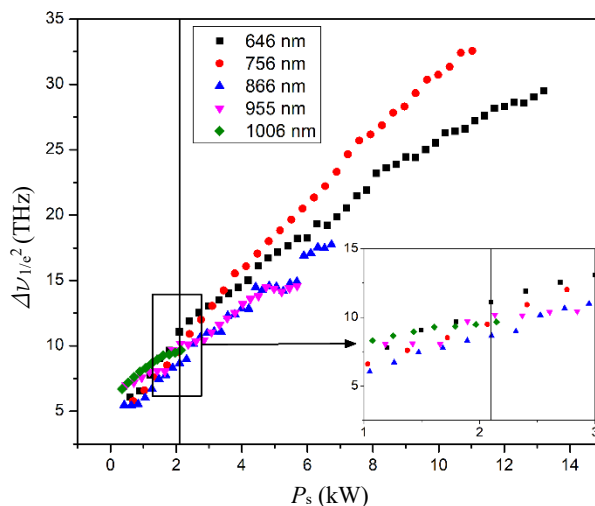
Jokūbas Pimpė, Vygandas Jarutis, Julius Vengelis

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

julius.vengelis@ff.vu.lt

Unikali šviesolaidžių rūšis - fotoninių kristalų šviesolaidžiai (FKŠ), turi periodinę struktūrą, leidžiančią sukurti išskirtinėmis optinėmis savybėmis pasižyminčius šviesolaidžius. Gebėjimas gamybos metu keisti mikrostruktūrų parametrus (diametrą, atstumą tarp jų, mikrostruktūrų srities dydį), leidžia realizuoti FKŠ kaip netiesinę terpę, pasižyminčią dideliu netiesiniu atsaku [1,2]. Kokybiškai įvertinti netiesinius reiškinius, vykstančius tokiuose FKŠ, galima žinant medžiagos netiesinį lūžio rodiklį bei jo priklausomybę nuo kaupinimo bangos ilgio, t. y. n_2 dispersiją [3]. Didelio netiesiškumo FKŠ efektyviai vyksta daug įvairių netiesinių reiškinių, sudėtingiausias iš kurių yra kontinuumo generacija – plataus spektro spinduliuotės generacija, vykstanti dėl kelių netiesinių reiškinių tarpusavio sąveikos. Iki šiol kontinuumo generacijos tyrimai dažniausiai apsiribodavo kaupinimo bangos ilgį parenkant FKŠ anomalios grupinių greičių dispersijos (GGD) srityje, arti nulinę GGD atitinkančio bangos ilgio. Tokiomis sąlygomis spektro plitimas vyksta efektyviai, bet generuotas kontinuumas pasižymi labai menku laikiniu koherentiškumu lyginant su pradine kaupinimo lazerio spinduliuote.

Šiame pranešime aptariami bendri kontinuumo generacijos FKŠ aspektai femtosekundiniame režime ir pristatomi kontinuumo, generuoto poliarizaciją išlaikančiame FKŠ, tyrimai naudojant ypatingas kaupinimo sąlygas - derinamo dažnio femtosekundinius impulsus (1 pav.), realizuotus sukūrus sinchroniškai kaupinamą parametrinį šviesos generatorių. Šis lazerinės spinduliuotės šaltinis savo ruožtu kaupinamas Yb:KGW femtosekundinio osciliatoriaus (FLINT, *Light Conversion Ltd*) spinduliuote. Laikinės kontinuumo spinduliuotės charakteristikos įvertinamos kryžminės koreliacijos dažninės skyros optinės sklendės (XFROG) metodu. Matavimo rezultatai lyginami su skaitinio modeliavimo duomenimis: pasitelkiant juos galima įvertinti FKŠ netiesinį atsaką.



1 pav. Kontinuumo spektro pločio priklausomybė nuo kaupinimo spinduliuotės smailinės galios esant skirtingiems kaupinimo bangos ilgiams. Vertikalus brūkšnytis žymi 2,1 kW smailinę galią, ties kuria yra lyginami sugeneruoto kontinuumo spektro pločiai.

Tyrimams paramą suteikė Lietuvos mokslų akademija per Lietuvos mokslų akademijos Jaunojo mokslininko stipendiją.

Reikšminiai žodžiai: fotoninių kristalų šviesolaidis, kontinuumo generacija sinchroniškai kaupinamas parametrinis šviesos generatorius, femtosekundiniai impulsai, XFROG.

Literatūra

- [1] P. Russell, Photonic crystal fibers, *Science* **299**(5605), 358–362 (2003).
- [2] S. Singla, P. Singal, Photonic crystal fiber: construction, properties, developments and applications, *Int. J. Electron. Eng.* **9**, 193–200 (2017).
- [3] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics ed. 3* (Academic press, New York 2008)

Apžvalgos radaras lengvame bepilotyje orlaivyje

Surveillance radar in a light-weight UAV

Saulius Rudys^{1,2}, Domantas Bručas^{1,3,4}, Andrius Laučys, Dainius Udris⁵, Raimondas Pomarnacki^{3,5}

¹ VILNIUS TECH, Antano gustaičio aviacijos insitutas, Linkmenų g. 28-4, 08217 Vilnius

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

³ Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

⁴ Kosmoso mokslo ir technologijų institutas, Kirtimų g. 33, 02244 Vilnius

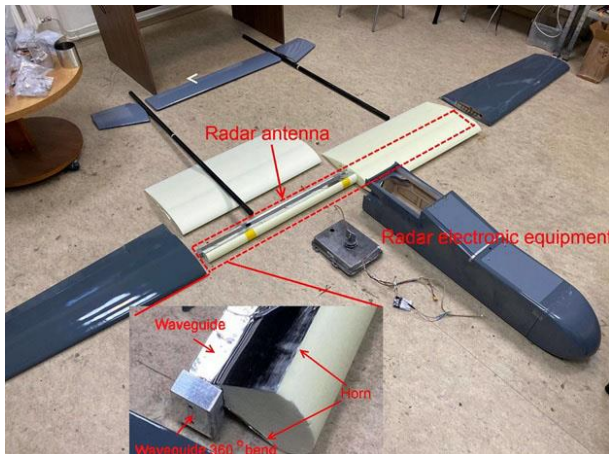
⁵ VILNIUS TECH, Elektronikos fakultetas, Saulėtekio al. 11, Vilnius 10223

rudys@elmika.com

Paskutiniu metu sparčiai tobulėja bepiločių orlaivių (BPO) technologijos ir vis daugėja šių orlaivių taikymo sričių. Plačiausiai BPO naudojami aplinkos stebėjimui įvairiems tikslams. Tam naudojamos optinės technologijos. Deja, šios technologijos labai ribotai taikomos tamsoje, trukdant rūkui, debesuotumui ar dūmams. Šiais atvejais, labai patrauklu būtų naudoti radarų technologijas, bet radarai, įprastai būna dideli sunkūs ir brangūs, todėl integruoti radarą į nedidelį ir lengvą (20-30kg) BPO yra rimtas technologinis iššūkis.

Ištirtos keleto tipų jūrinių radarų savybės [1] ir pasirinkti tie, kurie pritaikomi BPO.

Kita problema yra susijusi su radaro skiriamąja geba. Norint gauti radaro vaizdo 1.5^o skiriamąją gebą reikia naudoti 2m pločio anteną, veikiančią 4cm bangų diapazone. Tokia jūrinio radaro antena sveria apie 11kg ir netinkama naudoti lengvame BPO. Be to, norint gauti vaizdą, anteną reikia sukti, o tai yra sunkiai realizuojama BPO.



1 pav. Radaro antenos ir elektroninės įrangos integravimas į BPO

Siekiant išspręsti antenos problemą buvo pasirinkta integruoti 2m pločio radaro anteną į BPO sparną, kaip pavazduota 1 pav. Kuriant ypatingai lengvą anteną panaudoti jūrinio radaro antenos bangolaidžiai, sumažintas antenos aukštis, panaudota atspindinti lipni plėvelė, padedanti formuoti vėduoklės formos (siaurą horizontalioje ir platų vertikaloje plokštumoje) spindulį

vertikaloje plokštumoje. Skenavimo problema išspręsta keičiant BPO skridimo kryptį.

Skenuojant erdvę skrendant vingiais, dėl BPO svyravimo apie išilginę ašį ir, atitinkamai - vėduoklės formos spindulio skirtingo pokrypio, skirtingame aukštyje esantys taikiniai bus skirtingais azimutais. Sukurtas originalus būdas, naudojant 2D radarą, esant skirtingiems antenų (spindulių) pokrypiams nustatyti taikinių aukščiui [2].

Radaras, esantis BPO gerai tinka stebėti realiam laike dideles teritorijas virš jūros paviršiaus, stebėti ledo būsenai, o naudojamas kartu su AIS sistema gerai tinka laivų identifikavimui, kovojant su nelegalia migracija ar piratavimu.

Reikšminiai žodžiai: radaras, 3D radaras, bepilotis orlaivis.

Literatūra

- [1] Rudys S, Ragulis P, Laučys A, Bručas D, Pomarnacki R, Plonis D. Investigation of UAV Detection by Different Solid-State Marine Radars. *Electronics*. 2022; 11(16):2502. <https://doi.org/10.3390/electronics11162502>.
- [2] Rudys S, Laučys A, Ragulis P, Aleksiejūnas R, Stankevičius K, Kinka M, Razgūnas M, Bručas D, Udris D, Pomarnacki R. Hostile UAV Detection and Neutralization Using a UAV System. *Drones*. 2022; 6(9):250. <https://doi.org/10.3390/drones6090250>.



Lietuvos
Nacionalinė
Fizikos
Konferencija

**ŽODINIAI
PRANEŠIMAI**

Joninių skysčių struktūros ir BMR spektrinių savybių modeliavimas MD simuliacijomis bei jungtiniais QM/MM metodais

Structural and NMR properties of ionic liquid systems modelled by an integrated MD-QM/MM approach

Kęstutis Aidas¹, Dovilė Lengvinaitė¹, Žyginta Einorytė¹, Einaras Sipavičius¹, Vytautas Klimavičius¹, Francesca Mocci², Aatto Laaksonen³

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

²Kaljario universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, I-09042 Kaljaris, Italija

³Stokholmo universitetas, Arenijaus laboratorija, Medžiagų ir aplinkos chemijos skyrius, S-10691, Stokholmas, Švedija
kestutis.aidas@ff.vu.lt

Molecular dynamics (MD) simulations combined with the quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) models have proven to be a powerful computational technique for accurate predictions of electronic properties of extensive molecular systems. MD simulations are employed to sample the phase space of molecular system of interest under specific thermodynamic conditions, and then QM/MM calculations of electronic properties are performed where the central part of the molecular system is described by an electronic structure method and the rest of the system is modelled by a classical force field. Polarizable force fields can also be used for the classical subsystem to allow for mutual polarization interactions between quantum and classical regions.

In this presentation we will discuss our recent attempts to describe the structural and nuclear magnetic resonance (NMR) properties of ionic liquid (IL) systems using this integrated MD-QM/MM scheme based on classical MD simulations and density functional theory. ILs and their mixtures with traditional molecular solvents have already found numerous applications in both industry and laboratory. However, it is of importance to disclose the molecular mechanisms behind the physicochemical properties of IL systems in order to facilitate their practical applications.

To gain insight into ion pairing phenomenon, we have conducted classical MD simulations of the 1-decyl-3-methyl-imidazolium chloride contact ion pair as well as of free ions in water, acetonitrile, and dichloromethane [1]. The QM/MM model was used to predict NMR chemical shift for the so-called H2 proton in the imidazolium ring of the cation, which has displayed high sensitivity to the nature of the solvent. The chemical shift of the H2 proton was found to be primarily modulated by hydrogen bonding with the chloride anion, while the influence of the solvents though differing in polarity and capabilities for hydrogen bonding is less important. By comparing experimental and computational results, we were able to get quantitative information concerning chemical equilibrium between contact ion pairs and free ions established in each solvent.

We have also scrutinized the molecular mechanism behind the observed non-monotonic dependence of the ¹H NMR chemical shift of water on the composition of the aqueous mixtures of the 1-butyl-3-methyl-

imidazolium chloride IL [2]. We have found that complex chemical equilibrium between various water-ionic aggregates is established in these mixtures. This equilibrium is changing with the varying composition of the mixture, leading to this peculiar evolution of the chemical shift of water. Extensive classical MD simulations of these mixtures were carried out, and QM/MM approaches were applied to predict the NMR chemical shifts. The proliferation of strongly hydrogen-bonded complexes between chloride anions and water molecules is found to be the reason behind the increasing chemical shift of water when its molar fraction in the mixture is low and decreasing. The model shows that the chemical shift of water molecules that are trapped in the IL matrix without direct hydrogen bonding to the anions is considerably smaller than the chemical shift predicted for the neat water. The ¹H NMR spectrum of neat [C4mim][Cl] was predicted and found to be in very reasonable agreement with the experimental data. The experimentally observed strong dependence of the chemical shift of the H2 proton on the composition of the mixture was rationalized as well.

We will also briefly discuss our very recent extensive computational NMR studies of the molecular mechanism behind the increased solubility of drug molecules in aqueous solution of choline based ILs and of structural properties of the aqueous mixtures of 1-butyl-3-methylimidazolium nitrate.

Support from the Research Council of Lithuania (grant no. S-MIP-22-74) is acknowledged. Computational resources were provided by the Swedish National Infrastructure for Computing (SNIC) at HPC2N and at PDC, Sweden, and by the High Performance Computing Center “HPC Saulėtekis” at Vilnius University, Lithuania.

Keywords: ionic liquids, molecular dynamics simulations, quantum mechanics, nuclear magnetic resonance.

Literature

- [1] D. Lengvinaitė, V. Klimavičius, V. Balevičius, K. Aidas, J. Phys. Chem. B **124**, 10776 (2020).
- [2] D. Lengvinaitė, S. Kvedaravičiūtė, S. Bielskutė, V. Klimavičius, V. Balevičius, F. Mocci, A. Laaksonen, K. Aidas, J. Phys. Chem. B **125**, 13255 (2021).

Fukoksantinų ir chlorofilų baltyminių kompleksų fluorescencijos gesinimas

Fluorescence quenching in aggregates of fucoxanthin–chlorophyll protein complexes

Andrius Gelžinis^{1,2}, Jevgenij Chmeliiov^{1,2}, Marijonas Tutkus², Ernesta Vitulskienė², Marius Franckevičius², Claudia Büchel³, Bruno Robert⁴, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Vilnius, Lietuva

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius, Lietuva

³Gëtės Universitetas Frankfurte, Vokietija

⁴Paryžiaus-Saklė Universitetas, Prancūzija

andrius.gelzinis@ff.vu.lt

Didžiąją dalį deguonies Žemės planetoje išskiria mikroorganizmai, kaip bakterijos ar dumbliai. Pavyzdžiui, titnagdumbliai išskiria maždaug tiek pat deguonies, kiek visi atogrąžų miškai. Tai yra stebinantis faktas, turint omenyje, kad titnagdumbliai gyvena po vandeniu, kur prasiskverbta gerokai mažiau Saulės šviesos nei gauna augalai ant Žemės paviršiaus.

Sėkmingai gyvuoti tokiomis sąlygomis titnagdumbliams padeda efektyvi šviesorankos sistema. Pagrindinis jų šviesorankos kompleksas yra fukoksantinų ir chlorofilų baltyminis kompleksas (FCP kompleksas). Žinoma, kad FCP kompleksuose yra chlorofilo *a*, karotenoido fukoksantino ir chlorofilo *c* molekulių. Pastarosios dvi molekulės gerai sugeria žalią ir mėlyną šviesą, kas reikalinga po vandeniu gyvenantiems organizmams. Pirmieji FCP komplekso atominės struktūros duomenys pasirodė tik prieš keletą metų [1,2]. Įdomu, kad jų sugretinimas su spektroskopiniais duomenimis parodė, kad skirtingų titnagdumblių rūšių FCP kompleksai turėtų struktūriškai skirtis [3].

Per didelis apšviestumas yra pavojingas titnagdumbliams, todėl jie yra išsivystę labai efektyvius savisaugos nefotocheminio (chlorofilų fluorescencijos) gesinimo (angl. non-photochemical quenching, NPQ) mechanizmus. NPQ yra sudėtinga tirti spektroskopiškai nagrinėjant chloroplastus ar tilakoidų membranas, nes stebimi persiklojantys fotosistemų ir jų anteninių kompleksų signalai. Tačiau FCP agregatai yra tinkama modelinė sistema tirti NPQ.

Šiame darbe bus pristatyti FCPa ir FCPb kompleksų, išgautų iš titnagdumblio *Cyclotella meneghiniana*, bei jų agregatų sklaidančiosios kameros fluorescencijos matavimai esant plačiam temperatūrų intervalui. FCPb agregatų fluorescencijos duomenys esant 15 K temperatūrai pateikti 1 pav. iliustruoja gautų rezultatų sudėtingumą. Ankstesni tokio tipo matavimai, atlikti su pagrindiniais augalų šviesorankos kompleksais LHCII [4], leido padaryti išvadas apie NPQ procese dalyvauvajančių būsenu molekulinę prigimtį.

Mūsų rezultatai rodo, kad agreguotų FCPa ir FCPb kompleksų fluorescencijos signalą lemia dvi šviesinės būsenos. Viena iš atitinka įprastą chlorofilo Q_y būsenos fluorescenciją, o kita yra susijusi su krūvio pernašos būseną tarp chlorofilų *a* ir *c*. Tuo tarpu už fluorescencijos gesinimą yra atsakinga tamsinė būseną, kuri kyla dėl sužadavimo energijos pernašos iš chlorofilų į fukoksantinų molekulių S_1 būseną.

Reikšminiai žodžiai: fluorescencija, nefotocheminis gesinimas, fukoksantinų ir chlorofilų baltyminis kompleksas, titnagdumbliai.

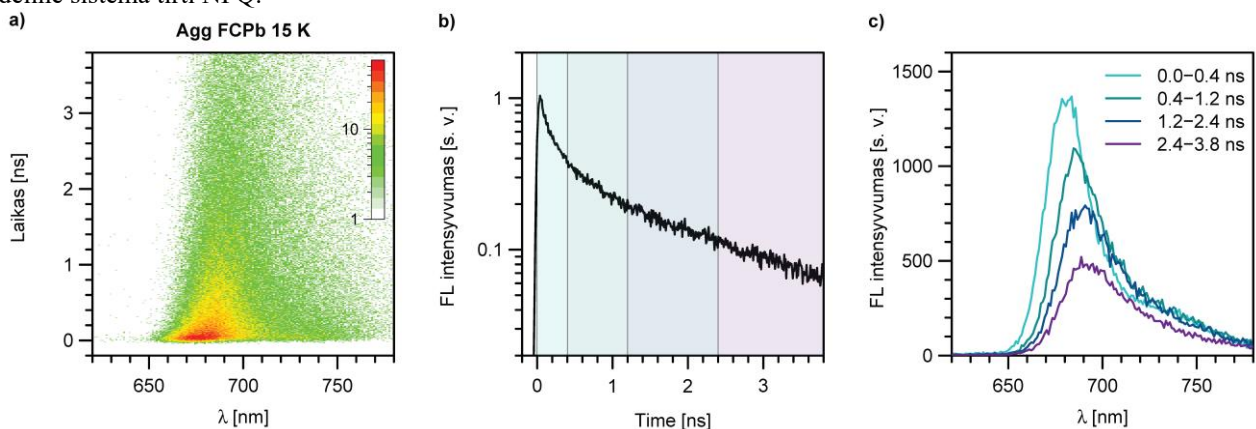
Literatūra

[1] W. Wang ir kt., Science **363**, eaav0365 (2019).

[2] X. Pi ir kt., Science **365**, eaax4406 (2019).

[3] A. Gelžinis ir kt., Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, 806–821 (2021).

[4] J. Chmeliiov ir kt., Nat. Plants **2**, 16045 (2016).



1 pav. Agreguotų FCPb kompleksų fluorescencijos duomenys esant 15 K temperatūrai. a) dvimatis fluorescencijos intensyvumo žemėlapis; b) suintegruota fluorescencijos gesimo kinetika; c) skirtingais laiko intervalais integruoti fluorescencijos spektrai.

Fotonų konversijos didinimas didelio ploto polimeriniuose sluoksniuose panaudojant multirezonansinius TADF spinduliuosius

Enhancing photon upconversion in large-area polymer films by utilizing multi-resonant TADF emitters

Steponas Raišys¹, Karolis Kazlauskas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
steponas.raisy@ff.vu.lt

Organinėse molekulinėse sistemose fotonų konversija iš mažesnės energijos į aukštesnę yra pasiekama naudojant mažos galios nekoherentinį žadinimą, o tai įgalina panaudoti saulės spinduliuotę kaip sužadavimo šaltinį. Tai labai perspektyvu siekiant pagerinti saulės elementų veikimą, nes elemento nesugerama infraraudonoji spinduliuotė gali būti konvertuojama taip, kad ji atitiktų saulės kelės sugertį ir tuomet galėtų dalyvauti fotosrovės kūrime. Fotonų konversijos procesas organinėse medžiagose vyksta anihiliuojant tripletiniams eksitonams, kuomet dviejų tripletų pagalba yra sukuriama vienas didesnės energijos singuletinis eksitonas. Kadangi tiesioginė tripletinės būsenos sugertis yra itin maža, norint užpildyti tripletinių eksitonų lygmenį, reikia naudoti tripletinių eksitonų sensibilizatorius, tokius kaip metalų organiniai junginiai, perovskitai, neorganiniai kvantiniai taškai ir kt. Tačiau be tripletų užpildymo sensibilizatoriai turi ir nepageidaujamą poveikį, nes efektyviai sugeria konvertuotą spinduliuotę, ypač tose sistemose, kuriose naudojami sensibilizatoriai, neturintys skaidrumo lango spindulio emisijos srityje. Ši problema ypač aktuali kietuose konversijos sluoksniuose, kur naudojamos didelės anihiliatorių koncentracijos, o anihiliatoriaus ir sensibilizatoriaus molekulės yra arti viena kitos. Paprasčiausias būdas išvengti energijos perdavimo atgal yra sumažinti sensibilizatoriaus koncentraciją [1], tačiau tai sumažintų sugertį ir padidintų konversijos slenkstį.

Žalingo energijos perdavimo atgal į sensibilizatorių mažinimui buvo pasiūlytas vadinamas singuletinių eksitonų gaudyklės metodas [2]. Pagrindinė šio metodo idėja – sugaudyti konvertuotus singuletinius eksitonus gerai fluorescuojančiomis molekulėmis iki jiems pasiekiant sensibilizatorių. Ankstesniuose darbuose buvo naudotos tipinės fluorescencinės singuletinių eksitonų gaudyklės, pavyzdžiui, pireno dariniai, fotonų konversijos našumui didinti, tačiau šios turi gana platų emisijos spektrą, viršijančių sensibilizatoriaus skaidrumo langą.

Šiame darbe yra pristatomi multirezonansinio (MR) temperatūra aktyvuojamo uždelstosios fluorescencijos (TADF) emiterio tyrimų rezultatai fotonų konversijos našumui gerinti. Tarp bendrų MR-TADF junginių privalumų, tokių kaip didelė spinduliuotės sparta ir aukštas kvantinis našumas, jie taip pat pasižymi aukšta tripletinės būsenos energija (reikalinga, kad būtų išvengta tripletinių eksitonų depopuliacijos anihiliatoriumi) bei išskirtinai siauru emisijos spektro plociu, kad būtų išvengta pakartotinės sugerties

sensibilizatoriumi. Šios išskirtinės MR-TADF junginių luminescencijos savybės jau spėjo prisidėti gerinant hiperfluorescencinių organinių šviestukų veikimą [3]. Tyrimo metu buvo pasiektas 50% fotonų konversijos našumo išaugimas klasikinės difenilantraceno anihiliatoriaus ir platinos oktaetilporfirino sensibilizatoriaus [4] fotonų konversijos sistemoje į ją įvedus MR-TADF singuletinių eksitonų gaudyklės, o pasiekta beveik 12% fotonų konversijos kvantinė išieiga yra viena didžiausių didelio ploto polimeriniuose sluoksniuose su aukšta stiklėjimo temperatūra.

Reikšminiai žodžiai: fotonų konversija, DPA, PtOEP, MR-TADF, tripletinių eksitonų anihiliacija, kvantinis našumas.

Literatūra

- [1] S. Raišys, S. Juršėnas, Y.C. Simon, C. Weder, and K. Kazlauskas, *Chem. Sci.* **9**(33), 6796 (2018).
- [2] S. Raišys, O. Adomėnienė, P. Adomėnas, S. Juršėnas, and K. Kazlauskas, *Dyes and Pigments* **194**, 109565 (2021).
- [3] Y. Kondo, K. Yoshiura, S. Kitera, H. Nishi, S. Oda, H. Gotoh, Y. Sasada, M. Yanai, and T. Hatakeyama, *Nat. Photonics* **13**(10), 678 (2019).
- [4] S. Raišys, S. Juršėnas, and K. Kazlauskas, *Sol. RRL* **6**(6), 2100873 (2022).

Molekulių dinamikos skaičiavimai nestandartiniams kompleksams

Molecular Dynamics Simulations for Non-standard Complexes

Mindaugas Macernis¹, Leonas Valkunas^{1,2}, Renata Karpicz², Darius Abramavicius¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

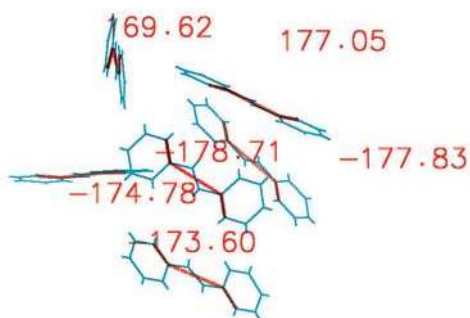
²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Organinės molekulės tirpaluose arba kristalinėse struktūrose gaunamų iš tirpalų gali suformuoti netipines struktūras, turinčias kitokias savybes nei galima tikėtis. Tipinė molekulių dinamika (MD) sunkiai gali prognozuoti tokių struktūrų elgseną, kuri yra reikalinga tolesniems kvantmechaniniams (pvz. tankio funkcionalo teorija - DFT) skaičiavimams. Tad būtina nagrinėti galimas molekulių dinamikos metodikas. Šiame darbe pasirinkti galimi kompleksai iš stilbeno [1-2] ir karotinoidų [3] molekulių, kurie nagrinėti patikslintomis molekulių dinamikos metodikomis, o gauti rezultatai toliau analizuoti DFT metodikomis.

Trans-stilbenų spinduliavimo sugerties ir fluorescencijos spektrų kinetikos tyrimai rodo priklausomybę nuo koncentracijos polistirene [2]. Dalį eksperimentinių duomenų gali paaiškinti dimerizacijos efektai [1]. Visgi, detalesniam supratimui reikalinga gauti struktūras, kurios atspindėtų detaliau reiškinius, bet tipinė MD negali prognozuoti dimeruose esančių efektų.

Kita grupė molekulių – karotinoidai, kurie yra sudaryti iš konjuguotų elementų ir vykdo įvairias funkcijas biologijoje. Vienas tokių karotinoidų – fukosantinas - pasižymintis krūvio pernašos būsenomis, bet tik fotodinamikos procesuose. Pastarasis efektas vyksta poliniuose tirpikliuose, bet yra už tipinės MD simuliacijų metodikos ribų.

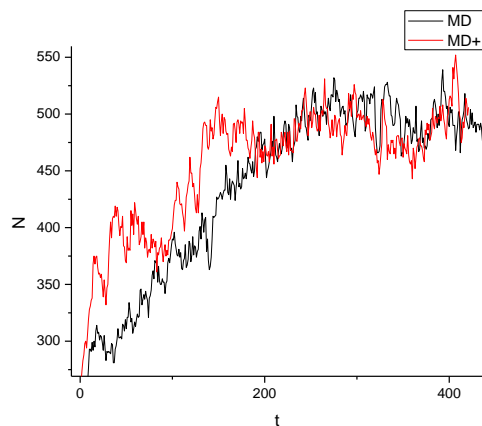


1 pav. Stilbeno kompleksas susidaręs po patikslintos MD

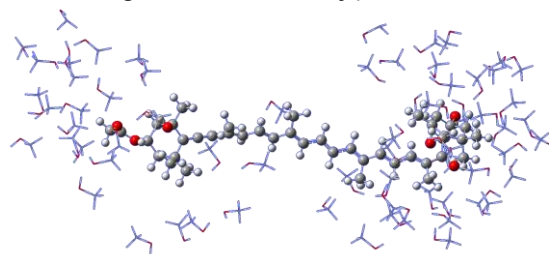
Naudojant DFT ir TD-DFT metodikas B3LYP/cc-pVDZ ir CAM-B3LYP/cc-pVDZ buvo paruošiami *trans*-stilbeno molekulės MD skaičiavimams. Rezultatai palyginti su tipine MD simuliacija. Patikslinta MD simuliacija [2] įskaito daugiau efektų iš kvantinės mechanikos aprašymo, dėl ko MD simuliacijų metu pradėjo formuotis įvairūs kitokie kompleksai (1 pav).

Metodika buvo toliau patikslinta fukosantino molekulei, kurios savybės kinta optiškai aktyvioje sužadintoje būsenoje. Nors MD simuliacija abiem atvejais rodo iki N=560 metanolio molekulių išsidėstymą

(2 pav.) apie pigmentą, bet dinamika yra kitokia bei kitoks metanolio molekulių išsidėstymas. Metanolio molekulės (3 pav.) buvo arčiau karotinoido struktūros bei išsidėstė teis karotinoido galais. Kitoks molekulių išsidėstymas gali būti priežastis ICT būsenų susiformavimui, kurį tikslinga toliau modeliuoti DFT metodais.



2 pav. Fukosantino su metanoliumi kompleksas dviem skirtingomis MD simuliacijų metodikomis



3 pav. Fukosantino su metanoliumi kompleksas susidaręs po patikslintos MD, kur aiškiai matosi susiformavę metanolio klasteriai karotinoido galuose

Reikšminiai žodžiai: molekulių dinamika, kvantinė chemija, superkompiuteris.

Padėka

Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-MIP-23-48). Skaičiavimai buvo atlikti naudojant superkompiuterį "VU HPC" Saulėtekis resursais esančiais Vilniaus universiteto Fizikos fakultete [4].

Literatūra

- [1] R. Karpicz, N. Ostapenko, Y. Ostapenko et al., Phys. Chem. Phys. **23**, 3447 (2021).
- [2] R. Karpicz, G. Kareivaite, M. Macernis et al. Phys. Chem. Phys. **25**, 21183 (2023).
- [3] M. Macernis, S. Streckaite, R. Litvin et al. J. Phys. Chem. A **126**, 813 (2022).
- [4] M. Macernis, V. Mickus, J. Ahonen et al. arXiv:2210.00934 (2022).

Abrikosovo magnetinių sūkurių prierašos jėgos valdymas išoriniu magnetiniu lauku ir sūkurių kanalo forma YBCO superlaidininko darinyje

Control of pinning force by external magnetic field and shape of Abrikosov vortices channel in YBCO superconductor

Artūras Jukna

Fotoelektros technologijų laboratorija, Fizikos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
arturas.jukna@vilniustech.lt

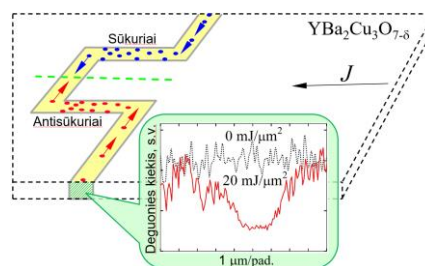
Dabartiniu metu atsiranda vis naujų mokslinių darbų, skelbiančių apie superlaidininkus, pasižyminčius labai aukštomis kritinėmis temperatūromis T_c (t.y. aukščiausia temperatūra, kuriai esant egzistuoja medžiagos superlaidi būseną) [1-2]. Nors rekordinės kritinės temperatūros vertės pasiekiamos tik ypatingai ekstremaliomis sąlygomis [2], tačiau tampanti vis realesne galimybė kambario temperatūroje valdyti superlaidininko kritinę būseną labai vilioja juos tirti ir skatina kurti vis modernesnius mažos ir didelės galios superlaidžius elektroninius prietaisus bei jų pritaikymų vizijas.

Temperatūrai esant žemesnei nei T_c , superlaidžioji medžiaga virsta absoliučiu diamagnetiku, t.y. ji išstumia iš savo tūrio išorinį magnetinį lauką dėka medžiagos paviršiuje atsiradusių elektros srovių, kurių visuma sukuria magnetinį lauką, nukeiptą priešinga kryptimi nei išorinis magnetinis laukas. Abiejų laukų priešpriešos rezultatas II-osios rūšies superlaidininkuose lemia atsiradimą juose mišriosios būsenos, realizuojamos Abrikosovo magnetiniais sūkuriais, t.y. elektros srovės sūkuriais, kurių skersmuo palyginamas su magnetinio lauko prasiskverbimo į superlaidininką gyliu λ , ir kuriuos elektros srovės kuriama Lorencio jėga verčia judėti superlaidininku, vos tik viršijus sūkurių prierašos jėgą, priklausomą nuo kristalinės struktūros defektų dydžio ir skaičiaus.

Šiame darbe atlikti $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ superlaidžiojo darinio, kurio matmenys $0,3 \times 50 \times 100 \mu\text{m}^3$ (storis \times plotis \times ilgis) ir kuriame suformuotas stačiakampės laužtės formos, $5 \mu\text{m}$ pločio kanalas, skirtas Abrikosovo magnetinių sūkurių judėjimui, „laiptuotų“ voltamperinių charakteristikų (VAch) tyrimai, $84,18 - 91,63 \text{ K} < T_c$ temperatūrų intervale. Įtampos laipteliai, stebimi darinių VAch, atsiranda dėl Abrikosovo magnetinių sūkurių judėjimo kanalu, kuriame lazerio šviesos Gauso pluoštu sukurtos deguonies vakansijos tampa išplėstiniais kristalinės struktūros defektais, lemiančiais silpnesnį nei kitose medžiagos vietose superlaidininko kritinį magnetinį lauką, dėl ko srovės kuriamas magnetinis laukas prasiskverbia tik į kanalo sritį [3].

Lorencio jėgai viršijus prierašos jėgą (pastarąją kuria deguonies vakansijos, sūkurių kanalo formos segmentai bei jų šlaituose prikibę magnetiniai sūkuriai), sūkuriai nuo vieno darinio krašto ir antisūkuriai – nuo kito krašto, ima judėti link darinio centro ir ten susitikę poromis anihiliuoja. Vos viena sūkurių-antisūkurių pora

anihiliuoja darinio centre, jo kraštuose gimsta nauja pora ir procesas vėl kartojasi.



1 pav. Abrikosovo magnetinių sūkurių ir antisūkurių judėjimo superlaidžiuoju $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ dariniu, su sūkurių kanalu, sukurtu Gauso formos lazerio šviesos pluoštu, schema

Mūsų tyrimai rodo, jog sūkurių judėjimą kanalu gali sutrikdyti deguonies vakansijos (išplėstiniai struktūriniai defektai), sūkurių kanalo segmentai, orientuoti išilgai srovės krypties, ir prie kanalo šlaituose „prilipę“ (stacionarūs) Abrikosovo magnetiniai sūkuriai, kuriantys magnetinį lauką, sąveikaujantį su kanalu judančių sūkurių magnetiniu lauku.

Srovės kuriamas magnetinis laukas superlaidžiajame darinyje, su laužtės formos sūkurių kanalu, sukuria nejudančių sūkurių/antisūkurių „rezervuarus“. Keičiant išoriniu magnetiniu lauku sūkurių/antisūkurių tankį, kinta sūkurių anihiliavimo linijos padėtis ir tuo pačiu sūkurių judėjimo sąlygos: atitrūkę nuo vieno kanalo galo sūkuriai keliauja trumpesnį atstumą, tad juda santykinai lėčiau nei antisūkuriai. Pastarųjų judėjimas didžia dalimi ir lemia srovės energijos disipaciją superlaidininke.

Superlaidieji dariniai, su laužtės formos superlaidžiaisiais sūkurių kanalais, gali būti panaudoti kuriant ypatingai jautrius temperatūros (superlaidžiojo virsmo temperatūrų intervale) ir magnetinio lauko stiprio jutiklius (magnetinio lauko srauto kvanto $\Phi_0 = 2.068 \times 10^{-15} \text{ Wb}$ tikslumu) bei ypač jautrius elektros srovės, kuriančios Φ_0 kvantus, matuoklius.

Reikšminiai žodžiai: superlaidininkas, Abrikosovo magnetinių sūkurių kanalas, sūkurių prierašos jėga.

Literatūra

- [1] E. Snider et al N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. DeBessai, H. Vindana, K. Vencatasamy, K/V. Lawler, A. Salamat, and R.P. Dias. Nature. **586**, 373 (2020).
- [2] Y.V. Kopelevich, J.H.S. Torres, R. Ricardo da Silva1, and V.M. Vinokur, arXiv:2208.00854v2, (2023).
- [3] A. Jukna. Materials science (Medžiagotyra), **29** (1) (2023).

GaN antros eilės netiesinių optinių bangolaidžių formavimas ir tyrimas

Formation and investigation of GaN second-order non-linear optical waveguides

Roland Tomašiūnas¹, Marek Kolenda¹, Darius Kezys³, Arūnas Kadys¹, Tomas Grinys¹, Virgilijus Vaičaitis², Ignas Reklaitis¹, Raimondas Petruškevičius³.

¹Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius

²Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Saulėtekio 10, LT-10223 Vilnius

³Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

rolandas.tomasius@ff.vu.lt

Koherentinių šviesos šaltinių tobulinime ir taikyme svarbų vaidmenį vaidina spektrinių savybių lankstumas. Vienas iš lankstumo požymių – greitas ir patogus šviesos bangos ilgio keitimas. Keisti bangos ilgus galima optiniais parametriniais generatoriais, tačiau daug efektyviau tai atlikti optinių dažnių generatoriais. Tiesa, pastaruoju atveju bangos ilgis keičiamas šuoliškai.

Integruotose optinėse grandinėse šviesos šaltiniai miniatiūrizuoti, jiems taikomos specifinės sąlygos. Bangolaidžių, kaip, šviesos šaltinių integracija šiose grandinėse žymiai pagerintų suderinamumą ir kompaktškumą.

GaN koherentiniai šviesos šaltiniai (lazeriai), ar GaN bangolaidžiai nėra naujiena. Tačiau naujų konfigūracijų GaN bangolaidžių struktūrų, galinčių efektyviai konvertuoti optinius dažnius, paieškos tęsiasi ir čia tikimasi daug naujumo, taip pat ir taikymo. Šiuo metu dominuoja dviejų tipų antros harmonikos bangolaidinės struktūros pasižyminčios kvazi-faziniu sinchronizmu (angl. quasi-phase matching (QPM), [1]) ir modaliniu sinchronizmu (angl. modal phase matching (MPM), [2]). Abiem atvejais struktūros suformuotos taip, kad būtų kompensuojamas dviejų sąveikaujančių bangų, žadinančios ir antros harmonikos, fazės išsiderinimas, atsirandantis dėl skirtingo lūžio rodiklio.

Teorinę įžvalgą, technologinius bei eksperimentinius tyrimus atlikome su QPM ir MPM GaN struktūromis. GaN turi pakankamai gerą antros eilės netiesinį optinį jautrį (~10pm/V), tačiau nepakankamą dvejojo lūžio savybę, kad užtikrinti efektyvią antros harmonikos generaciją. Poliškumu pasižymintis GaN leidžia suformuoti struktūrą su periodiškai besikeičiančiu poliškumu ir taip kompensuoti fazės išsiderinimą (QPM). Metalorganinės sluoksnių nusodinimo iš garų fazės (angl. MOCVD) technologija buvo užaugintas 1280 nm storio bangolaidinis GaN sluoksnis ir jame suformuotais periodiškai besikeičiantis Ga- ir N-poliškumo sritimis (4 mm periodas). Gauta antros harmonikos generacija žaliajoje spektro srityje 500-550 nm atitiko planuoto Nd:YAG lazerio bangos ilgį. Išplitęs spektras buvo paaiškintas teorinio modeliavimo rezultatais (2D modų analizė (TMM metodas) ir 2D pluošto sklaidimo metodas). Įskaičius šviesos modų sklaidimą bangolaidyje, gautos mažu kampu besikertančios dispersinės kreivės su tęstiniu kirtimosi tašku (TM_{2λ} ir TM_{0λ/2}, N=3 modų sutapimas), atitiko eksperimento rezultata.

MPM eksperimentams auginome kompleksinę N-poliškumo GaN/ALD-Al₂O₃/Ga-poliškumo GaN struktūrą. Ši struktūra pasižymi modų sąveikos kompensuotu kvazi-faziniu sinchronizmu (angl. compensted QPM (C-QPM)) dviejuose stipriai sąveikaujančiuose planariniuose GaN bangolaidžiuose (optimizuotas sanklotos integralas). Išilgai bangolaidžio besitęsianti GaN poliškumo inversija, turėtų demonstruoti daug didesnę SHG efektyvumą nei darinys be poliškumo inversijos.

Poliškumo inversiją pavyko suformuoti ir nauju “bonding“ metodu. Tai metodas, kai priešprieša mechaniškai/chemiškai sukabinami dviejų vienodo poliškumo GaN bandinių paviršiai. Šis metodas leidžia sumažinti technologinių operacijų kiekį ir taupyti resursus, nes nebereikia auginti vienas ant kito skirtingo poliškumo GaN sluoksnių.

Eksperimentai buvo atlikti bandinius žadinant iš krašto (angl. end-fire) konfigūracijoje. Žadinimui buvo naudojamas femtosekundinis (40 fs) lazeris.

Darbas finansuotas projekto SMART 01.2.2.-LMT-K-718 lėšomis.

Reikšminiai žodžiai: GaN bangolaidžiai, antros harmonikos generacija, kvazifazinis sinchronizmas, modalinis sinchronizmas.

Literatūra

- [1] A. Chowdhury, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **83**, 1077 (2003).
[2] M. Gromovy, *et al.*, Opt. Express **25**, 23035 (2017).

Skersaryšinamos fluoreno pagrindo skylių pernašos medžiagos perovskitiniams saulės elementams

Cross-linkable fluorene-based hole transporting materials for perovskite solar cells

Romualdas Jonas Čepas¹, Egidijus Kamarauskas¹, Kristijonas Genevičius¹, Vygintas Jankauskas¹, Aistė Jegorovė², Šaurūnė Daskevičiurė-Gegužienė², Vytautas Getautis²

¹Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

²Organinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Radvilėnų pl. 19, LT-50254, Kaunas
romualdas.cepas@ff.vu.lt

Organiniai ir hibridiniai saulės elementai vystėsi ir tobulėjo kelis pastaruosius dešimtmečius kaip pigesnė ir aplinkai draugiškesnė alternatyva silicio saulės elementams. Viena daugiausiai žadančių atmainų yra perovskitiniai saulės elementai. Norint pagaminti našų perovskitinį saulės elementą, reikalingas efektyvus krūvininkų atskyrimas ir pernaša iš sugeriančio sluoksnio, o tam svarbu turėti pernašos sluoksnius, kurių energetiniai lygmenys yra suderinami su perovskito sluoksniu. Šie pernašos sluoksniai privalo turėti didelius krūvininkų judrius, didelį laidumą, gerą cheminį, terminį bei morfologinį stabilumą.

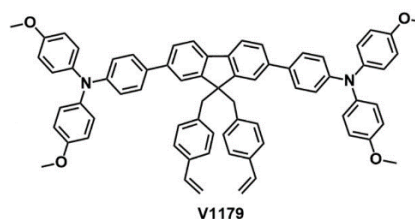
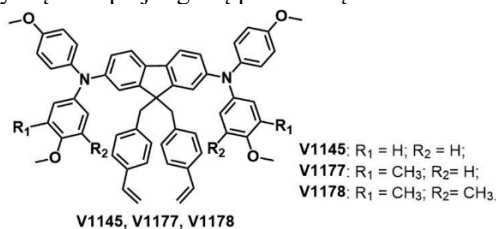
Perovskitiniai saulės elementai įprastai būna dviejų tipų. Įprastoje n-i-p konfigūracijoje, skyles pernešantis sluoksnis būna dengiamas ant sugeriančio perovskito sluoksnio, invertuotoje p-i-n konfigūracijoje – po perovskitu. Priklausomai nuo konfigūracijos, ant viršaus dengiami skylių ar elektronų pernašos sluoksniai gali apsaugoti perovskitą nuo drėgmės, jei jie bus hidrofobiški [1]. Sluoksniai po perovskitu turi būti atsparūs tirpikliams ir nesuirti.

Šiuo metu labiausiai paplitusi 2,2,7,7-tetrakis-(N,N-di-pmethoxyphenylamino)-9,9-spirobifluorene (spiro-OMeTAD) skylių pernašos medžiaga. Gryna ji gali būti naudojama tik n-i-p konfigūracijoje, taip pat ji turi prastą laidumą, kurį galima pagerinti naudojant priedus, tačiau taip legiruojant medžiagą sluoksnis tampa nestabilus [2].

Skersaryšinami skylių pernašos sluoksniai yra atsparūs daugumai perovskito gamyboje naudojamų tirpiklių ir aukštomis apdirbimo temperatūroms. Šios medžiagos taip pat pasižymi hidrofobiškumu bei mechaniniu atsparumu, ir gali būti naudojamos įvairios konfigūracijos struktūrose [3]. Taigi, skersaryšinamos medžiagos gali pagerinti perovskitinio saulės elemento stabilumą ir apsaugoti perovskito sluoksnį nuo aplinkos poveikio. Kita vertus, skersaryšinimas gali pertvarkyti molekules ir pakeisti tarpmolekulinius atstumus, o tai darys įtaką krūvio netvarkos parametrų ir pernašai medžiagoje.

Šiame darbe buvo nagrinėjamos naujos fluoreno pagrindo skersaryšinamos skylių pernašos medžiagos. Lėkio trukmės metodu buvo išmatuotos skersaryšintų ir neskersaryšintų sluoksnių skylių judrių priklausomybės nuo elektrinio lauko esant skirtingoms temperatūroms. Vėliau su šiomis medžiagomis buvo pagaminti p-i-n

konfigūracijos perovskitiniai saulės elementai, vienas jų pasiekė **11,42%** našumą prie AM1,5 spektro apšvietimo. Šiame darbe parodome, kad skersaryšinimas minimaliai pakeičia medžiagų HOMO ir LUMO energetinius lygmenis, tačiau buvo pastebėtas pokytis energetinėje ir erdvinėje netvarkose bei lėkio trukmės kinetikų dispersiškume. Nepaisant netvarkos padidėjimo, skersaryšinimas medžiagų judriams didelės įtakos neturėjo (1 lent.). O su komercinėmis medžiagomis palyginami voltamperinių charakteristikų parametrai parodo ryškų šio tipo junginių potencialą.



1 pav. Fluoreno pagrindo skersaryšinamos medžiagos V1145, V1177, V1178, V1179.

1 lentelė. Skylių judriai μ_0 prieš ir μ_0^* po skersaryšinimo (elektriniam laukui esant $E=0$).

Medžiaga	μ_0 , cm ² V ⁻¹ s ⁻¹	μ_0^* , cm ² V ⁻¹ s ⁻¹
V1179	$7,7 \cdot 10^{-5}$	$7,1 \cdot 10^{-5}$
V1178	$6,1 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$
V1177	$1,6 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$
V1145	$3,0 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$

Literatūra

- [1] G. Reddy, K. Devulapally, N. Islavath, L. Giribabu, Chem. Rec. **2019**, 19, 2157.
- [2] S. Ameen, M. A. Rub, S. A. Kosa, K. A. Alamry, M. S. Akhtar, H.-S. Shin, H.-K. Seo, A. M. Asiri, M. K. Nazeeruddin, ChemSusChem **2016**, 9, 10.
- [3] Li, Z., Zhu, Z., Chueh, Chu-Chen, Luo, J., Jen, A. K.-Y., Adv. Energy Mater. **2016**, 6: 1601165.

Iterbiu legiruoti cezio švino halidų perovskitų milteliai

Ytterbium doped caesium lead halide perovskite powder

Simona Streckaitė, Lukas Miklušis, Karolina Maleckaitė, Lamiaa Abdelrazik, Vidmantas Jašinskas, Vidas Pakštas, Audrius Drabavičius, Danielis Rutkauskas, Marius Franckevičius, Vidmantas Gulbinas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
simona.streckaite@ftmc.lt

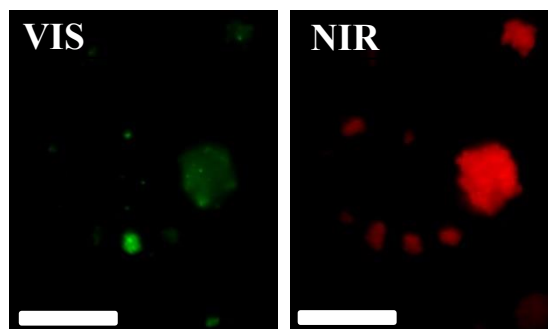
Perovskitai – įvairi medžiagų, pasižyminčių skirtingomis fizikinėmis ir optinėmis savybėmis, klasė. Pastaruoju metu jie sulaukia vis didesnio dėmesio dėl puikios veikimo saulės elementuose, taip pat, kaip labai efektyvios šviesą žemyn konvertuojančios medžiagos [1-3]. Perovskitai, paprastai fluorescuojantys matomajame (VIS) diapazone, perduoda savo energiją priemaišoms, turinčioms mažesnį draustinės energijos tarpą. Tada, dėl kvantinio skaidymo reiškinio, fotoluminescencijos kvantinė išeiga (PLQY) gali viršyti vieneta, nes vienas aukštos energijos fotonas gali būti paverstas dviem žemos energijos fotonais. Tokių kvantinio skaidymo medžiagų kūrimas yra labai patrauklus siekiant iš esmės pagerinti bendrą saulės elementų energijos konversijos efektyvumą arba kitų prietaisų, pvz., šviesos diodų [1], scintiliatorių [4] ir kt., veikimą.

Siekiant tikslesnių medžiagų kūrimo strategijų ir jų technologinių įgyvendinimų, skirtų patobulintai ar net naujai optoelektronikai, reikia geriau suprasti legiruotų perovskitinių medžiagų struktūrinių ir funkcinių savybių sąryšį. Taip pat, svarbu rasti aplinkai nekenksmingus, didelių medžiagų kiekių bei pigesnius paruošimo būdus. Nepaisant daugybės švino halogenidų perovskitų (LHP) sintezės ir legiravimo metodų, šių medžiagų struktūrinės ir fotofizinės savybės yra vis dar menkai suprantamos. Pavyzdžiui, tarp paskelbtų legiruotų perovskitų tyrimų, kyla ginčų dėl to, kaip lantanoido (Ln) jonai elgiasi perovskito gardelėje. Vienas iš kontraversiško klausimų: ar Yb^{3+} jonai pakeičia Pb^{2+} jonus perovskito gardelėje [2] ar sudaro kvazi-2D perovskitines struktūras [1]?

Šiame darbe pristatome du paprastus mechanosintezės metodus iterbiu legiruotų cezio LHP (CLHP) miltelių paruošimui: sintezė su vandeniu ir sausa sintezė be tirpiklių. Taip pat, pateikiame išsamų paruoštų medžiagų struktūrinių ir optinių savybių tyrimą. Mechanosintezės technika yra pigi, nereikalauja daug pastangų ir suteikia galimybę gaminti didelius medžiagų kiekius. Perovskitinės miltelių medžiagos yra labai patrauklios pritaikymui scintiliatoriuose [4], o neseniai buvo parodyta, kad milteliai gali būti naudojami ir plonų perovskito plėvelių gamybai [5].

Mūsų iterbiu legiruoti CLHP milteliai pasižymi derinama eksitonine juosta VIS srityje ir stipria emisija NIR srityje, kuri atsiranda dėl kvantinio skaidymo proceso. Iterbis šioje sistemoje spinduliuoja ties maždaug 985 nm iš $2F_{5/2} \rightarrow 2F_{7/2}$ elektroninio šuolio. Keisdami chloro ir bromo halogenidų santykį, paruošėme CLHP, kurių eksitoninė emisija yra 400–550 nm diapazone. Susintetinti $\text{CsYb}_y\text{Pb}_{1-1.5y}(\text{Cl}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ milteliai pasižymi

dideliu atsikartojamumu, lyginant su sukimo-dengimo iš tirpalo būdu suformuotomis plonomis plėvelėmis, bei stabilium NIR PLQY iki 160 %, priklausomai nuo mišrių halogenidų koncentracijos. Iš struktūrinės analizės tyrimų nustatėme, kad iterbis yra įterpiamas į perovskito gardelę vietoj švino ir efektyviai surenka eksitoninę energiją. Tai matome 1 pav., kur VIS paveiksle kai kurių perovskito kristalų eksitoninė emisija yra visiškai užgesinta, kai tuo tarpu, tose pačiose vietose NIR paveiksle iterbis pasižymi dideliu emisijos intensyvumu.



1 pav. Yb^{3+} legiruotų CsPbCl_3 miltelių fluorescencinės mikroskopijos vaizdai VIS (eksitoninė perovskito emisija) ir NIR (iterbio priemaišų emisija) srityse. NIR kanalo intensyvumas yra iki trijų eilių didesnis nei VIS. Mastelio juosta yra 50 μm . Nuotraukose pavaizduotos dirbtinės spalvos. $\lambda_{\text{exc}} = 405 \text{ nm}$.

Reikšminiai žodžiai: perovskitas, iterbis, legiravimas iterbiu, kvantinis skaidymas.

Literatūra

- [1] A. Ishii & T. Miyasaka, JCP **153**, 194704 (2020).
- [2] D. M. Kroupa, et al., ACS Energy Lett. **3**, 2390 (2018).
- [3] T. J. Milstein, et al., Nano Lett. **18**, 3792 (2018).
- [4] K.A. Dagnall, et al. ACS Omega **7**, 20968–20974 (2022).
- [5] D. Prochowicz, et al., J Mater Chem A Mater **3**, 20772–20777 (2015).

Padėka

Mokslinis tyrimas finansuojamas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“ (sutarties Nr. S-PD-22-4).

Tiesiogiai susintetinto MW-PECVD grafeno biojutiklis SARS-CoV-2 spyglio (S) baltymo detekcijai

MW-PECVD synthesised graphene biosensor for detection of SARS-CoV-2 spike (S) protein

Nerija Žurauskienė¹, Rimantas Gudaitis², Andrius Vasiliauskas², Asta Guobienė², Šarūnas Jankauskas², Voitech Stankevič¹, Skirmantas Keršulis¹, Arūnas Stirke¹, Eivydas Andriukonis¹, Wanessa Melo¹, Vilius Vertelis¹, Šarūnas Meškinius²

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
nerija.zurauskiene@ftmc.lt

²Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko St. 59, LT-51423 Kaunas

2023 m. liepos mėn. duomenimis, pasaulyje patvirtinta daugiau kaip 767 000 000 COVID-19 atvejų, nuo kurių mirė beveik 7 mln. žmonių. Susirgimų COVID-19 registruojama kasdien. Virusas vis dar egzistuoja, todėl tolesni šios infekcijos tyrimai yra labai aktualūs. Nors tikslus procesas, kuriuo SARS-CoV-2 sukelia ligą, iš dalies lieka neišaiškintas, naujausi tyrimai rodo, kad jis naudoja angiotenziną konvertuojantį fermentą II (ACE2) kaip patekimo į šeimininko ląsteles kelią. Svarbu pabrėžti, kad ACE2 taip pat nustatytas kaip pripažintas SARS-CoV ląstelių receptoriaus [1].

Ankstyvas SARS-CoV-2 nustatymas yra labai svarbus, siekiant užkirsti kelią greitai ligos plitimui, ypač atsižvelgiant į tai, kad nuolat daugėja mutacijų, kurios gali neigiamai paveikti diagnostikos tikslumą. Dažniausiai infekcijos diagnostikai pasitelkiami PGR (polimerazės grandininė reakcija) ir ELISA (fermentais susieto imuno-sorbento analizė) metodai. Tačiau šiems diagnostikos metodams reikia daug įrangos, mokymo ir laiko, siekiant atlikti tikslią diagnozę. Taip pat šie metodai netinka greitiems didelio masto tyrimams. Nors jie pasižymi dideliu jautriu, pasitaiko atvejų, kai gaunami klaidingi rezultatai. Be to, jautris ir aptikimo riba (LoD) priklauso nuo COVID-19 viruso dozės ir užkrečiamumo, o tai gali kelti sunkumų jutiklių platformoms.

Todėl mokslininkai aktyviai ieško prieinamo, patikimo ir paprasto metodo, kuriuo būtų galima tiksliai nustatyti SARS-CoV-2. Lauko tranzistoriaus (FET) principu pagrįsti biojutikliai tampa vienu iš tinkamiausių metodų dėl daugelio privalumų, tokių kaip didelis jautris, ištyrimo greitis su puikia LoD, miniatiūrizacijos galimybė, reikalaujanti tik nedidelio analitės kiekio, ir nebrangi gamyba [2]. Be to, FET biojutiklius galima lengvai integruoti į mikroskystinę platformą, dar labiau padidinant prietaiso jautrį [3]. FET principu veikiantys biojutikliai laikomi vienu iš perspektyvių jutiklių tipų, kurie gali būti potencialiai naudingi atliekant tyrimus sveikatos priežiūros vietoje.

Šiame darbe pateikiami grafeno lauko tranzistoriaus (G-FET), skirto aptikti COVID-19 spyglio S baltymą ir jo receptorių ACE2, kūrimo ir tyrimų rezultatai. Grafeno sluoksniai buvo tiesiogiai susintetinti ant SiO₂/Si padėklo mikrobangų plazma aktyvuoto cheminio garų nusodinimo būdu (MW-PECVD). Palyginimui buvo naudojamas komercinis CVD-grafenas, perneštas ant stiklo pagrindo. Grafeno struktūra ir paviršiaus morfologija buvo tiriama Ramano sklaidos

spektroskopija ir atominės jėgos mikroskopija. Grafeno paviršius buvo funkcionalizuotas PBASE (1-pirenbutano rūgšties succinimidilo esteriu), o vėliau atliktas ACE2 receptoriaus imobilizavimas. Buvo sukurta mikroskystinė sistema, kurioje lauko tranzistoriaus su skystąja užtūra perdavimo charakteristikos buvo išmatuotos po kiekvienos grafeno paviršiaus modifikavimo procedūros ir skirtingų ACE2 bei spyglio S baltymo koncentracijų. Tiesiogiai susintetinto grafeno FET jautris receptoriui ACE2, įvertintas pagal Dirako įtampos ΔV_D poslinkį, viršijo pernešto komercinio grafeno pagrindu pagaminto FET jautrį. Spyglio S baltymo koncentracija buvo aptikta jau nuo 10 ag/mL ir matuojama iki 10 μ g/mL, naudojant sukurta mikroskystinę sistemą. Nustatyta, kad Dirako įtampos poslinkis priklauso nuo spyglio S koncentracijos. Tiesiogiai susintetinto grafeno G-FET biojutikliui didžiausias $\Delta V_D = 27$ mV buvo nustatytas, esant 10 pg/mL koncentracijai ir nebekito toliau ją didinant, tuo tarpu pernešto grafeno G-FET biojutikliui ΔV_D didėjo iki 70 mV, esant koncentracijai 10 μ g/mL. Abiejų G-FET LoD buvo žema ir siekė 10 ag/ml. Biojutiklių jautris, kai S spyglio koncentracija yra 10 pg/mL, išmatuotas kaip santykinis srovės pokytis, esant pastoviai užtūros įtampai, atitinkančiai didžiausią G-FET perdavimo charakteristikos statumą, buvo nustatytas atitinkamai 5,6% ir 8,8% tiesiogiai susintetinto ir pernešto grafeno biojutikliams. Taigi, MW-PECVD būdu tiesiogiai susintetinto grafeno biojutiklis, pasižymintis dideliu jautriu ir žema aptikimo riba, turi puikų potencialą pritaikant jį COVID-19 diagnostikoje.

Reikšminiai žodžiai: grafenas; tiesioginė PECVD sintezė; lauko efekto tranzistoriaus principu veikiantis biojutiklis; COVID19; SARS-CoV-2 spyglio baltymas; receptoriaus ACE2; Dirako įtampos poslinkis.

Padėka: Darbas finansuotas Europos regioninės plėtros fondo lėšomis (projekto Nr. 13.1.1-LMT-K-718-05-0015) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT). Finansuojama kaip Europos Sąjungos atsako į COVID-19 pandemiją priemonė.

Literatūra

- [1] W. Li, M.J. Moore, N. Vasilieva, J. Sui, S.K. Wong, M.A. Berne, M. Somasundaran, J.L. Sullivan, K. Luzuriaga, T.C. Greenough, H. Choe, M. Farzan, *Nature* **426**, 450 (2003).
- [2] A. Panahi, D. Sadighbayan, S. Forouhi, E. Ghafar-Zadeh, *Biosensors* **11**, 103 (2021).
- [3] R. Hao, L. Liu, J. Yuan, L. Wu, S. Lei, *Biosensors* **13**, 426 (2023).

Tetrapiroolinių junginių fotovirsimų ypatumai sąlygoti molekulinės struktūros ir kintančių mikroaplinkos veiksnių

Features of phototransformations of tetrapyrroles being determined by the molecular structure and changing microenvironmental factors

Saulius Bagdonas¹, Agnė Kalnaitytė-Vengeliienė¹, Alytis Gruodis², Arūnas Maršalka²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Biofotonikos grupė, Saulėtekio al. 9, 3 korp., LT-10222 Vilnius

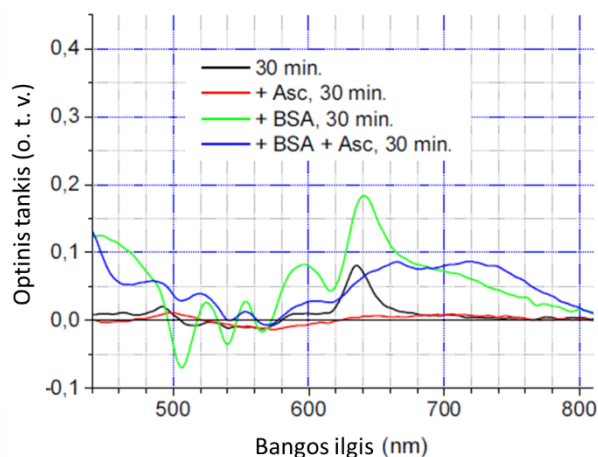
²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
saulius.bagdonas@ff.vu.lt

Tetrapirooliniai junginiai yra vieni svarbiausių organizmuose vykstančių gyvybinių procesų dalyvių, o dėl intensyvios regimosios spinduliuotės sugerties ir parankių sužadintos energinės būsenos virsmų jų fotosensibilizacinės savybės plačiai pritaikomos biomedicinos tikslais, pvz., fotosensibilizuotoje vėžio terapijoje (FDT). Šios metodikos efektyvumą siekiama padidinti derinant su ją kitais terapiniais metodais, ar modifikuojant vėžinio audinio aplinką ir mažinant jo atsparumą oksidaciniam stresui, pvz., tam pasitelkus askorbo rūgštį (AscA) [1].

Šiame darbe fotosensibilizatorių (FS) hematoporfirino darinio HpIXd [2], mezo-tetrasulfofenilporfino (TPPS₄) ir aliuminio ftalocianino tetrasulfonato fotovirsimų tyrimai vandeniniuose skirtingo pH tirpaluose atlikti nuostoviosios sugerties ir fluorescencinės spektroskopijos metodais siekiant atskleisti AscA poveikį oksidaciniams-redukciniams procesams skirtingų joninių atmainų atveju, bei įvertinti šių procesų pokyčius jaučio serumo albumino (BSA) aplinkoje. Papildomi duomenys apie L-askorbo rūgšties radikalų vaidmenį fotoreakcijose, taip pat ir I tipo, bei sąveiką su BSA buvo gauti registruojant elektroninio paramagnetinio rezonanso (EPR) spektrus. Bandiniai kapiliaruose buvo patalpinami spektrometro Elexsys-E580 (Bruker) rezonatoriuje, o spektrų registravimas kambario temperatūroje atliekamas tamsoje ir šviesolaidžiu apšviečiant kapiliarus skirtingo bangos ilgio bei intensyvumo lazerine spinduliuote.

Palyginamieji fotovirsimų tyrimai pademonstravo tetrapirolo molekulinės struktūros ypatumų, lemiančių galimus porfino žiedo fototransformacijų tipus, ir skirtingo AscA poveikio šioms transformacijoms sąsajas. Fotolabilus HpIXd atveju neutraliose ir silpnai šarminėse terpėse AscA slopino fotooksidacines reakcijas, o rūgštinėse terpėse sąlygojo nestabilių, raudonojoje spektrinėje srityje sugerties juostas turinčių fotoproduktų susidarymą. BSA buvimas terpėje suaktyvino ir fotooksidacinius, ir fotoredukacinius virsmus, o AscA, priklausomai nuo pH, skatino pastaruosius, ypač – rūgštinėse terpėse. Santykinai fotostabilių vandeninėse terpėse FS bandinių atveju AscA paskatino jų sugerties spektrų fotoblukimą, kurio intensyvumas taip pat išaugo rūgštesnėse terpėse. Bandinių tyrimai EPR spektrometru atskleidė ryškų besiformuojančio AscA radikalo vaidmenį fotoreakcijos eigai ir jos intensyvumui, priklausomai nuo pasirinkto

švitinimo intensyvumo bei trukmės, o taip pat tetrapirolo radikalų susidarymo fotoreakcijų metu dėsningumus, sąlygotus jų struktūrinių skirtumų ir terpės pH. Galimos sąveikos tarp AscA ir skirtingų TPPS₄ joninių atmainų modeliavimas buvo atliktas pritaikius kompiuterinės struktūrinės analizės metodus.



1 pav. HpIXd bandinių skirtingumiai sugerties spektrai buferinėse (pH 6,9) vandeninėse terpėse su albuminu ir/ar AscA užregistruoti po švitinimo 532 nm lazerine spinduliuote.

Reikšminiai žodžiai: fotosensibilizatoriai, askobato radikalas, pH, albuminas, fotooksidacija.

Literatūra

- [1] P. Chen, J. Yu, B. Chalmers, ir kt., *Anticancer Drugs*, **23**(4), 437 (2012).
- [2] A. Maršalka, A. Kalnaitytė, T. Biekša ir S. Bagdonas, *Lithuanian J. Phys.*, **62**(1), 274 (2016).

Retaisiais žemių metalais legiruotos nanodalelės tikslinei navikų teranostikai

Rare-earth doped metal nanoparticles for targeted cancer theranostics

Greta Butkienė¹, Artiom Skripka^{2,3}, Alėja Marija Daugėlaitė^{1,4}, Vilius Poderys¹, Simona Steponkienė¹,
Evelina Kazlauskė^{1,5}, Riccardo Marin^{3,7,8}, Ilona Uzielienė⁶, Dainius Daunoravičius⁴,
Daniel Jaque³, Fiorenzo Vetrone², Ričardas Rotomskis^{1,9}, Vitalijus Karabanovas^{1,4}

¹Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, Vilnius, Lithuania

²Centre Énergie, Matériaux et Télécommunications, Institut National de la Recherche Scientifique, Université du Québec, Varennes, QC, Kanada

³Nanomaterials for Bioimaging Group (nanoBIG), Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Madridas, Ispanija

⁴Medicinos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Vilnius, Lietuva

⁵Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Vilnius, Lietuva

⁶Regeneracinės medicinos skyrius, VMTI Inovatyvios medicinos centras, Vilnius, Lietuva

⁷Institute for Advanced Research in Chemical Sciences, Universidad Autónoma de Madrid, Madridas, Ispanija

⁸Nanomaterials for Bioimaging Group (nanoBIG), Instituto Ramón y Cajal de Investigación Sanitaria (IRYCIS), Hospital Ramón y Cajal, Madridas, Ispanija

⁹Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Vilnius, Lietuva
greta.jarockyte@nvi.lt

Onkologiniai susirgimai dėl savo heterogeniškumo ir kompleksiško vis dar išlieka viena sudėtingiausiai gydomų ligų. Vienas iš mažiau agresyvių gydymo būdų yra fotosensibilizuota navikų terapija (FNT), jos metu į organizmą suleidžiamas fotosensibilizatorius (FS), kuris organizmui yra netoksiškas, o toksinis poveikis ląstelėms pasireiškia tik apšvietus tam tikro bangos ilgio šviesa. Nors yra sukurta nemažai FS, dauguma jų sužadinami regimajai šviesai, kuri negali giliai prasiskverbti į audinius. Ilgesnių bangų šviesos energijos nepakanka fotocheminių reakcijų iniciavimui bei aktyvių deguonies formų susidarymui. Šiuo metu naudojami FS nepasižymi selektyviu susikaupimu ir pacientai po procedūros ilgą laiką būna jautrūs šviesos poveikiui.

Siekiant išspręsti paminėtas problemas, ieškoma nanodalelių, kurios galėtų būti naudojamos kaip diagnostiniai žymenys, taip pat kaip FS nešikliai, pagerinantys dabar naudojamų junginių selektyvumą. Dideliu proveržiu galima laikyti retaisiais žemių metalais legiruotų apkonvertuojančių sistemų atradimą. Nors apkonversijos reiškinys yra žinomas seniai, tačiau tik sukūrus biosuderinamas apkonvertuojančias nanodaleles (AKND) yra įmanoma jį praktiškai realizuoti ir panaudoti biomedicininiais tikslais. Būdamas netoksiškos, turėdamos didelį anti-Stokso poslinkį bei plačią emisiją raudonojoje ir infraraudonojoje (IR) srityse, AKND gali būti pritaikomos navikų diagnostikoje ir terapijoje. Apjungus AKND ir FS, galima sukurti sistemas, kurių diagnostinė ir terapinė funkcijos būtų atskirtos viena nuo kitos ir valdomos skirtingo bangos ilgio šviesa [1]. Toks atskyrimas leidžia užtikrinti, kad atliekant naviko diagnostiką nevyks jokie papildomi procesai.

Mūsų darbe siekiant praplėsti FS panaudojimo ribas, buvo sukurtas kompleksas, sudarytas iš daugiasluoksnės AKND, (LiLuF₄:Nd³⁺/LiLuF₄/LiYbF₄:Er³⁺/LiLuF₄), bei antros kartos FS chlorino e6 (Ce6). Žadinant kompleksą 793 nm bangos ilgio spinduliuote gaunama emisija IR

spektrinėje srityje, o naudojant 980 nm sužadinamą vyksta apkonversijos procesas, emituojama šviesa UV, regimojoje ir IR srityse. Išspinduliuota UV ir mėlyna šviesa yra sugerama Ce6 molekulės, vyksta fotosensibilizacijos reakcija ir generuojamas singuletinis deguonis. Savo tyrimuose parodėme, kad toks kompleksas susikaupia ląstelėse ir yra biosuderinamas.

Tačiau nanodarinių prasiskverbimas audiniuose yra ribotas [2]. Buvo parodyta, kad navikus pasiekia tik 0,7 % intraveniniu būdu suleistų nanodalelių [3]. Šiai problemai spręsti savo darbe pasitelkėme mezenchimines kamienines ląsteles (MKL), kurios dėl savo savybių yra linkusios migruoti į navikinius audinius. Parodėme, kad MKL gali sukaupti ir pernešti AKND-Ce6 kompleksą link vėžinių ląstelių.

Galiausiai, siekiant gauti terapinį poveikį buvo ištirtas galimas komplekso FNT efektyvumas *in vitro* ląstelių monosluoksninių ir sferoidų modeliuose. Po poveikio 980 nm lazerio spinduliuote buvo atliktas ląstelių dažymas fluorescenciniais gyvybingumo dažais. Tyrimų rezultatai parodė, kad žadinant 980 nm lazeriu yra pastebimas fototoksinis poveikis vėžinėms ląstelėms. MKL pagerina komplekso patekimą į sferoidų vidų, dėl to sukeliama didesnis poveikis vėžinėms ląstelėms.

Mūsų darbe tirto teranostinio komplekso ir MKL apjungimas turi potencialo praplėsti FNT taikymo galimybes ir pagerinti onkologinių susirgimų gydymą.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-22-31.

Reikšminiai žodžiai: teranostika, mezenchiminės kamieninės ląstelės, nanodalelių nunešimas į naviką.

Literatūra

- [1] Skripka et al. *Advanced functional materials*. 2019, 29(1), 1-12.
- [2] Jarockyte et al. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects*. 2018;1862(4):914-23.
- [3] Dai et al. *ACS Nano*, vol. 12, pp. 8423-8435, 2018.

Šviesolaidinė ATR IR spektroskopija žmogaus šlapimo pūslės vėžinių audinių diagnostikoje

Fiber-based ATR IR spectroscopy for human urinary bladder tissue diagnostics

Rimantė Bandzevičiūtė¹, Gediminas Platkevičius², Justinas Čeponkus¹, Arūnas Želvys², Albertas Čekauskas², Valdas Šablinskas¹

¹Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Klinikinės medicinos institutas, Medicinos fakultetas, Vilniaus universitetas, M. K. Čiurlonio g. 21/27, LT-03101 Vilnius

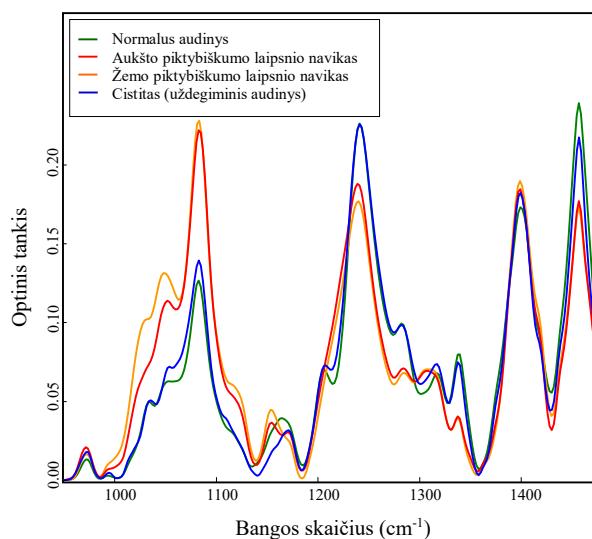
rimante.bandzeviciute@ff.vu.lt

Šlapimo pūslės vėžys yra vienas iš 10 pasaulyje labiausiai paplitusių piktybinių susirgimų ir yra dažniau diagnozuojamas vyrams nei moterims [1]. Plačiai taikomas šlapimo pūslės vėžio gydymo būdas – chirurginė operacija. Siekiant išvengti naviko atsinaujinimo, labai svarbu pašalinti visą vėžinį audinį, todėl turi būti taikomi intraoperatyvūs audinių diagnostikos metodai. Šiuo metu dažnai taikomas ir standartu laikomas intraoperatyvus metodas vėžinio šlapimo pūslės audinio diagnostikai – baltos šviesos cistoskopija (WLC). Tačiau šis metodas pasižymi ganėtinai aukštu klaidingai neigiamu rodikliu (10 - 20 %) [2]. Kitas metodas – fotodinaminė diagnostika (PDD, mėlynos spalvos cistoskopija), kurio jautrumas yra didesnis, tačiau specifiškumo vertės lyginant su WLC metodu yra mažesnės [3]. Dėl riboto šių metodų tikslumo, yra reikalingi nauji minimaliai invaziniai metodai, galintys pagerinti diagnostinį tikslumą.

Pastaruosiu metu atlikta nemažai mokslinių tyrimų, susijusių su Infraraudonosios (IR) spektroskopijos taikymu įvairių tipų vėžiniams audiniams [4]. Dažniausiai tiriami bandiniai – apdoroti audiniai, pavyzdžiui, šaldyti, džiovinti ar fiksuoti formalinu ir parafinu audiniai. Dažniausiai yra atliekami tik laboratoriniai tyrimai, kurie gerokai skiriasi nuo klinikinės diagnostikos. Mūsų atliktuose tyrimuose operacijos metu pašalintų šlapimo pūslės audinių pažeistojo visiškojo vidaus atspindžio (ATR) IR spektrų registravimui buvo pritaikyta šviesolaidinė spektrinė sistema. Taikant šią sistemą audiniai gali būti analizuojami *ex vivo*, *in situ* ar net *in vivo* sąlygomis.

Tyrimo metu atlikta 54 pacientų šlapimo pūslės normalaus, navikinio (aukšto ir žemo piktybiškumo laipsnio urotelio karcinomos) bei cistito audinių spektrų analizė. Suvidurkinti tirtų audinių spektrai yra pateikti 1 pav. Šlapimo pūslės normalaus ir cistito audinių spektruose, lyginant su navikinio audinio spektrais, stebimos didesnio intensyvumo spektrinės juostos, esančios ties 1033, 1206, 1240, 1282, 1317 ir 1339 cm^{-1} , priskiriamos kolagenui. Sumažėjęs kolageno kiekis navikiniame audinyje gali būti siejamas su padidėjusia fermento kolagenazės sekrecija navikiniame audinyje. Navikinio audinio spektruose stebimos didesnio intensyvumo spektrinės juostos, esančios ties 1028 ir 1154 cm^{-1} , priskiriamos glikogenui. Padidėjusi glikogeno koncentracija yra būdinga kai kuriems piktybinių navikų tipams, nes glikogenas yra naudojamas kaip energijos šaltinis ląstelių proliferacijai. Navikiniame audinyje

stebimas didesnis nukleorūgščių kiekis – tai iliustruoja navikinio audinio spektre stebimos nukleorūgštims priskiriamos didesnio intensyvumo spektrinės juostos esančios ties 972 ir 1082 cm^{-1} . Taikant statistinės analizės metodus (hierarchinę klasterių analizę - HCA ir principinių komponentų analizę - PCA) įvertintas metodo tikslumas urotelio karcinomos audinių identifikavimui. Metodo jautrumas identifikuojant navikinį audinį siekia 91 %, tuo tarpu specifiškumas – 96 - 98 %. Remiantis tyrimo rezultatais galima teigti, jog atlikus klinikinius tyrimus, šviesolaidinė ATR IR spektroskopija gali būti naudojama kaip papildomas metodas šiuo metu taikomiems audinių tyrimams siekiant pagerinti diagnostinio metodo tikslumą.



1 pav. Žmogaus šlapimo pūslės normalaus, navikinio (aukšto ir žemo naviko piktybiškumo laipsnio urotelio karcinomos) ir cistito audinių ATR IR spektrai

Reikšminiai žodžiai: Šviesolaidinė ATR IR spektroskopija, šlapimo pūslės vėžys, urotelio karcinoma.

Literatūra

- [1] H. Sung et al., CA. Cancer J. Clin. **71**, 3 (2021).
- [2] G. I. Russo et al., Cancers. **13**, 4378 (2021).
- [3] G. Mowatt et al., Int. J. Technol. Assess. Health Care. **27**, 1 (2011).
- [4] G. Bellisola, C. Sorio, Am J Cancer Res. **2**, 1 (2012).

Plataus lauko antros harmonikos generacijos mikroskopija su mašininu mokymusi skydliaukės vėžio detekcijai

Wide-field second harmonic generation microscopy with machine learning for thyroid cancer detection

Yaraslau Padrez¹, Lena Golubewa¹, Danielis Rutkauskas¹
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
danielis.rutkauskas@ftmc.lt

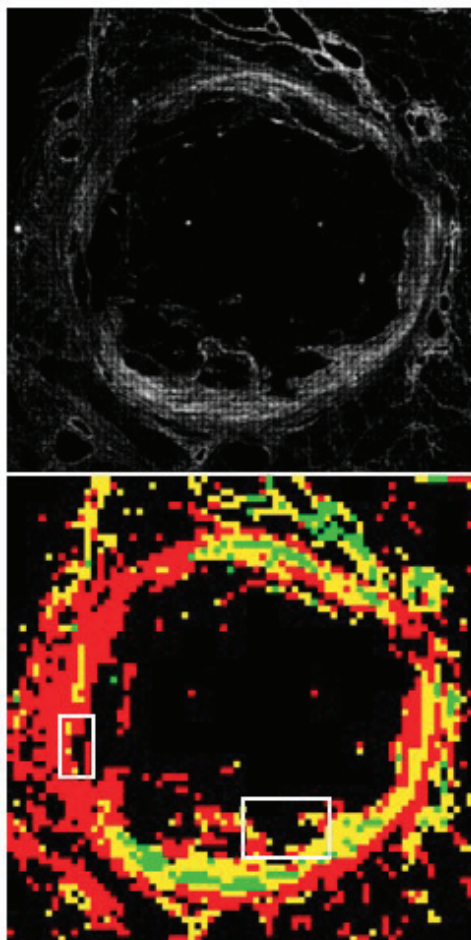


Figure 1. (Top) Tiled SHG image of a thyroid nodule capsule consisting of 72x72 individual SHG image tiles and covering an area of 8x8 mm. (Bottom) A map of SHG image tiles attributed to 3 different K-means clusters with designated cancer cell invasions.

Second harmonic generation (SHG) microscopy has become a technique of choice for label-free microscopic imaging of various biological structures. SHG is a non-linear optical process, where illumination light is frequency-doubled upon its interaction with ordered non-centrosymmetric material. Among biological materials, the strongest harmonophores are collagen, microtubules, and myosin in the order of decreasing efficiency of SHG. SHG imaging thus allows for detailed visualization of

collagen arrangement in the extracellular matrix. Collagen structure appears to be remodelled in various pathological situations such as cancer, fibrosis, and connective tissue disorders. Since those changes can be detected with SHG imaging, and SHG does not require extraneous labels, it is a viable addition to traditional diagnostic methods based on the inspection of stained histological sections.

Since its inception and up until not so long ago SHG imaging was performed by employing laser scanning microscopy. Recently, it was demonstrated that the speed of acquisition can be significantly increased in the wide-field configuration that in combination with mechanical scanning enables fast imaging of macroscopic sample areas [1][2]. In the present work, we exploit this opportunity of fast measurement to accumulate SHG images of large sample areas (Figure 1) and investigate the possibility to detect cancerous changes in thyroidal tissue sections. SHG images of collagen structures in thyroid nodule capsule were quantitatively analysed using first, second and higher order statistics based on grey level co-occurrence matrix (GLCM) in combination with a variant of unsupervised machine learning for image segmentation according to the calculated texture parameters. K-means clustering revealed areas of collagenous capsule with presumably different extent of cancer-associated collagen remodelling. This designation not only dubbed the assignment of the sites of cancer cell invasion but also provided an indication of less obvious areas of possible inflammation or cancer cell invasion occurring on a different section of a voluminous thyroid nodule. Overall, SHG imaging of thyroidal nodules in tandem with automated data analysis presents an illustrative example of an objective approach that could be auxiliary to the established pathological analysis.

Key words: second-harmonic generation. wide-field imaging, collagen, machine-learning.

Literature

- [1] C. Macias-Romero, M. E. P. Didier, P. Jourdain, P. Marquet, P. Magistretti, O. B. Tarun, V. Zubkovs, A. Radenovic, S. Roke, *Optics Express* **22**, 31102 (2004).
- [2] A. Dementjev, R. Rudys, R. Karpicz, D. Rutkauskas, *Lithuanian Journal of Physics* **60**, 145 (2020).

Tiesioginė grafeno sintezė ant SiO₂ mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ir taikymas lauko tranzistoriams

Direct graphene synthesis on SiO₂ by microwave plasma enhanced chemical vapor deposition for field-effect transistor applications

Šarūnas Meškiniš, Andrius Vasiliauskas, Asta Guobienė, Lukas Kamarauskas, Šarūnas Jankauskas, Rimantas Gudaitis
Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko 59, LT-51423 Kaunas

Žymiausia 2D nanomedžiaga, grafenas, pasižymi milžiniškais elektronų ir skylių judrumais (iki 350 000 cm² V⁻¹ s⁻¹), galimybe legiruoti elektriniu lauku, lankstumu, skaidrumu, cheminiu inertiškumu [1]. Todėl greta daugelio kitų galimų taikymų, atliekami gausūs tyrimai kurių tikslas yra panaudoti grafeną įvairių itin sparčių elektroninių prietaisų gamybai [1]. Čia svarbų vaidmenį atlieka lauko tranzistoriai su grafeniniu kanalu [2]. Tokie prietaisai gali būti sėkmingai panaudoti ir įvairių dujų jutiklių bei biojutiklių gamybai. [3,4]

Paprastai grafenas auginamas cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ant katalizinės (Cu ar Ni) folijos arba ekstrafolijuojamas [5]. Toliau vykdomas ilgas grafeno pernešimo ant puslaidininkio ar dielektriko paviršiaus procesas [5]. Tuo metu grafenas gali būti užterštas įvairiais adsorbatais, jame atsiranda raukšlės [6]. Be to, ši technologija nesuderinama su puslaidininkinių prietaisų gamybos technologine seka.

Neseniai parodyta, kad grafeno sluoksnį galima tiesiogiai užauginti ant dielektrinių arba puslaidininkinių pagrindų, naudojant plazma aktyvuotą cheminį nusodinimą iš garų fazės [3,7]. Tačiau kol kas šios technologijos yra užuomazgoje.

Šiame darbe grafeno sluoksniai buvo tiesiogiai sintezuoti ant SiO₂ plėvelių, terminio oksidavimo būdu užaugintų ant Si(100) pagrindų, nenaudojant jokių katalizinių medžiagų. Sintzei naudotas mikrobange plazma aktyvuotas cheminis nusodinimo iš garų fazės.

Grafeno struktūra tirta vieno bangos ilgio (532 nm) Raman'o sklaidos spektroskopijos būdu. Grafeno morfologija tirta atominių jėgų mikroskopijos būdu ir skenuojančiu elektronu mikroskopu. Buvo pagaminto tiesiogiai sintezuoto grafeno lauko tranzistoriai. Ištirtos šių tranzistorių elektrinės charakteristikos, įvertintas grafeno judris.

Buvo nagrinėjama auginimo sąlygų (temperatūros, metano ir vandenilio srautų santykio, slėgio, plazmos galios ir sintezės proceso trukmės) įtaka grafeno struktūrai. Nustatyta, kad keičiant šiuos technologinius parametrus galima valdyti grafeno sluoksnių skaičių ir defektų kiekį grafene.

Ištirti grafeno lauko tranzistoriai su SiO₂ užtūros dielektriku ir grafeno lauko tranzistoriai su skysta (vandens) užtūra. Pirmuoju atveju santako ir ištako srovė monotoniškai priklausė nuo užtūros įtampos ir nepavyko nustatyti Dirac'o įtampos. Antruoju atveju, Dirac'o įtampa buvo 0.9-1.1 V. Ištyrus grafeno sintezės sąlygų įtaką grafeno judriui nustatyta, kad grafeno judris didėja ilgėjant grafeno sintezės procesui. Tuo tarpu nuo temperatūros, vandenilio ir metano srautų santykio,

galios ir slėgio grafeno judris priklausė nemonotoniškai. Išnagrinėjus grafeno struktūros įtaką krūvininkų judriui nustatyta, kad krūvininkų judris didėja mažėjant grafeno sluoksnių skaičiui. Tačiau grafeno judris kartu didėjo mažėjant grafeno varžai. Tai prieštarautų prieš tai minėtai tendencijai. Todėl galima daryti prielaidą, kad mūsų atveju ištisinis grafeno sluoksnis susiformavo tik pakankamai ilgai auginant grafeną. Krūvininkų judris nepriklausė nuo defektų tankio grafene. Tačiau pastebėta tendencija, kad judris mažėja G smailės padėčiai slenkantis į didesnių bangos skaičių pusę ir didėja 2D smailės padėčiai slenkantis į didesnių bangos skaičių pusę. Tai rodytų, kad tiesiogiai sintezuotame grafene krūvininkų judris priklauso nuo grafeno savaiminio legiravimo lygio.

Apebendrinant, ištyrus tiesiogiai ant SiO₂ sintezuoto grafeno struktūrą ir grafeno lauko tranzistorių charakteristikas bei elektrines savybes nustatyta, kad grafeno judrį galima padidinti parinkus tinkamas sintezės sąlygas. Parodytas ryšys tarp grafeno struktūros ir krūvininkų judrio grafene. Grafeno savaiminio legiravimo procesai turėjo didesnę įtaką krūvininkų judriui grafene nei grafeno defektų tankis.

Reikšminiai žodžiai: tiesioginė grafeno sintezė, mikrobange plazma aktyvuotas cheminis nusodinimas iš garų fazės, Raman'o sklaidos spektroskopija, grafeno lauko tranzistoriai.

Literatūra

- [1] L. Banszerus, M. Schmitz, S. Engels et al. Ultrahigh-mobility graphene devices from chemical vapor deposition on reusable copper. *Science Advances* 1, 2015, e1500222.
- [2] B. Vamsi Krsihna, S. Ravi, M. Durga Prakash, Recent developments in graphene based field effect transistors, *Materials Today: Proceedings*, 2021, 45, 1524-1528.
- [3] Meškiniš, Š.; Gudaitis, R.; Vasiliauskas, A.; Guobienė, A.; Jankauskas, Š.; Stankevič, V.; Keršulis, S.; Stirkė, A.; Andriukonis, E.; Melo, W.; et al. Biosensor Based on Graphene Directly Grown by MW-PECVD for Detection of COVID-19 Spike (S) Protein and Its Entry Receptor ACE2. *Nanomaterials* 2023, 13, 2373.
- [4] P. Bhattacharyya. Fabrication Strategies and Measurement Techniques for Performance Improvement of Graphene/Graphene Derivative Based FET Gas Sensor Devices: A Review, *IEEE Sensors Journal*, 2021, 21, 10231-10240.
- [5] Yi Zhang et. al. Review of Chemical Vapor Deposition of Graphene and Related Applications, *Acc. Chem. Res.*, 2013, 46 (10), pp 2329-2339.
- [6] S. J. Haigh et al. Cross-sectional imaging of individual layers and buried interfaces of graphene-based heterostructures and superlattices. *Nature Materials* 11, 2012, 764-767.
- [7] Š. Meškiniš, A. Vasiliauskas, A. Guobienė, M. Talaikis, G. Niaura, R. Gudaitis. The direct growth of planar and vertical graphene on Si(100) via microwave plasma chemical vapor deposition: synthesis conditions effects. *RSC Adv.*, 2022, 12, 18759-18772.

Morfologiniai pokyčiai plonose aukso dangose plazmonų rezonanso valdymui

Morphological changes in thin gold films for plasmon resonance control

Kernius Vilkevičius¹, Algirdas Selskis², Evaldas Stankevičius¹

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

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

kernius.vilkevicius@ftmc.lt

Plazmoniniai metalai bei jų nanodariniai plačiai tyrinėjami dėl jų pritaikymo jutiklių ar paviršiaus sustiprintos Ramano spektroskopijos (SERS) srityse. Tiek pavieniuose, tiek grupuotuose dariniuose, paveikus juos spinduliuote, stebimas šviesos sugertimi pasižymintis plazmonų rezonanso reiškinys. Kompleksinėse struktūrose, pavienių nanodarinių lokalizuoti paviršiaus plazmonai bei ištisinėje metalo dangoje dėl gardelės sužadinas sklindantis plazmonų poliaritonas hibridizuojasi ir sudaro hibridinį paviršinių plazmoną, pasižyminti stipresnėmis rezonansinėmis savybėmis [1].

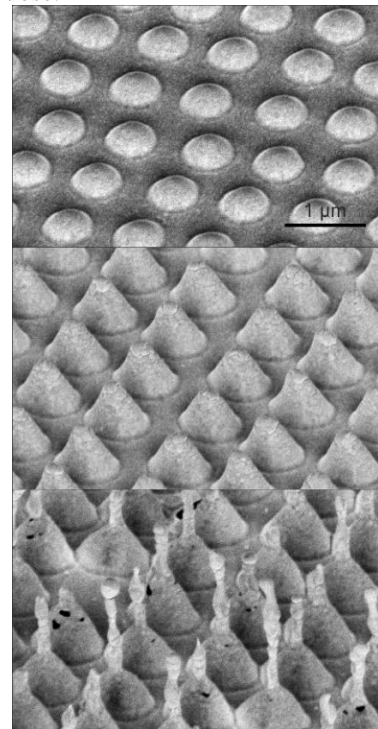
Aukso struktūrizavimas plazmoniniams taikymams vis dažniau atliekamas lazerinėmis technologijomis. Viena tokių – tiesioginis lazerinis rašymas, kurio metu lazerio spindulys aštriai sufokusuojamas į paviršių ir vykdomas lokalus zonos apdirbimas. Modifikuojant lygų metalo sluoksnį pavieniais impulsais, suformuojamos tuščiavidurės iš dangos iškilusios struktūros. Jų forma bei dydis priklauso nuo impulso energijos, lazerio bangos ilgio [2], fokusavimo sąlygų bei metalo dangos storio. Pagrindinės trys morfologinės fazės – gumbeliai, kūgiai bei antenos, susiformuojantys sušildant bei lokaliai išlydant medžiagą [3].

Šiame tyrime buvo nagrinėjamas skirtingos morfologijos periodinių darinių formavimasis 25, 50, 75 bei 100 nm storio aukso dangose bei tiriamos jų plazmoninės savybės. Didinant lazerio impulso energiją, sluoksnio modifikacijos metu formuojami aukštesni ir didesni dariniai – gumbeliai virsta kūgiais, o vėliau antonomis (1 pav.), kol įvyksta sluoksnio abliacija. Plonose dangose (25 nm bei 50 nm) formuojasi siauros bei aukštos antenos, kylančios nuo padėklo pagrindo, tuo tarpu storesnėse – platesnės antenos, besiformuojančios ant kūgio viršūnės. Darinių morfologiją įmanoma valdyti ne tik keičiant energiją, tačiau ir periodą tarp darinių. Mažesniu atstumu formuojant struktūras, dėl lazerio pluošto persidengimo, dalis paveikiamos zonos modifikuojama kelis kartus, tad ties fiksuota energija mažesniuose atstumuose galima suformuoti aukštesnę morfologinę fazę.

Plazmoninės savybės buvo tiriamos matuojant atspindžio spektrus nuo hibridines plazmonines modas žadinančių periodinių nanodarinių gardelių. Gumbelių rezonanso vieta spektre gali būti apskaičiuojama pagal vienmatės gardelės difrakcinę formulę [1]. Keičiantis morfologijai, rezonansas slenkasi į didesnius bangos ilgius, tad kūgių ir antenų gardelėms pastaroji formulė nebetinka. Poslinkis vyksta dėl didėjančio efektinio periodo. Mažiausių darinių gardelių rezonansinės

smailės pasižymi dideliu intensyvumu ir siauru pločiu, tad pastarųjų kokybė didelė. Tuo tarpu vykstant rezonanso poslinkiui, jis taip pat plėtėja, dėl ko kūgių bei antenų gardelių rezonanso kokybė prastėja.

Dėl aukštos plazmonų rezonanso kokybės, gumbeliai turi potencialo būti pritaikomi plazmoninių jutiklių srityje, tuo tarpu aštrios smailės turinčios antenos, suformuojančios karštuosius taškus, gali būti taikomos SERS tyrimuose.



1 pav. Aukso nanodarinių gardelės: gumbeliai (a), kūgiai (b), antenos (c).

Projektas finansuojamas Lietuvos mokslo tarybos pagal projekto Nr. S-MIP-23-32 veiklą „Plazmoninės nanostruktūros, pagamintos naudojant tiesioginį lazerinį rašymą, SERS taikymams“.

Reikšminiai žodžiai: plazmonų rezonansas, tiesioginis lazerinis rašymas, aukso nanodariniai.

Literatūra

- [1] E. Stankevičius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, Z. Balevičius, Adv. Opt. Mater. **9**(12), 2100027 (2021).
- [2] K. Vilkevičius, A. Selskis, E. Stankevičius, Appl. Surf. Sci. **617**, 156629 (2023).
- [3] D. Pavlov, A. Zhizhchenko, L. Pan, A. A. Kuchmizhak, Materials. **15**(5), 1834 (2022).

Savirankiai metapaviršiai: nuo jutiklių iki taikymų fotokatalizei

Self-assembled metasurfaces for sensing and photocatalysis

Asta Tamulevičienė^{1,2,3*}, Nadzeya Khinevich¹, Tomas Klinavičius¹, Mindaugas Juodėnas¹, Sigita Tamulevičiūtė^{1,2},
Tomas Tamulevičius^{1,2,3}

¹Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

² Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

³UAB Nanoversa, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

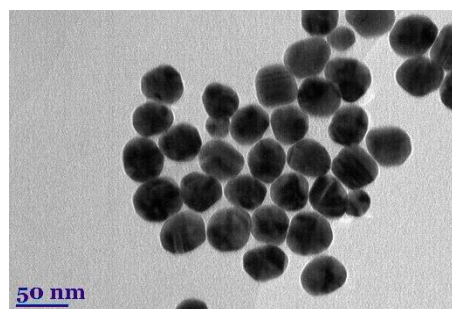
asta.tamuleviciene@ktu.lt

Metapaviršiai yra vieni pažangiausių dirbtinai suformuotų darinių tyrinėjamų pastaruoju metu. Jie dažnai formuojami naudojant dielektrines medžiagas, nes lyginant su metalais, yra išvengiama energijos nuostolių [1]. Pagrindinė metapaviršių dizaino idėja yra struktūrų formavimas iš tam tikrų, už bangos ilgį mažesnių, struktūrinių vienetų siekiant išgauti norimas optines savybes ir funkcijas. Šiuo požiūriu tauriųjų metalų nanodalelės pasižymi unikaliomis šviesos sklaidymo ir sugerties savybėmis suteikia papildomų pranašumų metapaviršių taikymuose. Didžiausia dalis šiuo metu tyrinėjamų paviršių yra formuojami naudojant brangias technologijas, tokias kaip elektronų litografija, reaktyvus joninis ęsdinimas ir vakuuminis garinimas. Tačiau pasitelkus saviorganizacijos ant paviršių su kliūtimis procesus suformuojami tvarkingi nanodalelių masyvai ir išvengiama brangių ir sudėtingų technologijų naudojimo. Parinkus tauriųjų metalų nanodalelių dydį ir jų išsidėstymą galima keisti paviršiui būdingo gardelės rezonanso (*angl.* surface lattice resonance) padėtį [2]. Buvo pademonstruota, kad tokios struktūros sėkmingai gali būti naudojamos paviršiuje stiprinamos Ramano sklaidos (SERS) signalo stiprinimui kai paviršiaus gardelės rezonanso padėtis sutampa su žadinančio lazerio bangos ilgiu [2].

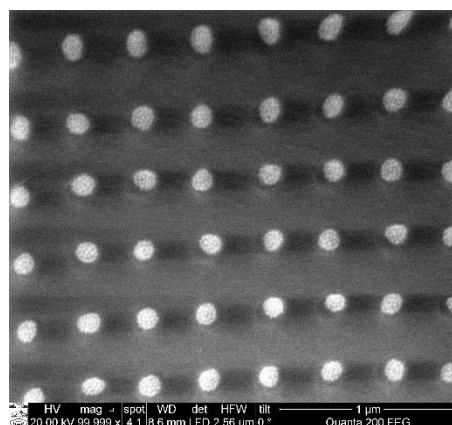
Šiame darbe Au ir Ag nanodalelės buvo sintetamos cheminės sintezės būdu naudojant užuomazgų auginimo metodą [3, 4]. Parinkus sintezės sąlygas, galima keisti dalelių dydį nuo 20 iki 200 nm ir nusodinus nanodaleles ant paviršiaus koreguoti paviršiaus gardelės rezonanso padėtį. Nanodalelių optinių savybių vertinimas atliktas naudojant AvaSpec 2048 (Avantes) optinį spektrometrą 190-1000 nm intervale. Suformuotų dalelių geometriniai matmenys nustatyti naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą SEM Quanta 200 FEG (FEI) ir pralaidumo elektronų mikroskopą TEM Tecnai G20 (FEI). Nanodalelės iš koloidinio tirpalo buvo nusodintos į 400 nm periodo gardelės masyvus replikuotus polidimetilsiloksane naudojant kapiliarinio nusodinimo metodiką [2]. Parinkus kliūčių matmenis ir nanodalelių dydį, vienoje kliūtyje galima nusodinti vieną arba daugiau dalelių.

1 paveiksle pateikta vieno sintezės etapo metu gautų vidutinio 40 nm dydžio aukso nanodalelių mikrofotografija. Šias daleles nusodinus į masyvus buvo suformuoti periodiškai nanodalelių rinkiniai. SEM analizė (2 pav.) patvirtino, jog dalelės buvo tvarkingai nusodintos visame analizės plote. Toliau tokie

metapaviršiai gali būti sėkmingai naudojamos SERS jutikliuose bei fotokatalizės procesų tyrimams [5].



1 pav. Aukso nanodalelių TEM mikrofotografija



2 pav. 400 nm periodiškumo šablone saviorganizacijos būdu nusodintos Au nanodalelės

Reikšminiai žodžiai: aukso nanodalelės, metapaviršiai, jutikliai, fotokatalizė.

Literatūra

- [1] A. Ali, A. Mitra, B. Aïssa, *Nanomaterials* (Basel). 12, 1027 (2022).
- [2] N. Khinevich, M. Juodėnas, A. Tamulevičienė, T. Tamulevičius, S. Tamulevičius, M. Talaikis, G. Niaura, *Sensor Actuat B-Chem*, 394, 134418 (2023)
- [3] N. Bastus, F. Merkoçi, J. Piella, V. Puentes, *Chem. Mater.* 26, 2836 (2014);
- [4] N. Bastus, J. Comenge, V. Puentes, *Langmuir* 27, 11098 (2011)
- [5] E. Cortés, F.J. Wendisch, L. Sortino, A. Mancini, S. Ezzendam, S. Saris, L. de S. Menezes, A. Tittel, H. Ren, S.A. Maier, *Chem. Rev.* 122, 15082 (2022)

Lazeriu generuotų koloidinių aukso, sidabro ir hibridinių nanodalelių stabilumo ir SERS signalo intensyvumo priklausomybė nuo KCl koncentracijos vandens tirpale

Laser-generated colloidal gold, silver, and hybrid nanoparticles stability and SERS signal intensity dependence on KCl concentration in aqueous solution

Vita Petrikaitė¹, Martynas Talaikis², Martynas Skapas², Lina Mikoliūnaitė², Aikaterini-Maria Gkouzi², Romualdas Trusovas¹, Gediminas Niaura², Evaldas Stankevičius¹

¹ Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

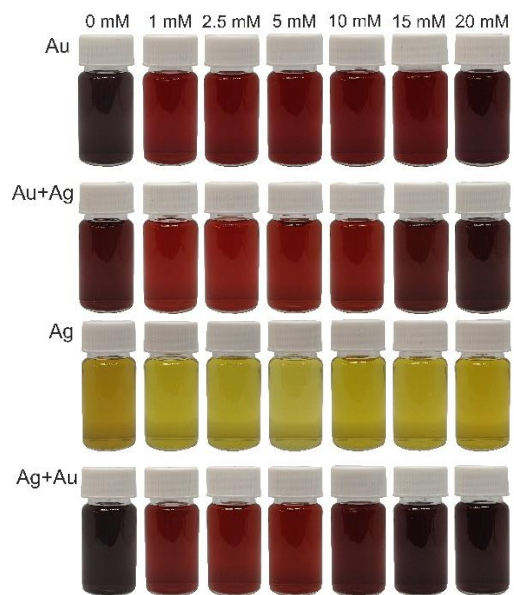
² Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

vita.petrikaite@ftmc.lt

Tauriųjų aukso ir sidabro metalų nanodalelės, sulaukė didelio dėmesio dėl optinių, elektroninių ir katalizinių savybių, glaudžiai susijusių su lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso reiškiniu (LPPR). Dėl unikalių savybių [1] jos naudojamos jutikliuose, biologiniuose taikymuose, paviršiaus sustiprintoje Ramano sklaidoje (SERS) [2], katalizatoriuose, nanotechnologijose, ženklinime ir elektronikoje. Tauriųjų metalų nanodalelių generacija yra plačiai ištirta. Sukurta įvairių metodų, įskaitant cheminę redukciją, elektrocheminį nusodinimą, sol-gelio procesus ir lazerinę abliaciją [2, 3]. Iš šių metodų lazerinė abliacija įgavo pagreitį kaip švarus ir aplinkai nekenksmingas nanodalelių gamybos metodas, nereikalaujantis papildomo valymo nuo toksišku medžiagų. Tačiau viena iš problemų, susijusių su lazerine abliacija, yra nanodalelių tendencija agreguotis, o tai riboja tolesnį panaudojimą. Siekiant išvengti dalelių agregacijos, pridedama papildomų medžiagų, kurios užteršia švarų metodą. Todėl išbandėme biologiškai suderinamą medžiagą – kalio chloridą (KCl). Yra žinoma, kad druska skatina agregaciją [4]. Tačiau, tyrimai parodė, kad mažos druskos koncentracijos gali sulėtinti agregacijos procesą [5]. Šios ribinės koncentracijos buvo analizuojamos šiame darbe.

Tyrimo metu buvo stebimas aukso, sidabro ir jų mišinio nanodalelių, susidariusių skirtingos koncentracijos KCl tirpaluose, agregacijos greitis ir ekstinkcija per 8 savaites. Aukso ir sidabro nanodalelės buvo generuojamos iš tūrinių taikinių, panardintų į 20 ml skirtingos koncentracijos KCl druskos tirpalus: 0 mM–20 mM. Hibridiniai tirpalai buvo generuojami iš skirtingų tūrinių taikinių, iš pradžių abliuojant vieną metalinį taikinį, o paskui kitą. Buvo keičiama metalinių taikinių seka ir stebima jos įtaka. Bendras generavimo laikas ir plotas buvo toks pat kaip ir monokoloidų atveju. Taikiniai buvo apdorojami fokusuotu Nd:YAG lazeriu ("Ekspla Baltic1064 HP", 1064 nm, 10 ns impulso trukmė). Kas savaitę buvo registruojami gautų koloidinių tirpalų ekstinkcijos spektrai ir nuotraukos. Taip pat buvo tiriama dalelių morfologija, SERS signalo stiprumas ir zeta potencialas. Tirti bandiniai pateikti 1 pav.

Visoms lazerinės abliacijos būdu vandenyje ir druskos tirpale suformuotoms dalelėms būdinga sferinė forma ir neigiamas zeta potencialas (nuo -16 mV iki -58,8 mV). Tyrimo metu nustatėme tinkamas KCl druskos koncentracijas padedančias išlaikyti stabilų tirpalą be didelių spektrinių nukrypimų.



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

Reikšminiai žodžiai: nanodalelės, SERS, plazmonika, lazerinė abliacija, taurieji metalai.

Padėka:

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

Literatūra

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

Kristališkumo įtaka cheminiu būdu susintetintų plazmoninių sidabro nanodalelių lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso relaksacijos trukmėms

Crystallinity effect on the relaxation times of localized surface plasmon resonance of chemically synthesized silver nanoparticles

Nadzeya Khinevich¹, Domantas Peckus^{1,2}, Asta Tamulevičienė^{1,2}, Gerda Klimaitė², Joel Henzie³, Tomas Tamulevičius^{1,2}, Sigitas Tamulevičius^{1,2}

¹Institute of Materials Science of Kaunas University of Technology, K. Baršausko St. 59, LT-51423, Kaunas, Lithuania

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

³International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba, 305-0044, Japan
domantas.peckus@ktu.lt

Plasmonic metal nanoparticles (NPs) show great promises in various electro-optical applications such as photocatalysis, sensing, solar cells and medicine [1]. As there are so many plasmonic NPs of different metal, size, shape, crystal structure, etc., it becomes very complicated task to compare their plasmonic properties and choose the best type of plasmonic NPs for applications. We suggest that localized surface plasmon resonance (LSPR) relaxation times can help to compare the plasmonic properties of metal NPs. The LSPR relaxation dynamics consists of several processes such as electron-electron scattering, electron-phonon (e-ph) coupling, and phonon-phonon scattering. The evaluation of the relaxation time of the long e-ph coupling can be useful for various applications like photocatalysis, while the short one for intense thermal effects can be useful in medicine [1]. To analyze how this e-ph coupling relaxation time can be modified, we analyzed different size monocrystalline silver nanocubes (Ag NCs) and polycrystalline silver spheres (Ag NSs).

In our research, we have demonstrated the transient absorption spectroscopy (TAS) method as a perspective tool for the analysis of plasmonic properties of various crystalline-structure Ag NPs [2]. In addition to the TAS measurements, we have used transmission electron microscopy (TEM) and X-ray diffraction (XRD). We used TEM images to calculate the sizes of Ag NSs and NCs. The sizes of the crystallites were calculated by the Scherrer formula maintained on XRD data. Based on TEM and XRD data we calculated the ration – (Crystallite size/Linear dimension of Ag NPs)². Where crystallite size – parameter calculated with Scherrer formula from silver nanoparticles (Ag NPs) sample XRD data; linear dimension of Ag NPs – linear dimension is the length chosen to evaluate size of Ag NPs. It is the diameter for Ag NSs and the edge length for Ag NCs. We demonstrated that the decay time constant depends linearly on (Crystallite size/linear dimension of Ag NPs)² for polycrystalline Ag nanospheres, while monocrystalline Ag nanocubes do not show any clear dependence on this ratio (Fig. 1).

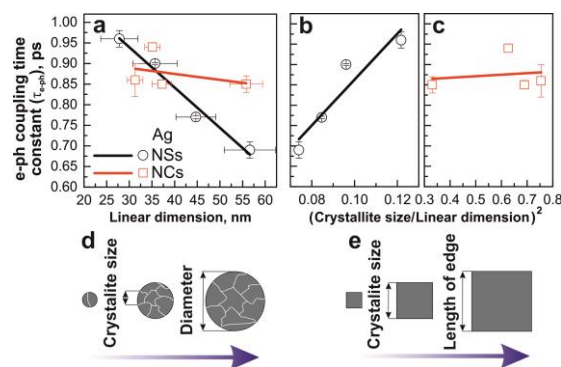


Fig. 1. Dependence of the *e-ph* coupling time constant on the linear dimension of Ag NPs (a), *e-ph* coupling time constant dependence on (Crystallite size/diameter of Ag NSs)² (b); (Crystallite size/edge length of Ag NCs)² (c). The black and red lines show the guide for eyes. D – diameter of Ag NSs, EL – edge length of Ag NCs. The schematic image of Ag NSs (d) and Ag NCs (e) [2].

The results indicate that the e-ph coupling time could be used to evaluate crystallinity and crystallite size in plasmonic metal NPs.

This research was performed within a project LaSensA under the M-ERA.NET scheme and was funded by the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-M-ERA.NET-21-2, National Science Centre (Poland) agreement No. UMO-2020/02/Y/ST5/00086, Saxon State Ministry for Science, Culture, and Tourism (Germany) and co-financed with tax funds on the basis of the budget passed by the Saxon state parliament.

Keywords: silver nanospheres, silver nanocubes, electron-phonon coupling, transient absorption spectroscopy, crystallite size, polycrystalline structure

References

- [1] A.M. Fagan et al., ACS Nano **15**, 1378-1387 (2021).
- [2] N. Khinevich et al., J. Materiomics
<https://doi.org/10.1016/j.jmat.2023.08.009>.

Nuotolinė GaN epitaksija per grafeną

Remote epitaxy of GaN via graphene

K. Badokas¹, D. Augulis¹, A. Kadys¹, J. Mickevičius¹, E. Radiunas¹, M. Skapas², S. Stanionytė², I. Ignatjev²,
B. Šebeka², M. Skapas², G. Juška¹ and T. Malinauskas¹

¹Vilniaus Universitetas, Fizikos Fakultetas, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius

tadas.malinauskas@ff.vu.lt

III grupės nitridai yra perspektyvios medžiagos kuriant naujos kartos elektronikos ir fotonikos komponentus. Daug pastangų buvo dedama optimizuojant III-grupės nitridų heteroepitaksijos procesą daugelį metų. Tačiau būdingas kristalo gardelių nesutapimas ir šiluminio plėtimosi koeficientų skirtumai tarp nitridų ir epitaksijai skirtų padėklų vis dar stipriai riboja auginamo kristalo kokybę.

Galio nitrido (GaN) nuotolinė epitaksija per grafeną neseniai sulaukė didelio dėmesio kaip naujas augimo būdas, leidžiantis po auginimo lengvai nulupti pavienį sluoksnį ar sudėtingą prietaiso struktūros membraną.

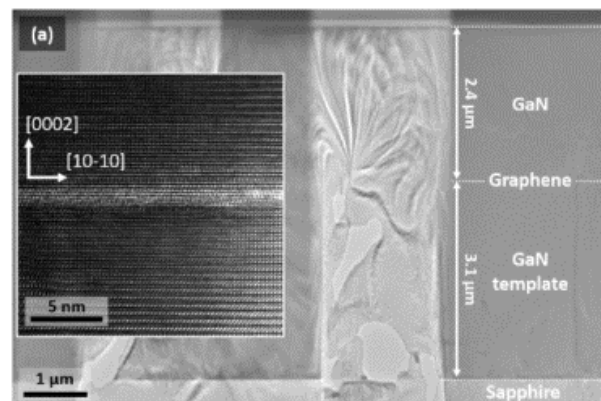
Nuotolinės epitaksijos esmė – monokristalinio sluoksnio homo- arba heteroepitaksiją ant van der Waals paviršių turinčios 2D medžiagos, kuri yra skaidri po ja esančio padėklo elektrocheminam potencialui, įtakojančiam epitaksijos procesą nesuformuojant cheminių jungčių su epitaksiniu sluoksniu. Toks būdas įgalina nulupti plonas, lankščias membranas užaugintas ant kieto, dažnai šilumai nelaidaus, kelių šimtų mikrometrų storio padėklo. Prietaisai pagaminti iš tokių membranų gali būti sėkmingai panaudoti opto- ir bioelektronikoje, interaktyviuose paviršiuose, naujos kartos didelės galios ir dažnio elektronikoje, regimajai šviesai skaidrioje elektronikoje. Atsiranda galimybė integruoti skirtingomis sąlygomis auginamas ir skirtingas funkcijas atliekančias struktūras į daugiavertinius hibridinius prietaisus, tokius kaip funkcionalizuotos mikroschemos (*lab-on-chip*).

Bet tai kol kas nauja technologija, reikalingi išsamūs tyrimai norint visiškai suprasti III-grupės nitridų auginimą ant van der Waals paviršių turinčių 2D medžiagų, kad būtų galima sėkmingai išnaudoti visą nuotolinės epitaksijos potencialą.

Šiame darbe pateikiame GaN epitaksijos monokristalinių sluoksnių augimą naudojant GaN/safyro ruošinį, padengtą grafenu. GaN ruošinius ant safyro ir GaN tiriamuosius sluoksnius ant grafeno užauginame naudodami epitaksijos iš metaloorganinių garų fazės (MOVPE) reaktorių. Pademonstravome vieno ir kelių žingsnių GaN sėklų formavimo ant grafeno paviršiaus ir ištinimo sluoksnio koalescencijos procesus skirtingose temperatūrose, ypatingą dėmesį skirdami grafeno ir GaN paviršių ties jų sandūra tyrimams [1]. Išanalizavome GaN sėklų susidarymo ant grafeno procesą nuotolinės epitaksijos metu. Darbe išdėstome GaN epitaksinio sluoksnio auginamo per grafeną ant GaN/safyro ruošinio

kristalinės kokybės gerinimui modifikuojant auginimo parametrus skirtas įžvalgas.

Ištyrėme ant GaN ruošinio uždėtų pavienio grafeno ir skirtingai suformuotų kelių grafeno sluoksnių įtaką GaN sėklų formavimo ir koalescencijos procesams jų paviršiuje bei pilnai užauginto GaN sluoksnio kristalinei kokybei [2]. Grafeno pavienius sluoksnius bei skirtingai suformuotus dvigubus ir trigubus grafeno sluoksnius uždėjome ant GaN/safyro ruošinio naudodami drėgno perkėlimo metodą. Grafeno sluoksnių kokybę prieš ir po auginimo tyrėme Raman spektroskopijos metodu. Pavienio ir daugiasluoksnio grafeno įtaką GaN sėklų nukleacijai išanalizavome naudodami skenuojantį elektronų mikroskopą. Grafeno ir GaN epitaksinio sluoksnio sankirtos bei GaN sluoksnių struktūrinius tyrimus atlikome naudodami prašviečiantį elektronų mikroskopą ir Rentgeno spindulių difrakcijos sistemą, o sluoksnių paviršių tyrėme atominės jėgos mikroskopu. Pademonstravome sėkmingą GaN membranos eksfoliaciją.



1 pav. Nuotolinės epitaksijos būdu užauginto GaN sluoksnio per grafeną ant GaN ruošinio TEM nuotrauka. Intarpe pateikta GaN/grafenas/GaN sąlyčio zona.

Reikšminiai žodžiai: nuotolinė epitaksija, GaN, grafenas, MOCVD

Literatūra

- [1] K. Badokas, A. Kadys, J. Mickevičius, I. Ignatjev, M. Skapas, S. Stanionytė, E. Radiunas, G. Juška, T. Malinauskas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 54 205103 (2021).
- [2] K. Badokas, A. Kadys, D. Augulis, J. Mickevičius, I. Ignatjev, M. Skapas, B. Šebeka, G. Juška and T. Malinauskas, *Nanomaterials* 12, 785 (2022).

Nepusiausvirujų krūvininkų dinamika išsigimusiam N-poliškumo GaN

Non-equilibrium carrier dynamics in degenerate N-polar GaN

Kazimieras Nomeika, Lukas Šiaulys, Žydrūnas Podlipskas, Mantas Vaičiulis, Marek Kolenda, Arūnas Kadys, Saulius Nargelas, Gintautas Tamulaitis, Ramūnas Aleksejūnas
Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
kazimieras.nomeika@ff.vu.lt

GaN taikymas optoelektroniniuose prietaisuose yra plačiai paplitęs – jau daugiau nei 2 dešimtmečius turime šio junginio pagrindu gaminamus našius šviestukus (angl. *light emitting diode* – LED) bei lazerinius diodus. Šiandien GaN yra patrauklus dar ir tuo, jog yra vienas iš junginių, ateityje galinčių pakeisti Si didelės galios elektronikoje. Taip yra dėl gerokai didesnio draustinės juostos tarpo ir su tuo susijusiais privalumais: aukštesnėmis pramušimo įtampomis, spartesne veikla, mažesniais triukšmais, aukštesnėmis darbinėmis temperatūromis. Visgi pilnas šios medžiagos potencialas dar nėra žinomas. GaN įprastai yra auginamas *c* kryptimi ([0001]), tačiau pastaruoju metu vis daugiau dėmesio sulaukia auginimas priešinga kryptimi ([000 $\bar{1}$]). Tokiu būdu yra apgretinama vidinių poliarizacinių laukų kryptis, o tai gali atverti naujas galimybes elektrinių savybių tranzistoriuose pagerinimui, skylių injekcijos šviestukuose palengvinimui, kvantinio našumo fotokatoduose padidinimui. Negana to, apgretta auginimo kryptis reikalinga bangolaidžių sistemoms GaN pagrindu [1]. Deja, N-poliškumo medžiagos savybės nėra tiek ištyrinėtos, kiek įprastos, Ga-poliškumo medžiagos.

Šiame darbe dinaminį difraccinį gardelių (DDG) metodika mes tiriamo metalorganinio nusodinimo iš garų fazės būdu auginamus Ga- ir N-poliškumo GaN sluoksnius ir aiškinamės, kaip nuo žadinančiojo pluoštelio energijos tankio priklauso nepusiausvirujų krūvininkų difuzijos koeficiento ir gyvavimo trukmės vertės. Duomenis papildome laike integruotos fotoluminescencijos (LIFL) integruojančioje sferoje, katodoluminescencijos (KL) ir Holo matavimais. Galiausiai modifikuotu ABC modeliu aprašome nepusiausvirujų krūvininkų dinamiką. DDG matavimai atlikti su kompaktiška HARPIA-TG (Šviesos konversija) sistema, KL vaizdinimas atliktas hibridiniu katodoluminescencijos-skenuojančiu elektronų mikroskopu CHRONOS (Attolight).

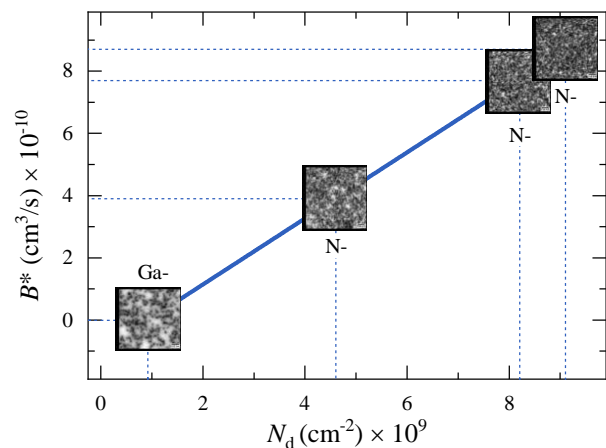
DDG matavimai atskleidžia daugiau nei 3 kartus mažesnes nepusiausvirujų krūvininkų difuzijos koeficiento ir 5-10 kartų trumpesnes gyvavimo trukmių vertes N-poliškumo sluoksniuose. Tuo tarpu KL žemėlapiai rodo nuo 5 iki 10 kartų išaugusius dislokacijų tankius N_d , kurie atvirkščiai koreliuoja su gyvavimo trukmėmis. Visa tai byloja apie prastesnę N-poliškumo darinių kokybę, tačiau, nepaisant to, juose mes fiksuojame daugiau nei eile didesnius LIFL vidinius kvantinius našumus, esant žemiems sužadinimo energijos tankiams.

Tam, kad nuodugniau išsiaiškintume matomų tendencijų priežastis, ABC modeliu aprašome nuo

nepusiausvirujų krūvininkų tankio priklausančias gyvavimo trukmių ir vidinio kvantinio našumo vertes. Toks viena laikis dviejų nepriklausomai išmatuojamų dydžių modeliavimas jau buvo sėkmingai pritaikytas InGaN LED dariniams [2]. Holo matavimai rodo, jog tamsinių elektronų tankis n_0 yra dviem eilėmis didesnis N-poliškumo sluoksniuose ($\sim 4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), todėl ABC modelį atitinkamai modifikuojame prie fotosužadintų elektronų tankio n pridėję n_0 . Taip pat į lygtį įtraukiame nespindulinės kvadratinės rekombinacijos narį, kurio spartą aprašome taip:

$$R^* = B^*n(n + n_0). \quad (1)$$

Modeliavimo rezultatai atskleidžia, jog B^* koeficientas, kurį siejame su gaudyklių sąlygota Ožė-Meitner rekombinacija, tiesiškai koreliuoja su dislokacijų tankiu bei yra nereikšmingas atraminiam Ga-poliškumo sluoksnyje (pav. 1). Nepaisant to, N-poliškumo sluoksniuose spindulinės rekombinacijos koeficientas B yra eile didesnis, negu Ga-poliškumo, todėl nespinduliniai gaudyklių sąlygotos Ožė-Meitner rekombinacijos nuostoliai yra atsveriami. Tuo tarpu žemų sužadinimų srityje vykstančią santykinai našią emisiją lemia didelis tamsinių elektronų tankis.



1 pav. Nespindulinės kvadratinės rekombinacijos koeficiento B^* koreliacija su dislokacijų tankiu N_d . Duomenų taškai pažymėti atitinkamais KL žemėlapiais.

Reikšminiai žodžiai: GaN, katodoluminescencija, dinaminė difraccinė gardelė, rekombinacija.

Literatūra

- [1] M. Kolenda et al., J. Mater. Sci. **55**, 12008–12021 (2020).
[2] K. Nomeika et al., J. Mater. Chem. C **10**, 1735–1745 (2022).

Kiek dislokacijų galima sutalpinti InGaN junginyje neprarandant našumo?

How many dislocations an InGaN alloy can fit without losing efficiency?

Žydrūnas Podlipskas¹, Kazimieras Nomeika¹, Mariamija Nikitina¹ ir Ramūnas Aleksiejūnas¹

¹Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
zydrunas.podlipskas@ff.vu.lt

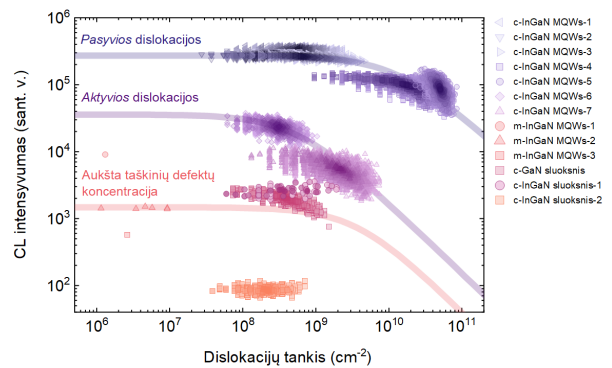
Norint įvertinti defektų įtaką InGaN junginių liuminescencijos našumui (angl. trumpinys IQE) įprastai yra pasitelkiami modeliniai bandinių rinkiniai su kruopščiai parinktais dislokacijų ar taškinių defektų tankiais. Siekdami to išvengti mes sukūrėme algoritmą, galintį atskleisti sąryšį tarp IQE ir defektų tankio pavieniuose niekuo neypatinguose bandiniuose, o ne koordinuotuose jų rinkiniuose. Papildomai, mes suradome būdą, leidžiantį apjungti pastarojo sąryšio duomenis su difuzija ribotos rekombinacijos (angl. trumpinys DLR) modeliu, ir gebantį atskirti dislokacijų ir taškinių defektų indėlius našumo krytyje bei nustatyti dislokacijų aktyvumo lygį nespindulinės rekombinacijos procese.

Algoritmo seka yra ši:

- (i) išmatuojama didelį bandinio plotą apimanti antrinių elektronų (angl. trumpinys SE) ir katodoliuminescencijos (angl. trumpinys CL) vaizdų pora;
- (ii) vienas iš vaizdų yra apdorojamas gausiniu-laplacianiniu briaunų atpažinimo filtru [1], padedančiu automatiškai identifikuoti dislokacijas;
- (iii) SE-CL vaizdai yra padalinami į tūkstančius skirtingo ploto sektorių, suteikiančių informaciją apie lokalų dislokacijų tankį ir jį atitinkantį lokalų CL intensyvumą;
- (iv) pasitelkus šiuos duomenis yra sukonstruojama bandiniui unikali CL intensyvumo priklausomybė nuo dislokacijų tankio;
- (v) dinamių difrakcinių gardelių ir fotoluminescencijos eksperimentais yra įvertinamos difuzijos koeficiento, krūvininkų gyvavimo trukmės ir IQE vertės;
- (vi) pasitelkus pastarąsias vertes bei *ABC* modelį [2] nustatomi *A_{SRH}*, *B* ir *C* rekombinacijos koeficientai, pritaikomi DLR modelyje;
- (vii) atsižvelgiant į IQE matavimus yra sukalibruojama CL intensyvumo priklausomybė nuo dislokacijų tankio ir atliekama modifikuoto DLR modelio [3] aproksimacija; ši turi tik vieną laisvai keičiamą parametą – *S*, aprašantį nespindulinėje rekombinacijoje dalyvaujančių dislokacijos būsenu dalį ($0 \div 1$), arba kitaip – dislokacijos *aktyvumo* lygį.

Šis algoritmas buvo panaudotas tiriant įvairios kilmės InGaN darinius: nuo *c* plokštumos sluoksnių iki *c* ar *m* plokštumos daugybinių kvantinių duobių struktūrų (angl. trumpinys MQWs). Algoritmas atskleidė visus InGaN bandinius esant itin skirtingais: kai kurie jų gali „pasigirti“ dislokacijų tankiu, viršijančiu $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ir

kartu – netikėtai aukštu IQE (juose $S = 0.05$, kas atspindi *pasivyias* dislokacijas); kiti bandiniai patiria staigų IQE krytį dislokacijų tankiui viršijus $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ (juose $S = 0.4$, tad dislokacijos – *aktyvios*), o dalis jų pasižymi itin aukšta taškinių defektų koncentracija ir kritiškai žemu IQE, nors dislokacijų tankis tesiekia $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$.



1 pav. Lokalaus CL intensyvumo priklausomybė nuo dislokacijų tankio įvairios kilmės InGaN dariniuose; išsinišėmis linijomis žymimos skirtingus atvejus atitinkančios DLR modelio aproksimacijos: *pasivyių* dislokacijų, *aktyvių* dislokacijų ar aukštos taškinių defektų koncentracijos įtaka IQE.

Reikšminiai žodžiai: InGaN, dislokacijos, katodoliuminescencija, rekombinacija, difuzija, dinaminės difrakcinės gardelės, skaitmeninis vaizdų apdorojimas.

Literatūra

- [1] https://scikit-image.org/docs/stable/api/skimimage.feature.html#skimage.feature.blob_log | aplankyta 2023-09.
- [2] Nomeika *et al.*, *J. Mater. Chem. C.*, **10**, 5, 1735 (2022).
- [3] Karpov and Makarov, *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 4721 (2002).

AlGa_N/Ga_N peteliškės tipo (BT) jutiklių tyrimas 300 K ir 80 K temperatūrose teraherciniame dažnių ruože

Investigation of AlGa_N/Ga_N bow-tie (BT) type detectors at 300 K and 80 K temperatures in the terahertz range

Justinas Jorudas¹, Irmantas Kašalynas¹

¹ Terahercinės fotonikos laboratorija, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
justinas.jorudas@ftmc.lt

Naujos kartos terahercų (THz) ruožo sistemoms reikalingi kompaktiški ir greitai jutikliai kurie veiktų kambario temperatūroje. Panaudojant AlGa_N/Ga_N didelio elektronų judrio tranzistorines (HEMT) heterostruktūras su dvimačių elektronų dujų sluoksniu (2DEG) kuriami įvairių tipų jutikliai THz ruožui: su THz antena integruoti lauko tranzistoriai (TeraFETs) [1], Šotkio barjero diodai [2], karštųjų elektronų mikrobolometrai [3].

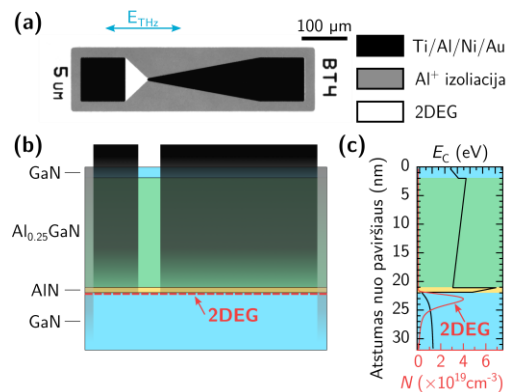
Šiame darbe tiriami peteliškės tipo (BT) THz jutikliai pagaminti iš komercinių AlGa_N/Ga_N heterostruktūrų. Heterostruktūros buvo užaugintos ant pusiau izoliuojančio SiC padėklo, kur 2DEG sluoksniu nuo paviršiaus nutolęs apie 21 nm. Energijų diagrama ir krūvininkų pasiskirstymas parodyti 1 pav. Atšaldžius heterostruktūrą krūvininkų judris silpnuose laukuose nuo 1800 cm²V⁻¹s⁻¹ vertės kambario temperatūroje padidėja iki 18000 cm²V⁻¹s⁻¹, kai temperatūra 80 K, dėl to, 2DEG sluoksniu varža nuo 340 Ω/kv. sumažėja iki 40 Ω/kv. Ominiai kontaktai su 2DEG sluoksniu formuojami iš Ti/Al/Ni/Au metalų, atkaitinant sluoksnius 30 s azoto dujų aplinkoje 830 °C temperatūroje. Optimizuotų ominių kontaktų specifinė varža siekia iki $\rho_c = 4 \cdot 10^{-6} \Omega \text{cm}^2$, kas plataus elektrodo atveju atitinka varžą iki 0,45 Ωmm. Maža kontaktinė varža svarbi vengiant stipraus kontaktų kaitimo, kai naudojami dideli srovės tankiai, net ir trumpų impulsų atveju [4]. Elektrinio izoliavimo sritis, suformuotas implantavus 700 keV energijos Al⁺ jonus iki 650 nm gylyje, vizualizavome UV FL mikroskopo pagalba.

Vieno iš pagamintų BT jutiklių nuotrauka parodyta 1 pav. BT jutiklis THz ruože veikia dėl nevienalyčio krūvininkų kaitimo susiaurintoje kakliuko srityje. Vidinis elektrinio lauko gradientas susidarantis dėl karštųjų elektronų pernašos priklauso nuo krūvininkų judrio bei susiaurintos srities geometrijos, kuri buvo varijuojama keičiant susiaurintos srities plotį nuo 500 nm iki 17 μm, tuo tarpu judris– keičiant temperatūrą.

Pagamintų jutiklių jautrio matavimai atlikti 300 K ir 80 K temperatūrose 150-600 GHz dažniuose naudojant kvazi-optinį stendą, kuriame THz jutiklis buvo apšviečiamas Gausiniu pluoštu, o atsakas registruojamas su sinchroniniu stiprintuvu. Siekiant įvertinti jutiklio jautrį, registruotas signalas buvo sunormuotas į visos krintančios spinduliuotės galią. Pasitelkus hemisferinį Si lęšį kontakte su BT jutikliu, jo atsakas sustiprinamas iki 100 kartų, kas leidžia pasiekti optinio jautrio vertes iki 5 V/W 300 K temperatūroje, be pridėtos išorinės įtampos [5]. Nustatyta, kad jutiklių atsakas tiesiogiai

proporcingas galiai bent 6 dekadų ruože, o atsako sparta yra palyginama su komercinių Šotkio barjero diodų ir yra sub-nanosekundžių trukmės.

BT jutiklio atsakas į THz bendruoju atveju susideda iš dviejų krūvininkų kaitimo komponentų - susiaurintame elektrode ir 2DEG kanale. Kai krūvininkų kaitimas elektrode nėra reikšmingas, lyginant su jų kaitimu 2DEG kanale, tuomet prie BT jutiklio pridėjus išorinę postūmio įtampą efektyviai registruojami THz. Pavyzdžiui pridėjus ±1 V išorinę postūmio įtampą, BT jutiklio optinis jautris pasiekia vertes iki 0,1 V/W. Tuo tarpu, atšaldžius jutiklį iki 80 K temperatūros, kai padidėja krūvininkų judris 2DEG kanale, jutiklio optinis jautris padidėja papildomai iki 30 kartų dėl išaugusio volt-amperinės charakteristikos netiesiškumo.



1 pav. (a) Pagaminto BT jutiklio UV FL nuotrauka, (b) naudojamos Al_{0.25}Ga_{0.75}N/AlN/GaN heterostruktūros viršutinių sluoksnių schema, (c) laidumo juostos diagrama su elektronų pasiskirstymu.

Reikšminiai žodžiai: peteliškės tipo THz jutikliai, terahercinės bangos, galio nitrido heterostruktūros, dvimatės elektronų dujos.

Dėkojame LMT, kuri finansavo T-HP projektą (01.2.2-LMT-K-718-03-0096)

Literatūra

- [1] E. Javadi *et al.*, *Sensors*, vol. 21, no. 9, p. 2909, Apr. 2021, doi: 10.3390/s21092909.
- [2] L. Yang *et al.*, *AIP Adv.*, vol. 10, no. 4, p. 045219, Apr. 2020, doi: 10.1063/5.0004470.
- [3] V. Mitin *et al.*, *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 486, p. 012028, Mar. 2014, doi: 10.1088/1742-6596/486/1/012028.
- [4] E. Šermukšnis *et al.*, *Appl. Sci.*, vol. 12, no. 21, p. 11079, Nov. 2022, doi: 10.3390/app122111079.
- [5] J. Jorudas *et al.*, *Lith. Phys. J.*, under preparation, 2023.

Analitiniai aukšto dažnio skleidimai kvantinėms sistemoms trikdromoms amplitudiškai moduluota periodine jėga panaudojant srauto lygtį

Analytical treatment of quantum systems driven by amplitude-modulated time-periodic force using flow equation approach

Viktor Novičenko¹, Egidijus Anisimovas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
viktor.novicenko@tfai.vu.lt

Pastaraisiais metais yra didelis susidomėjimas aukšto dažniu virpinamomis kvantinėmis sistemomis. Nere-tai eksperimente nėra galimybės staigiai užkelti virpini-mo amplitudę iki norimos vertės, todėl lėta (palyginus su aukštu dažniu) amplitudės dinamika turi būti įskaityta ieš-kant sistemos efektinę Hamiltonianą [1]. Įdomu tai, kad tam tikros formos Hamiltonianams lėta amplitudės dina-mika sukuria neabelinį vektorinį potencialą [1, 2] kuris gali būti panaudotas holonominėse kvantiniuose skaičia-vimuose [3, 4]

Matematiškai periodinės kvantinės sistemos su pa-pildoma lėta dinamika nagrinėjamos naudojant Floke teo-riją. Jei turime kvantinę sistemą aprašomą Šredingerio lygtimi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \hat{H}(\omega t, t) |\phi(t)\rangle \quad (1)$$

su periodiškai (pagal pirmą argumentą) nuo laiko priklaus-sančiu Hamiltonianu $\hat{H}(\omega t + 2\pi, t) = \hat{H}(\omega t, t)$ bei pa-pildoma lėta laikine priklausomybe ikoduota į antrą argu-mentą, tai tiesioginis būsenos vektoriaus $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ evoliucijos radimas dažniausiai yra labai sudėtingas uždavinys. Įvedus išplėstinę vektorinę erdvę $\mathcal{L} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$ [5] (čia \mathcal{T} yra kvadratiškai integruojamų periodinių funkcijų erdvė, o \mathcal{H} yra kvantinių būsenų Hilberto erdvė), uždavinys (1) susiveda į Šredingerio tipo lygties uždavinį

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle\rangle = \hat{\mathcal{K}}(t) |\psi(t)\rangle\rangle, \quad (2)$$

kur $|\psi\rangle\rangle \in \mathcal{L}$, o $\hat{\mathcal{K}}(t)$ yra lėtai nuo laiko (nebeliko grei-tų osciliacijų) priklausantis išplėstinės erdvės Hamiltonia-nas. Operatorius $\hat{\mathcal{K}}(t)$ yra begalinės dimensijos matrica, kurios koeficientai yra operatoriai veikiantys \mathcal{H} erdvėje. Vektorinės erdvės \mathcal{T} bazinius vektorius $\varphi_n(\theta) = e^{in\theta}$ pa-žymėjus $|n\rangle$, išplėstinės erdvės Hamiltonianas turi tokį pa-vidalą

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{K}}(t) = & \sum_{n=-\infty}^{+\infty} n\hbar\omega \mathbf{1}_{\mathcal{H}} \otimes |n\rangle \langle n| \\ & + \sum_{m,n=-\infty}^{+\infty} \hat{H}^{(m)}(t) \otimes |n+m\rangle \langle n|. \end{aligned} \quad (3)$$

Čia $\hat{H}^{(m)}(t)$ yra originalaus Hamiltoniano $\hat{H}(\omega t, t)$ Furje skleidimo pagal pirmą argumentą komponentės.

Šredingerio lygtį išplėstinėje erdvėje (2) dažniausiai tiksliai išspręsti nepavyksta, todėl yra naudojami pertur-bacijos metodai. Jei pavyktų rasti unitarinį operatorių

$\hat{\mathcal{D}}(t)$ kuris paverstų operatorių $\hat{\mathcal{K}}(t)$ į blok-diagonalią for-mą

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{K}}_D(t) = & \hat{\mathcal{D}}^\dagger \hat{\mathcal{K}} \hat{\mathcal{D}} - i\hbar \hat{\mathcal{D}}^\dagger \frac{d\hat{\mathcal{D}}}{dt} \\ = & \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(n\hbar\omega \mathbf{1}_{\mathcal{H}} + \hat{H}_{\text{eff}}(t) \right) \otimes |n\rangle \langle n|, \end{aligned} \quad (4)$$

tai operatorius $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$ aprašytų efektinę būsenos dinami-ką suvidurkintą per periodines osciliacijas. Tačiau tiks-liai tiek $\hat{\mathcal{D}}(t)$ tiek $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$ rasti retai kada galima, todėl šie operatoriai dažniausiai ieškomi kaip skleidiniai ω^{-1} laipsniais.

Blok-diagonalizavimo uždavinys panašus į statinės ermitinės matricos diagonalizavimo uždavinį, o šie užda-viniai turi įvairių gerai žinomų sprendimo metodų. Vie-nas iš tokių metodų yra sraudo lygčių panaudojimas [6]. Panašiai kaip straipsnyje [7], mes adaptavome srauto lygtis kurios tolygiai blok-diagonalizuoja išplėstinės erdvės Hamiltonianą $\hat{\mathcal{K}}(t)$ ir gali būti sprendžiamos perturbaty-viai skleidžiant operatorius $\hat{\mathcal{D}}(t)$ ir $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$ atvirkštinio dažnio laipsniais. Priešingai negu straipsnyje [7], mūsų pasiūlytas sraudo generatorius [8] srautui bėgant neužpil-do aukštų Furje harmonikų ($\hat{H}^{(m)}(s, t) = \mathbf{0}_{\mathcal{H}}$ visiems $|m| > m_0$) jei tik sraudo pradžioje tos harmonikos buvo lygios nuliui ($\hat{H}^{(m)}(s = 0, t) = \mathbf{0}_{\mathcal{H}}$). O šį savybę lei-džia spresti srauto lygtis (nes jų yra baigtinis kiekis, t.y. $2m_0 + 1$) automatiškai su simbolinės algebros paketu, to-kiu kaip *Mathematica* arba *Maple*. Tokių būdų galima au-tomatizuoti efektinio Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$ skleidinio ra-dimą iki norimos eilės.

Reikšminiai žodžiai: Floke teorija kvantinėms sistemoms, aukšto dažnio skleidimai, srauto lygtis

Literatūra

- [1] V. Novičenko, E. Anisimovas ir G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A **95**, 023615 (2017)
- [2] V. Novičenko, ir G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A **100**, 012127 (2019)
- [3] Z. Chen, J. D. Murphree ir N. P. Bigelow, Phys. Rev. A **101**, 013606 (2020)
- [4] L. W. Cooke, A. Tashchilina, M. Protter, J. Lindon, T. Ooi, F. Marsigliio, J. Maciejko ir L. LeBlanc, arXiv:2307.12957 (2023)
- [5] H. Sambe, Phys. Rev. A **7**, 2204 (1973)
- [6] F. Wegner, Ann. Phys.(Leipzig) **506**, 77 (1994)
- [7] A. Verdeny, A. Mielke ir F. Mintert, Phys. Rev. Lett. **111**, 175301 (2013)
- [8] V. Novičenko, G. Žlabys ir E. Anisimovas, Phys. Rev. A **105**, 012203 (2022)

Sukinių suspaustos būsenos ultrašaltųjų fermionų dujose

Spin-squeezed states with ultracold fermions

Mažena Mackoīt-Sinkevičienė¹, Tanausu Hernandez Yanes², Marcin Płodzień³, Giedrius Žlabys⁴, Domantas Burba¹, Emilia Witkowska², Gediminas Juzeliūnas¹

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Lithuania

²Institute of Physics Polish Academy of Science, Warsaw, Poland,

³ICFO - Barcelona Institute of Science and Technology, Spain,

⁴Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University, Japan

mazena.mackoit-sinkeviciene@ff.vu.lt

Generation, storage, and utilisation of correlated many-body quantum states are crucial objectives of future quantum technologies and metrology. Such states can be generated by the spin-squeezing protocols. Systems composed of ultra-cold fermions in optical lattices have attracted a lot of attention currently in the context of the generation of such non-classical states.

In particular, in our recent work [1, 2], we have shown that in a lattice of strongly interacting ultra-cold fermionic atoms involving two internal states, it is possible to generate non-classical correlations when adding position-dependent atom-light coupling. The Fermi-Hubbard model describing the system under periodic boundary conditions (PBC) can be cast onto an isotropic spin-1/2 Heisenberg chain in a deep Mott regime, while the atom-light coupling can be considered as a position-dependent spin-flipping.

To generate spin squeezing the Ramsey-type spectroscopy scheme is considered, as illustrated in Fig. 1. As soon as the atoms are put in a coherent superposition of two internal states by an electromagnetic pulse, an additional weak atom-laser coupling is turned on. This coupling activates the general mechanism in PBC case: it induces excitation of a pair of spin waves with opposite quasi-momentum. These spin waves extend over the entire system allowing individual atoms to interact *effectively* and establish non-trivial quantum correlations. When the desired level of spin squeezing is established, the spin-flip coupling is turned off, but the quantum correlations survive and are stored deeply in the Mott insulating phase. We showed that the isotropic Heisenberg spin-1/2 chain with the weak position-dependent spin-flip coupling generates spin-squeezing dynamics given by the one-axis twisting model. Furthermore, we numerically observed that open boundary conditions (OBC) change the spin squeezing dynamics.

We provide a detailed analytical and numerical analysis of the impact of PBC and OBC on the spin squeezing dynamics in Heisenberg spin chains. For OBC the coupling leads to the excitation of a superposition of spin waves with different energies and amplitudes rather than a pair of spin waves with opposite quasi-momentum, as it is the case for PBC. This still allows individual atoms to correlate and generate squeezing.

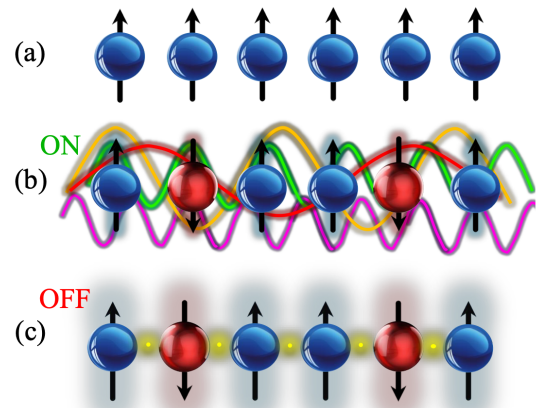


Fig. 1 pav. Illustration of the Ramsey-type spectroscopy scheme. (a) Preparation of the initial spin coherent state. (b) The excitation of spin waves states (different color lines) by the spin-flip coupling serves as an intermediate state to induce *effective* interaction and establish correlations between elementary spins. (c) Turning off the coupling freezes the dynamics, and the spin-squeezed states are stored in the Mott insulating phase. Panels (b) and (c) illustrate an example of a configuration of spins. Yet, the resulting state during and at the end of evolution is a superposition of various possible configurations including the initial one presented in (a).

The results obtained can be used in the current state-of-the-art experiments with ultra-cold atoms in optical lattices and tweezer arrays.

Keywords: optical lattices, cold atoms, quantum technologies, spin squeezing.

References

- [1] T. Hernandez Yanes, M. Płodzień, M. Mackoīt-Sinkevičienė, G. Žlabys, G. Juzeliūnas, E. Witkowska, Phys. Rev. Lett. **129**, 090403 (2022).
- [2] T. Hernandez Yanes, G. Žlabys, M. Płodzień, D. Burba, M. Mackoīt-Sinkevičienė, E. Witkowska, G. Juzeliūnas, Phys. Rev. B **108**, 104301 (2023).

Project is funded by the European Social Fund, project code No. 09.3.3-LMT-K-712-23-0035, the Grant is administered by the Lithuanian Research Council, 2021–2023.

Sąryšiai tarp laukų bazių pernormavimo procedūroje

Relations between basis sets of fields in the renormalization procedure

Simonas Draukšas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius
simonas.drauksas@ff.vu.lt

Daugeliu atvejų pernormavimo procedūra yra gerai suprasta ir pristatoma kone visuose moderniuose kvantinio lauko teorijos vadovėliuose. Tačiau egzistuoja ir kontekstų, kuriuose dar nėra vieningo sutarimo dėl pernormavimo pritaikymo. Vienas iš tokių kontekstų yra modeliai, kuriuose dalelės gali tarpusavyje maišytis, tad kyla klausimas dėl maišymosi kampų ar matricų pernormavimo. Šis klausimas nėra vienareikšmiškai atsakytas bei yra siūloma galybė skirtingų pernormavimo metodų. Tokia situacija išties nėra tenkinanti, kadangi net Standartiniame dalelių fizikos Modelyje maišosi kvarkai, o jų maišymasis parametrizuojamas Cabbibo-Kobayashi-Maskawa matrica. Taip pat žinoma, kad maišosi ir neutrinai. Prie viso to maišymasis praktiškai neišvengiamas ir modeliuose, kuriuose išplečiamas Standartinio Modelio skaliarinis sektorius, todėl svarbu išspręsti maišymosi matricų pernormavimo klausimą.

Kalbant kiek plačiau, galima išskirti dvi kryptis orientuotas į priklausomybę nuo pasirinktos laukų bazės arba į nepriklausomybę. Didžioji dauguma siūlomų pernormavimo būdų, kai yra pernormuojamos maišymosi matricos, patenka būtent į pirmąją kryptį. Kita vertus, medžio lygmens analizėse labiau yra paplitę į nepriklausomybę nuo bazės orientuoti metodai. Pavyzdžiui, stengiamasi rasti ir suformuoti bazės invariantus, kuriais natūraliai gali būti išreikšti matuojami dydžiai [1]. Tad ne tik egzistuoja daugybė pernormavimo metodų, bet taip pat yra ir įtampa tarp idėjų taikomų medžio lygmenyje lyginant su idėjomis taikomomis pataisų skaičiavimui bei pernormavimui.

Savo darbe [2] nagrinėjome maišymosi matricų pernormavimą būtent priklausomybės nuo bazės kontekste. Iš esmės, pačios maišymosi matricos yra nuo bazės priklausomi dydžiai, todėl visada galima pasirinkti bazę, kurioje jos visai nepasirodo, todėl automatiškai nereikalingas ir jų pernormavimas. Pernormavus visą teoriją galima pasirinkti patogią bazę, kurioje maišymosi bazės pasirodo, tačiau atsvaros nariai joms ir toliau nereikalingi. Tai galima suprasti keletu būdų. Iš vienos pusės, maišymosi matricos įprastai suprantamos kaip tokios, kurios parenką bazę, kurioje masės matricos yra diagonalios. Toks apibrėžimas maišymosi matricas paverčia išvestiniais ir nuo bazės priklausomais dydžiais. Iš kitos pusės, nėra sudėtinga rasti, jog yra išsigimimas tarp lauko pernormavimo (antisimetrinės dalies) ir maišymosi matricos atsvaros nario, tad maišymosi matricos pernormavimas tampa visiškai nebereikalingu.

Svarbu pastebėti, kad kyla ne tik conceptualios problemos, tačiau ir praktinės. Pavyzdžiui, maišymosi matricos atsvaros nario išsigimimas su nefizikiniu lauko

pernormavimu nurodo, jog maišymosi matricos atsvaros nariai natūraliai yra susiję su priklausomybe nuo kalibruotės, nors būtent nepriklausomybė nuo kalibruotės yra vienas iš reikalavimų [3] maišymosi matricų pernormavimui. Panašiai galima parodyti, jog išsigimusių masių riboje maišymosi matricų atsvaros nariai yra natūraliai diverguoja ir to išvengti yra sudėtinga.

Pagrindinė mūsų darbo išvada ta, jog trivialūs maišymosi matricų nariai atitinka kryptį orientuotą į nepriklausomybę nuo bazės, trivialiai tenkina visus reikalavimus keliamus maišymosi matricų pernormavimui, bei apeina praktines problemas, todėl naujos pernormavimo schemas turėtų būti apibrėžiamos atsižvelgiant į šį trivialumą. Ankstesniame darbe [4] jau esame apibrėžę tokią schemą fermionams.

Reikšminiai žodžiai: bazė, maišymosi matricos, pernormavimas

Literatūra

- [1] Howard E. Haber and Deva O'Neil, Phys. Rev. D **74**, 015018 (2006)
- [2] Draukšas, S., arXiv:2307.01642 (2023)
- [3] Denner, A., Dittmaier, S. and Lang, JN., *J. High Energ. Phys.* **2018**, 104 (2018)
- [4] Draukšas, S., *Eur. Phys. J. Plus* **138**, 671 (2023)

Netiesioginiai parametrai, kai $m_W \neq m_Z \cos \theta$, medžio lygmeny

Oblique corrections when $m_W \neq m_Z \cos \theta$, at tree level

Simonas Draukšas¹, Vytautas Dūdėnas¹, Luis Lavoura²

¹ Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius

² Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, A. Goštauto g. 12, 01108 Vilnius

vytautas.dudenas@tfai.vu.lt

Standartinis Modelis yra kol kas sėkmingiausias dalelių fizikos modelis, tenkinantis daugybę eksperimentinių testų. Šie testai yra surinkti apžvalginuose „dalelių duomenų grupės“ straipsniuose [1]. Esminė standartinio modelio savybė yra elektrosilpnio sektoriaus parametrų surišimai, išplaukiantys iš Higgs'o mechanizmo. Šio sektoriaus stebimieji yra ypač tiksliai matuojami, ieškant bet kokių nuokrypių nuo Standartinio Modelio prognozių. Jeigu atsirastų kokių reikšmingesnių nukrypimų šiuose stebimuosiuose parametruose, tokiuose, kaip Z bozono skilimo plotis, W bozono masė, efektyvusis Weinberg'o kampas ir t.t., tai automatiškai reikštų, kad tam parametrui įtakos turi kažkokia neatrasta fizika už standartinio modelio ribų.

Iki šiol, visi elektrosilpnio sektoriaus testai duodavo trivialų atsakymą (jokių naujos fizikos ženklų), bet 2022 metų naujai atlikta CDF kolaboracijos analizė paskelbė W bozono masę esant net 7 standartiniais nuokrypiais besiskiriančią nuo Standartinio modelio prognozės [2]. Šis rezultatas iki šiol yra kontroversiškas ir jį žiūrima atsargiai (pvz.: 2022 metų dalelių duomenų grupės apžvalga [1] jo neįtraukia į bendrą pasaulinį vidurkį). Nepaisant to, jeigu jis pasirodytų teisingas, šis rezultatas aiškiai nurodo į fiziką už Standartinio modelio ribų ir yra verta aptarti kokia ta fizika galėtų būti.

Patogus būdas parametrizuoti fiziką už Standartinio modelio ribų yra Peskin ir Takeuchi įvesti „netiesioginiai“ parametrai S, T ir U [3], parametrizuojantys galimą naujų sunkių dalelių įtaką, vėliau papildyti dar trimis X, W ir V [4], kurie parametrizuoja efektus, kuriuos gali sukelti nežinomos lengvos dalelės. Pagrindinė šios parametrizacijos nauda yra tai, kad daugiau nei 20 elektrosilpnio sektoriaus stebimų parametrų galimų nuokrypių nuo Standartinio modelio verčių yra aprašomi tiesinėmis lygtimis, priklausančiomis nuo 3 arba 6 parametrų (priklausomai nuo to, ar priimama prielaida, kad yra tik sunkių dalelių įtaka, ar ir lengvų). Vadinasi, patikrinti, ar modelis už standartinio modelio ribų tenkina išmatuotus elektrosilpnio sektoriaus parametrus, užtenka paskaičiuoti šiuos netiesioginius parametrus.

Šis patogumas yra galimas kelių prielaidų sąskaita. Pirma prielaida, yra ta, kad už Standartinio modelio ribų fizika turi turėti tas pačias kalibruotines simetrijas, t.y. ji neturi jokių naujų, mums nežinomų sąveikų. Antra prielaida remiasi į, vadinamą, „apsauginę simetriją“, kuri, nuliniame perturbacinės eilutės artinyje (medžio lygmenyje), lemia sąryšį:

$$m_W = m_Z \cos \theta, \quad (1)$$

kur m_W , m_Z ir θ yra W bozono masė, Z bozono masė ir Weinberg'o kampas. Antroji prielaida, jeigu pasitvirtins CDF kolaboracijos rezultatas, nebeatrodo taip įtikinamai, ir yra verta peržiūrėjimo, tačiau ją panaikinus, netiesioginių parametrų formalizmas, išvestas [3], nebegalioja.

Peržiūrint lygties (1) galiojimą, mes galime sugrupuoti 3 atskirus atvejus galimai parametrizacijai [5] :

1. SM prognozės yra lyginamos su kažkokio kito modelio prognoze, kuriame galioja (1) lygtis;
2. kai yra lyginamos prognozės dviejų modelių, kur abiemis negalioja (1) lygtis;
3. SM prognozės yra lyginamos su kito modelio prognoze, kuriam negalioja (1) lygtis.

Pirmasis atvejis yra gerai žinomas ir aprašytas [3], o kiti du atvejai iki šiol nebuvo tirti. Pasirodo, kad antruoju atveju galima išvesti analogiškas lygtis kaip ir pirmuoju atveju ir naudoti netiesioginius parametrus, panaudojant išmatuotą m_W vertę kaip įvesties parametras, o ne kaip prognozę. Šį atvejį mes ir pristatome [5]. Trečiasis atvejis vis dar lieka neišspręstas.

Reikšminiai žodžiai: Netiesioginiai parametrai, Standartinio Modelio patikrinimai, Elektrosilpnasis sektorius, apsauginė simetrija

Literatūros sąrašas

- [1] Particle Data Group, “Review of Particle Physics,” *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, vol. 2022, p. 083C01, Aug. 2022.
- [2] CDF Collaboration†‡, “High-precision measurement of the W boson mass with the CDF II detector,” *Science*, vol. 376, pp. 170–176, Apr. 2022.
- [3] M. E. Peskin and T. Takeuchi, “Estimation of Oblique Electroweak Corrections,” *Physical Review D*, vol. 46, pp. 381–409, July 1992.
- [4] C. Burgess, S. Godfrey, H. König, D. London, and I. Maksymyk, “A Global Fit to Extended Oblique Parameters,” *Physics Letters B*, vol. 326, pp. 276–281, May 1994.
- [5] S. Draukšas, V. Dūdėnas, and L. Lavoura, “Oblique corrections when $m_W \neq m_Z \cos \theta_W$ at tree level,” 5 2023.

X-fotonė lazerinė 3D nanolitografija

X-photon laser 3D nanolithography

Edvinas Skliutas¹, Danielius Samsonas^{1,2}, Arūnas Čiburys¹, Lukas Kontenis², Darius Gailevičius¹, Jonas Berzinš², Donatas Narbutis³, Vytautas Jukna¹, Mikas Vengris¹, Saulius Juodkazis^{4,5}, Mangirdas Malinauskas¹

¹Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius, Saulėtekio al. 10, LT-10223, Lietuva

²Light Conversion, Keramikų g. 2B, LT-10233, Vilnius, Lietuva

³Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lietuva

⁴Optical Sciences Centre and ARC Training Centre in Surface Engineering for Advanced Materials (SEAM), School of Science, Swinburne University of Technology, Melbourne, Australia

⁵WRH Program International Research Frontiers Initiative (IRFI) Tokyo Institute of Technology, Nagatsuta-cho, Midori-ku, Yokohama, Japan

mangirdas.malinauskas@ff.vu.lt

Daugiafotonės fotopolimerizacijos (*ang.* Multi-Photon Lithography – MPL) mechanizmai buvo tiriami derinamo bangos ilgio femtosekundiniu lazeriu. Pavyko nustatyti, kad galima naudoti bet kurią spektro spalvą nuo 500 iki 1200 nm su fiksuota 100 fs impulso trukme. Tai atskleidžia kur kas sudėtingesnę šviesos-medžiagos fotofizikinių mechanizmų sąveiką nei tik dvifotonė fotopolimerizacija. Atliekant tyrimą buvo įvertintas efektyvus sugerties laipsnis, t. y. X-fotonų sugertis, taip pat optimalios ekspozicijos sąlygos fotojautrintam ir grynai SZ2080TM pirmtake.

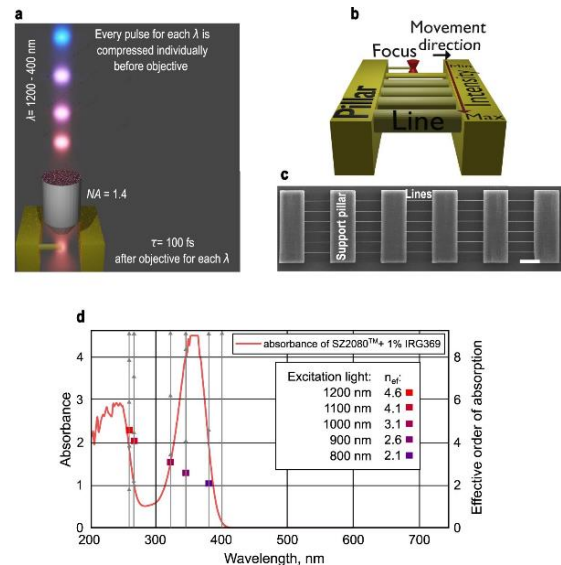
Nustatyta, jog bangos ilgio variacija labai veikia dinaminę gamybos langą (*ang.* Dynamic Fabrication Window – DFW), o optimaliomis sąlygomis siekė iki 10 kartų padidėjimą. Be to, buvo pastebėtas netrivialus energijos įvedimas X-fotonų sugerties metu, kuris pasireiškė stiprių erdviųjų taškinių darinių – *vokselių*, skersiniu matmenų padidėjimu žadinant ilgesniais bangos ilgiais ir pateikiamas galimas to priežastingumo paaiškinimas. Toks vokselio išilginių-skersinių matmenų santykio ir, atitinkamai, fotopolimerizuoto tūrio valdymas gali padidinti lazerinio 3D spausdinimo efektyvumą.

Apibendrinant, stebėti rezultatai rodo, kad bangos ilgis yra svarbus laisvės laipsnis pritaikyti MPL procesą praktikoje. O optimizuotas konkrečiai medžiagai naudingas plėtimasis taikymo srityse, tokios kaip mikrooptika, nanofotoniniai įrenginiai, metamedžiagos ir audinių inžinerija.

Reikšminiai žodžiai: femtosekundiniai impulsai, daugiafotonė litografija, lazerinis 3D spausdinimas, nanotechnologija, fotopolimerizacija, vokselis.

Literatūra

- [1] E. Skliutas, D. Samsonas, A. Čiburys, L. Kontenis, D. Gailevičius, J. Berzinš, D. Narbutis, V. Jukna, M. Vengris, S. Juodkazis, M. Malinauskas, X-photon laser direct write 3D nanolithography, *Virt. Phys. Prototyp.* **18**(1), e2228324 (2023); DOI: 10.1080/17452759.2023.2228324.



1 pav. Raiškos tiltų lazerinis 3D spausdinimas ir suformuotų linijų analizė. (a) derinamo bangos ilgio 100 fs impulsų, fokusuojamų NA = 1,4 imersiniu objektyvu sklaidimo iliustracija. b) Raiškos tiltų formavimo metodo iliustracija. Pakabinamos vieno vokselio pločio linijos fotopolimerizuojamos tarp atraminių sienų, kiekvienoje eilutėje parenkamas skirtingas šviesos intensyvumas; (c) viso suformuoto objekto vaizdas skenavimo elektronų mikroskopu. Mastelis – 20 μm ; (d) Schema, vaizduojanti apskaičiuotą efektyvųjų sugerties netiesiškumą n_{ef} naudojamai žadinimo šviesai ir jų išdėstymas pagal išmatuotus fotojautrinto SZ2080TM sugerties spektrus. Pilkos vertikalios rodyklės vaizduoja fotonų skaičių perėjimui iš pagrindinės į sužadintą būseną.

Plačiajuostės terahercų dažnio spinduliuotės generavimas oro plazmoje, indukuotoje kompaktiško Yb:KGW lazerio impulsais

Generation of broadband terahertz radiation in air plasma induced by compact Yb:KGW laser pulses

G. Balčas, D. Buožius, V. Tamulienė ir V. Vaičaitis
 Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT 10223 Vilnius
Virgilijus.Vaicaitis@ff.vu.lt

Terahercų (THz) dažnio spinduliuotės generavimas fokusuotais femtosekundiniais lazerio impulsais sukurtose oro plazmoje šiuo metu yra vienas iš perspektyviausių metodų, leidžiančių lengvai gauti labai plataus spektro (iki 100 THz) ir santykinai didelės energijos ($>1 \mu\text{J}$) impulsus, pasižyminčius itin aukštu ($>1 \text{MV/cm}$) elektrinio lauko stipriu [1]. Šie THz dažnio spinduliuotės parametrai ją leidžia naudoti ne tik laikinės skyros ar netiesinei spektroskopijai, bet ir valdyti įvairių medžiagų fazinius virsmus ar net chemines reakcijas [2, 3]. Pagrindinis šio metodo trūkumas yra tai, jog efektyviai plačiajuosčių THz dažnio impulsų generacijai reikia naudoti kuo trumpesnius femtosekundinius kaupinimo impulsus, todėl dažniausiai šiems tikslams naudojami 30-40 fs trukmės impulsus generuojantys didelių matmenų Ti:Safyro lazeriai. Iš kitos pusės, Yb:KGW lazeriai yra gerokai pigesni ir kompaktiškesni, tačiau generuoja ilgesnius 150-200 fs trukmės impulsus. Remiantis šiuo metu esančiais teoriniais modeliais tokios trukmės lazerio impulsais kuriamoje oro plazmoje THz dažnio spinduliuotės generavimo efektyvumas turėtų būti labai žemas, tačiau mūsų eksperimentai parodė, jog naudojant Yb:KGW lazerio impulsus galima gauti panašų ar net didesnį, nei gaunamas, naudojant gerokai trumpesnius Ti:Safyro lazerio impulsus, generacijos efektyvumą.

Eksperimentų metu oro plazmos kūrimui ir THz dažnio spinduliuotės generavimui vienu metu buvo naudojamos ir pirmoji ir antroji femtosekundinio Yb:KGW lazerio „Pharos“ (Light conversion Ltd) harmonikos (atitinkamai PH ir AH), fokusuotos 10 arba 15 cm židinio nuotolio veidrodėliais. Maksimali lazerio galia buvo 6W, o bangos ilgis ir pluošto diametras – atitinkamai 1030 nm ir 2 mm ($1/e^2$ lygyje). Lazerio impulsų trukmė buvo apie 190 fs (pusės aukštyje), o jų pasikartojimo dažnį buvo galima derinti tarp 1 ir 200 kHz. Maksimali generuojamų PH impulsų energija buvo 1 mJ, bet ji atitinkamai mažėjo, didinant impulsų pasikartojimo dažnį. Antroji lazerio harmonika buvo generuojama įvairaus storio netiesiniuose BBO kristaluose, o energinės ir spektrinės generuojamų THz impulsų savybės buvo analizuojamos, atitinkamai naudojant itin jautrų kalibruotą piroelektrinį kompanijos "Spectrum detector Inc" radiometrą ir laboratorijoje surinktą Maikelsono (Michelson) interferometrą.

Eksperimento metu gauta maksimali THz dažnio spinduliuotės galia siekė $21.4 \mu\text{W}$ (1 lentelė), kas atitinka maždaug 0.4×10^{-5} energijos keitimo efektyvumą, t. y., labai panašų į gaunamą, naudojant gerokai didesnį

gabaritų Ti:Safyro lazerius.

1 lentelė. Generuojamos THz dažnio spinduliuotės galios priklausomybė nuo fokusuojančių veidrodėlių židinio nuotolio ir BBO kristalo storio (lazerio galia ir pasikartojimo dažnis atitinkamai buvo 6 W ir 6 kHz).

Kristalo storis	0.5 mm	1.5 mm	2 mm
Židinio nuotolis			
10 cm	12.8 μW	11 μW	8.5 μW
15 cm	21.4 μW	11.3 μW	9.4 μW

Tolesnė generuojamų THz dažnio impulsų analizė parodė, jog jų spektras apima sritį tarp 0,1 ir 40 THz, ir taip pat yra palyginamas su spektru, gaunamu, naudojant Ti:Safyro lazerius. Kaip parodė ankstesni mūsų eksperimentai, tokius plačiajuosčius impulsus galima naudoti lazeriu sukurtos oro plazmos charakterizavimui, t. y., tiesiogiai matuoti jonizuotų dalelių (elektronų) erdvinius skirstinius, temperatūrą, gesimo konstantas ir kitus parametrus [4].

Skaitmeninis modeliavimas, įskaitantis šviesos pluoštų tiesinį bei netiesinį sklaidimą (difrakciją, dispersinį plitimą, trečios eilės netiesiškumą, saviveiką, nuostolius oro plazmoje ir pan.) ir netiesinę oro jonizaciją, parodė, jog sklaidimo metu žadinimo impulsai patiria erdvines-laikines modifikacijas, dėl kurių susiformuoja daug trumpesni šviesos impulsai ar jų fragmentai. Taigi, nors pradiniai lazerio impulsai yra gana ilgi, THz dažnio spinduliuotės generaciją indukuoja modifikuoti ir gerokai trumpesni, nei pradiniai, PH ir AH impulsai, o tai lemia ir platų generuojamų impulsų spektrą, ir santykinai didelį generacijos efektyvumą.

Taigi, šiame darbe yra demonstruojama, jog naudojant Yb:KGW lazerio impulsus galima efektyviai generuoti plačiajuostę THz dažnio spinduliuotę. Kadangi šie prietaisai yra gerokai pigesni ir kompaktiškesni nei paprastai tokiems tikslams naudojami Ti:Safyro lazeriai, tikimės, jog šio tyrimo rezultatai paspartins kompaktiškų didelės galios koherentinių THz dažnio šaltinių kūrimą ir vystymą.

Reikšminiai žodžiai: femtosekundiniai lazerio impulsai, oras, terahercų dažnis, plazma.

Literatūra

- [1] T. I. Oh et al, New J. Phys. **15**, 075002 (2013).
- [2] P. Salén et al, Physics Reports, **836–837**, 1-74, (2019).
- [3] J. L. LaRue et al, Phys. Rev. Lett. **115**, 036103, (2015).
- [4] V. Vaičaitis et al, Phys. Rev. E **107**, 015201 (2023).

Superkontinuumo generacija safyre naudojant femtosekundinių lazerinių impulsų voras

Supercontinuum generation in sapphire with burst femtosecond laser pulses

Balys Momgaudis¹, Vaida Marčiulionytė¹, Vytautas Jukna¹, Gintaras Tamošauskas¹, Martynas Barkauskas², Audrius Dubietis²

¹Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10223, Vilnius

²Šviesos konversija, Keramikų g. 10223, Vilnius

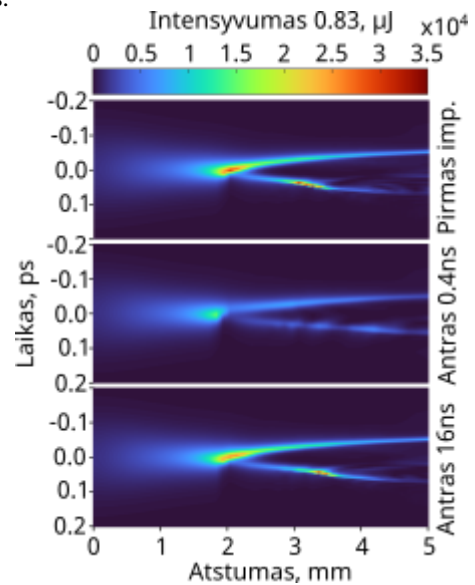
Balys.Momgaudis@ff.vu.lt

Pastaruoju metu, dėl plataus pritaikymo[1,2], daug dėmesio skiriama didelį (MHz-GHz) pasikartojimo dažnį ar impulsų voras galinčių generuoti lazerių kūrimui ir tobulinimui. Norint išlaikyti tokių lazerių lankstumą, kuris, bangos ilgių diapazono atžvilgiu, ateina dėl galimybės taikyti netiesinio optinio parametrinio stiprinimo procesus, kuriam yra būtina rasti didelio dažnio plataus spektro šaltinius. Šio fenomeno pritaikymui dažniausiai naudojama baltos šviesos superkontinuumo generacija[3]. Vis dėlto, didėjant impulsų pasikartojimo dažniui kinta medžiagos atsakas ir pasidaro vis sunkiau užtikrinti gerai atsikartojanti, plataus spektro ir stabilų ilgame laikiniame intervale impulsą. Šiame pranešime bus aptarti baltos šviesos kontinuumo eksperimentinės generacijos klasikinėje terpėje, safyre, naudojant didelio pasikartojimo dažnio impulsų voras niuansai. Eksperimentiniams rezultatams paaiškinti taip pat bus pasitelkta skaitmeninio modeliavimo, paremtų netiesinių šviesos sklaidimu medžiaga, metodai.

Eksperimentinė superkontinuumo generacija buvo gauta naudojant 1030 nm bangos ilgio šviesos impulsų voras, kurių vidinis pasikartojimo dažnis buvo 62.5 GHz ir 2.5 MHz. Tokių parametru žadinanti spinduliuotė buvo gauta naudojant sustiprintą 1 MHz Yb:KGW lazerio impulsinį pluoštą. Plataus spektro kontinuumas buvo generuojama naudojant 1-10 impulsų voras, kuriuose vieno impulso trukmė siekė 190 fs ties puse intensyvumo maksimumo. Eksperimentų rezultatai atskleidė, jog didėjant pasikartojimo dažniui impulsų voroje superkontinuumo generacijos slenkstis pradeda augti, o ilgalaikis stabilumas mažėja.

Eksperimentiniai rezultatai buvo atkartoti skaitmeninio modeliavimo metodais[4] kaip parodyta 1, pav. Teorinis modelis buvo paremtas dviejų impulsų sklaidimu per tą patį optinės terpės tūrį su valdomu laiko intervalu tarp impulsų. Modelyje buvo įskaityti šviesos difrakcija ir dispersija, netiesinė fazės savimoduliacija bei optinis Kero efektas. Medžiagos pokyčiai buvo įskaičiuoti atsižvelgiant į laisvųjų elektronų plazmos generacija dėl daugiafotoninės bei griutinės jonizacijos. Be šių jonizacijos procesų taip pat buvo įtrauktas ir indėlis į laisvųjų elektronų tankį dėl medžiagoje egzistuojančių taškinių F defektų, kurie dar vadinami deguonies vakancijomis ir bi-vakancijomis. Energijos relaksacija buvo įvertinta atsižvelgus į eksitoninių būsėnų formavimąsi, defektų lygmenų užpildą bei terminį ir slėginį energijos persiskirstymą. Skaitmeniniu modelių pavyko paaiškinti superkontinuumo energijos

slenksčio augimo priežastis, kurių pagrindą sudaro likutinio medžiagos sužadavimo keičiama šviesos sugertis.



1.pav. Impulso intensyvumo laikinės gauptinės priklausomybė nuo kristalo ilgio. Skirtumai tarp pirmo impulso ir antro naudojant skirtingus vėlinimus tarp impulsų.

Reikšminiai žodžiai: Netiesinė optika, superkontinuumas, skaitmeninis modeliavimas, didelių pasikartojimo dažniai, femtosekundės.

[1] D. J. Förster, B. Jäggi, A. Michalowski, & B. Neuenschwander, Review on experimental and theoretical investigations of ultra-short pulsed laser ablation of metals with burst pulses. *Materials* **14**, 3331 (2021).

[2] D. Esser, S. Rezaei, J. Li, P. R. Herman & J. Gottmann, Time dynamics of burst-train filamentation assisted femtosecond laser machining in glasses. *Opt. express* **19**, 25632–25642 (2011).

[3] A. Dubietis, G. Tamošauskas, R. Šuminas, V. Jukna & A. Couairon, Ultrafast supercontinuum generation in bulk condensed media (invited review). arXiv preprint arXiv:1706.04356 (2017).

[4] V. Jukna, N. Garejev, G. Tamošauskas, & A. Dubietis, Role of external focusing geometry in supercontinuum generation in bulk solid-state media. *JOSA B*, **36**(2), A54-A60. (2019).

Suminio dažnio generacijos spektroskopijos metodų palyginimas

Comparison of sum frequency generation spectroscopy methods

Julius Lukošius¹, Robertas Kananvičius¹, Regimantas Januškevičius¹, Rokas Danilevičius¹, Andrejus Michailovas¹

¹UAB Ekspla, Savanorių pr. 237, LT-02300 Vilnius
j.lukosiunas@ekspla.com

Virpesinė spektroskopija suteikia išsamią informaciją apie molekulių sandarą bei tarpusavio sąveiką. Tradicinė infraraudonoji ir Ramano spektroskopijos metodikos plačiai naudojamos molekulių analizei tūryje. Vėliau atrasta vibracinė suminio dažnio generacijos (SDG) spektroskopija [1] turi keletą privalumų palyginus su tradiciniais metodais analizuojant molekulinį lygmenį paviršių sandūroje – didesnis paviršių jautrumas, vibracinių lygmenų specifiškumas bei galimybė išgauti išsamią informaciją apie molekulių struktūrą ir orientaciją įvairių medžiagų paviršiuje. Kadangi tai yra antros eilės netiesinis procesas, jam galioja griežta atrankos taisyklė – tik terpė be inversijos simetrijos gali sugeneruoti suminio dažnio signalą. Daugumoje atvejų įvairios tūrinės medžiagos (pvz. vanduo) turi šią simetriją, todėl tūryje SDG nevyksta. Tačiau, SDG vyksta paviršiuje, kur inversijos simetrija yra sugriauta pagal apibrėžimą. Šis specifiškumas kartu su monoslouksniniu jautrumu pateikia SDG spektroskopiją kaip nepakeičiamą įrankį in-situ tyrimams skysčių paviršiuose ar įvairių terpių sandūroje.

Yra kelių tipų SDG spektrometrai: siaurajuosčiai, skenuojantys spektrą pataškiui, plačiajuosčiai, naudojantys plačiajuosčius femtosekundinius vid-IR impulsus ir siaurajuosčius matomosios srities impulsus. Įprastose siaurajuostėse pikosekundinėse sistemose vienas spindulys yra fiksuoto aukštesnio dažnio (ω_{VIS}), dažnai matomoje srityje, o kitas yra derinamas vidurio infraraudonoje srityje (ω_{IR}). Derinimo sritis nusako SDG spektrometro virpesinės spektroskopijos sritį, o spektrinę skyrą riboja fiksuoto bangos ilgio ω_{VIS} spinduliuotės spektrinės juostos plotis. Signalas sugeneruojamas matomoje srityje ($\omega_{SDG} > \omega_{VIS}$) ir registruojamas skenuojant vid-IR srities bangos ilgį pataškiui. Registravimui naudojamas fotodaugintuvas kartu su monochromatoriumi, kuris nufiltruoja pašalinę šviesą. Norint išgauti pakankamą SDG signalo lygį, reikalinga didelės energijos vid-IR spinduliuotė, todėl bandinys gali būti modifikuotas ar pažeistas.

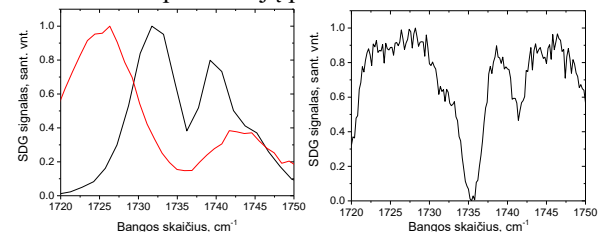
Plačiajuostės SDG sistemos leidžia intensyviai femtosekundiniu impulsu efektyviai sugeneruoti suminio dažnio signalą. Mažos energijos vid-IR impulsai nepažeidžia ir mažai pakeičia biologinius bei vandeninius bandinius. Plačiajuostis spektrometras užtikrina greitą SDG spektro užregistravimą, kadangi dauguma vibracinių lygmenų yra sužadunami plačiajuosčiu impulsu be skenavimo. Matomam kanalui suformuoti naudojami spektriniai filtrai, kurie iš plataus femtosekundinio impulso iškerpa siaurą dalį spektro, kuri dažnu atveju yra platesnė nei pikosekundinio lazerio

impulso spektras. Suminio dažnio generacijos signalas registruojamas monochromatoriaus ir CCD kameros pagalba, o spektrinę skyrą nusako matomo kanalo spektrinės juostos plotis ir registravimo įrangos skyra.

Plačiajuostėse hibridinėse SDG sistemose naudojama plačiajuostė vid-IR ir siaurajuostė matomo kanalo spinduliuotė [2]. Ši kombinacija leidžia išgauti tiek plataus spektro, tiek aukštos skyros SDG signalą. Tokia sistema gali būti realizuota panaudojant tą patį užkrato šaltinį dviem optiškai sinchronizuotiems kanalams – femtosekundiniam plataus ir pikosekundiniam siauro spektrų. Matavimo metu galima papildomai keisti vid-IR spektrą ir išplėsti matavimo sritį, taip panaudojant siaurajuosčių ir plačiajuosčių sistemų privalumus.

Taigi, mokslininkų tarpe naudojamų tradicinių siaurajuosčių ir plačiajuosčių suminio dažnio sistemų privalumai gali būti apjungti į hibridinę sistemą, leidžiančią greitai užregistruoti plataus spektro signalą su aukšta skyra.

Pranešime pristatysime eksperimentinį palyginimą SDG spektrometrų, veikiančių visuose paminėtuose režimuose ir aptarsime jų privalumus ir trūkumus.



1 pav. Monooleino spektrinė juosta ties 1740cm^{-1} su vandens sugerties linija. Kairėje – vandens sugerties linija pamatuota su plačiajuosčiu SDG spektrometru. Matavimo spektrinė skyra gauta 3 cm^{-1} matomam kanalui formuoti naudojant pikosekundinį lazerį (juoda kreivė) ir 8 cm^{-1} , naudojant spektrinį filtravimą (raudona kreivė), matavimų trukmė 30 sek.; dešinėje – linijos plotis išmatuotas su 3 cm^{-1} skyra, naudojant pikosekundinį skenuojantį SDG spektrometrą, matavimo trukmė 5 min.

Reikšminiai žodžiai: suminio dažnio generacija, virpesinė spektroskopija

Literatūra

- [1] X. D. Zhu, H. Suhr, and Y. R. Shen, "Surface vibrational spectroscopy by infrared-visible sum frequency generation," *Phys. Rev. B* **35**(6), 3047–3050 (1987)
- [2] K. Madeikis, et al., "Hybrid high spectral resolution broadband mid-infrared SFG spectrometer development and demonstration", *Optics Express* **29**, 25344-25357 (2021)

Anglis ir azotas: raktai į žvaigždžių evoliuciją

Carbon and nitrogen: keys to stellar evolution

Renata Minkevičiūtė¹, Arnas Drazdauskas¹, Gražina Tautvaišienė¹, Nadege Lagarde², Barkha Bale¹

¹Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, Université Bordeaux, CNRS, B18N, Allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France

renata.minkeviciute@tfai.vu.lt

Tiek mūsų Galaktikos, tiek žvaigždžių evoliucijos tyrinėjimai yra sudėtingas procesas. Cheminė žvaigždžių sudėtis gali atskleisti jų susidarymo galaktikoje vietas ypatybes ir, kas yra taip pat svarbiau – žvaigždžių viduje vykstančius procesus. Tyrinėdami žvaigždės cheminę sudėtį mes galime pažvelgti tik į jos atmosferą, tačiau ji nėra izoliuota nuo likusių žvaigždės sluoksnių, ir bėgant laikui stebimi tam tikrų cheminių elementų gausų pokyčiai.

Yra žinoma, kad Saulės tipo žvaigždei tampant raudonąja milžine jos viduje išsiplečia konvekcinius sluoksnius, apjungiantis vidinius ir išorinius sluoksnius. Tokiu būdu žvaigždės gyvavimo metu šerdyje susintetinti elementai gali būti perkelti į jos išorinius sluoksnius. Dar visai neseniai buvo manoma, kad raudonųjų milžinių stadijoje toks procesas įvyksta vieną kartą. Tačiau stebėjimų duomenys rodo, kad yra papildomi procesai, iškeliantys cheminius elementus iš giluminių žvaigždės sluoksnių į paviršių.

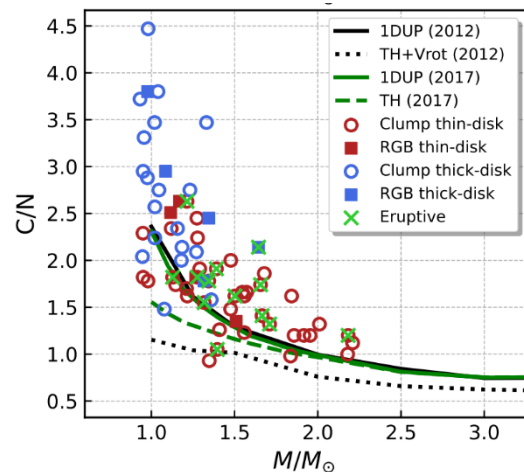
Anglis ir azotas yra pagrindiniai elementai, kurie gali atskleisti žvaigždžių maišymosi procesų paslaptis. Šie elementai šerdyje dalyvauja CNO reakcijose, kurių metu vienas elementas tampa kitu (pavyzdžiui ^{12}C elemento mažėja, o ^{14}N – daugėja). Šie pokyčiai raudonųjų milžinių sekoje pasireiškia pakintančia fotosferos sudėtimi, ir tai priklauso nuo žvaigždės masės ir metalingumo – maišymosi efektai stipresni mažos masės nemetalingose žvaigždėse.

Šiame darbe naudojami duomenys, gauti Šiaurės optiniu teleskopu (Nordic Optical Telescope), esančiu La Palmos saloje. Užregistruoti aukštos skiriamosios gebos ($R=46000$) viso matomojo diapazono žvaigždžių spektrai leidžia tiksliai įvertinti žvaigždžių parametrus bei anglies ir azoto gausas žvaigždžių atmosferose. Tirtos žvaigždės pasirinktos iš Keplerio kosminės misijos stebėjimų lauko, kad būtų galima nustatyti tiksliai žvaigždžių mases.

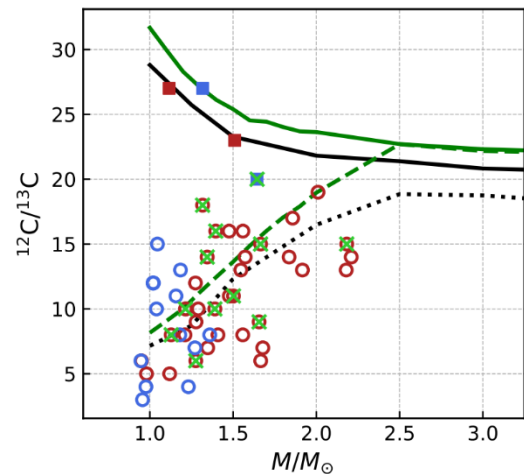
1 paveiksle pavaizduota anglies ir azoto santykio žvaigždės paviršiuje priklausomybė nuo žvaigždės masės. Paveiksle taip pat atvaizduoti dveji teoriniai modeliai iš [1] ir [2]: 1DUP – jei aktyvus tik minėtas vienintelis maišymosi epizodas, TH – jei vyksta papildomas termohalinis maišymasis, prasidedantis ties raudonosios milžinių sekos (RGB) šviesio mazgu, ir TH+Vrot – jei aktyvūs papildomi termohalinis ir sukimosi sukeltas maišymaisi. 2 paveiksle, vaizduojančiame anglies izotopų santykio priklausomybę nuo masės šie modeliai išsiskiria labiau.

Anglies izotopų santykių rezultatai patvirtina, kad klasikinis modelis yra nepakankamas aprašyti žvaigždžių,

esančių virš RGB šviesio mazgo (apskritimai) rezultatų. Reikalingi termohalinio maišymosi ar net ir sukimosi sukelti procesai. C/N rezultatams pagrįsti sukimosi sukeltas maišymasis įtakos neturi. Masės išsiveržimai (arba akrecija) žvaigždėse reikšmingai $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ir C/N santykių nekeičia.



1 pav. Anglies ir azoto santykio priklausomybė nuo žvaigždės masės



2 pav. Anglies izotopų santykio priklausomybė nuo žvaigždės masės

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių evoliucija, astrofizika, raudonųjų milžinių seka.

Literatūra

[1] N. Lagarde et al., A&A, 543, A108 (2012)

[2] C. Charbonnel et al., A&A, 605, A102 (2017)

Gravitacinis mikrolėšis – įrankis pastebėti nematomus objektus

Gravitational microlensing is a tool to observe invisible objects

Marius Maskoliūnas¹, Łukasz Wyrzykowski², E. Pakštienė¹, J. Zdanavičius¹, V. Čepas¹, R. Janulis¹, R. Adomavičienė¹, K. Šiškauskaitė¹, K. Howil², K. A. Rybicki², P. Zielinski², K. Kruszyńska², M. Jabłńska², P. J. Mikołajczyk², M. Gromadzki², N. Ihanec², M. Sitek², M. Ratajczak², U. Pylypenko²

¹Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas

Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

²Warsaw University Astronomical Observatory

Al. Ujazdowskie 4, 00-478 Warszawa, Poland

marius.maskoliunas@tfai.vu.lt

Iš žvaigždžių evoliucijos teorijos žinome, kad pačios mastviausios žvaigždės galiausiai virsta juodosiomis skylėmis (juodosiomis bedugnėmis), mažesnės masės – neutroninėmis žvaigždėmis ir jei evoliucijos pabaigoje likusi masė mažesnė už $1.33 M_{\odot}$, turime baltąją nykštukę (angl. White dwarf). Tai yra santykinai labai silpnos spinduliuotės, bet turintys masę mūsų galaktikos objektai ir tokių objektų turėtų būti labai daug. Problema ta, kad tokius objektus praktiškai sunku pastebėti net ir su pačiais galingiausiais teleskopais, negana to, dar reikia žinoti kur teleskopą nukreipus yra didesnė tikimybė objektą atrasti. Gravitacinis mikrolėšis yra fizikinis reiškinys kai tolimesnės žvaigždės šviesa yra sustiprinama prieš mus esančio nematomo objekto masės, kurią gali sukelti minėtos juodosios skylės, neutroninės žvaigždės, bet net ir baltosios nykštukės, kurių masės ženkliai mažesnės už Saulės. Vien tik juodųjų skylių, kurių masė lygi 5-15 Saulės masių, pagal Žvaigždžių evoliucijos teorija manoma, kad Paukščių Tako galaktikoje turi būti apie 20 milijonų [1].

Toks įvykis, kad nematomas objektas ir tolima ryški žvaigždė atsidurtu beveik tiksliai vienoje linijoje yra gana retas, todėl ir įvykį užfiksuoti nėra taip jau paprasta. Reikia pažymėti, kad mes stebime tolimos žvaigždės šviesą, o artimesnio kūno gravitacinis laukas ją sustiprina panašiai kaip lėšis. Dažniausiai gravitacinio mikrolėšio trukmė yra nuo kelių savaičių iki kelių mėnesių, bet kartais pasitaiko ir kelis metus trunkančio įvykio. Atrasti ir atpažinti mikrolėšį pakankamai sudėtingas uždavinys, bet laimei, astronomai šiai dienai plačiau naudoja įvairias dangaus apžvalgas, tame tarpe ir GAIA kosminio teleskopo. Nors GAIA sukurtas atlikti tikslius astrometrinius matavimus, mikrolėšių paieškai naudingas tuo, kad periodiškai skenuoja visą dangų ir užfiksuoja žvaigždės spindesio pakitimą laike. GAIA matavimai, priklausomai nuo objekto padėties danguje, dažniausiai yra 1 – 2 mėnesių intervalo, o tyrimams reikalingi vos ne kiekvienos nakties duomenys, todėl tęstiniuose stebėjimuose dalyvauja antžeminiai teleskopai išsidėstę po visą žemės rutulį. Be detalių tęstinių stebėjimų, kurie trunka nuo kelių mėnesių iki metų, Gaia stebėtus numanomus gravitacinių lėšių įvykius yra sudėtinga atskirti nuo eilinių žvaigždžių

šviesio pokyčių [2].

Gravitacinių lėšių Galaktikos diske tyrimai leidžia mums tirti nematomus objektus plačiame masių intervale. Lietuvos ir Lenkijos astrofizikai pasauliniu lygiu bendradarbiauja Paukščių tako Galaktikos disko gravitacinių mikrolėšių įvykių paieškose ir tyrimuose. Pagal Lietuvos mokslų tarybos (LMT) finansuojamą tarptautinį projektą *Lenkijos – Lietuvos juodųjų skylių paieška* (S-LL-19-2) 2019-2022 m. atlikome tęstinius mikrolėšių stebėjimus įvykiams *Gaia16aye* [3], *Gaia19bld* [4], *Gaia18cbf* [5], bendradarbiavimo rezultatai atspindi recenzuojamuose aukšto mokslinio indekso publikacijose, paskutinis įvykis *Gaia19dke* [6] įteiktas.

Reikšminiai žodžiai: Gravitacinis mikrolėšis, žvaigždės, juodosios skylės, baltosios nykštukės, neutroninės žvaigždės, astrofotometrija

Literatūra

- [1] Gould A. 2000, Measuring the Remnant Mass Function of the Galactic Bulge, *ApJ*, 535, 928
- [2] Wyrzykowski L., et al. 2016, Black hole, neutron star and white dwarf candidates from microlensing with OGLE-III, *MNRAS*, 458, 3012
- [2] Wyrzykowski, Ł.; Mróz, P.; Rybicki, K. A. and 182 more *Full orbital solution for the binary system in the northern Galactic disc microlensing event Gaia16aye* 2020A&A...633A..98W
- [3] Rybicki, K. A.; Wyrzykowski, Ł.; Bachelet, E. and 66 more. *Single-lens mass measurement in the high-magnification microlensing event Gaia19bld located in the Galactic disc* 2022A&A...657A..18R
- [4] Kruszyńska, K.; Wyrzykowski, Ł.; Rybicki, K. A. and 29 more. *Lens parameters for Gaia18cbf a long gravitational microlensing event in the Galactic plane* 2022A&A...662A..59K
- [5] Maskoliūnas, M.; Wyrzykowski, Ł.; Howil, K. and 74 more. *Lens mass estimate in the Galactic disk extreme parallax microlensing event Gaia19dke* 2023arXiv230903324M (Submitted to A&A)

Lengvųjų elementų santykių tyrimas žvaigždėse su planetomis

Probing the light element ratios in planet-host stars

Ashutosh Sharma¹, Edita Stonkutė¹, Arnas Drazdauskas¹, Renata Minkevičiūtė¹, Gražina Tautvaišienė¹, Šarūnas Mikolaitis¹

¹Vilnius University, Faculty of Physics, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio al. 3, Vilnius
ashutosh.sharma@ff.stud.vu.lt

Research on exoplanetary systems has become a leading area of study in modern astrophysics. Thanks to space missions like Kepler & Transiting Exoplanet Survey Satellite (TESS) and ground-based telescopes, over 5,500 exoplanets have been confirmed so far. A fundamental aspect of this research involves the study of chemical composition of the host stars as it can provide critical insights into the formation and characteristics of exoplanets.

Several studies have reported a correlation between the metallicity of stars and the presence of planets around them. It was found that stars with giant planets tend to have higher metallicity than those without planets [1]. An overabundance of alpha elements (e.g., Mg, Si, Ca, Ti) is also demonstrated in stars with planets [2]. Carbon and oxygen abundances and their ratios carbon-to-oxygen (C/O) & magnesium-to-silicon (Mg/Si) could also have a significant impact on exoplanets [3].

The aim of this work is to conduct a spectroscopic analysis of planets-host stars, focusing on determining the main atmospheric parameters (effective temperature T_{eff} , surface gravity $\log(g)$; microturbulence velocity v_t ; and metallicity [Fe/H]) and detailed chemical elemental abundances. In this conference, I will present my recent results on stellar chemical composition, in particular C/O and Mg/Si ratios and planet mass relation.

The targets were chosen from the confirmed exoplanet list by TESS available at NASA Exoplanet Archive. Observations were carried out with the 1.65-m telescope installed at Moletai Astronomical Observatory of Vilnius University in Moletai, Lithuania. The telescope is equipped with a high-resolution Vilnius University Echelle Spectrograph (VUES). Planetary parameters were also taken from NASA Exoplanet Archive. In this work, I have investigated 174 planets orbiting around 131 bright planet hosts. Most of the exoplanets investigated are Gas Giants followed by Neptune-like, Super Earths and Terrestrials (see Fig. 1).

The main atmospheric parameters were determined by the classical equivalent width approach using a combination of the DAOSPEC and MOOG codes the same way as the Vilnius node used in the Gaia-ESO Survey. To determine the precise chemical element abundances, we used the spectral synthesis method with the TURBOSPECTRUM code. The spectral analysis was done using a grid of MARCS stellar atmosphere models and the solar abundances. Atomic lines were selected from the Gaia-ESO line-list.

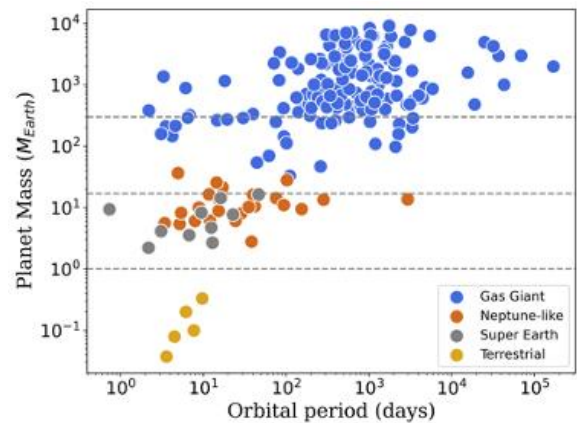


Fig 1. Mass and orbital period distribution of exoplanets.

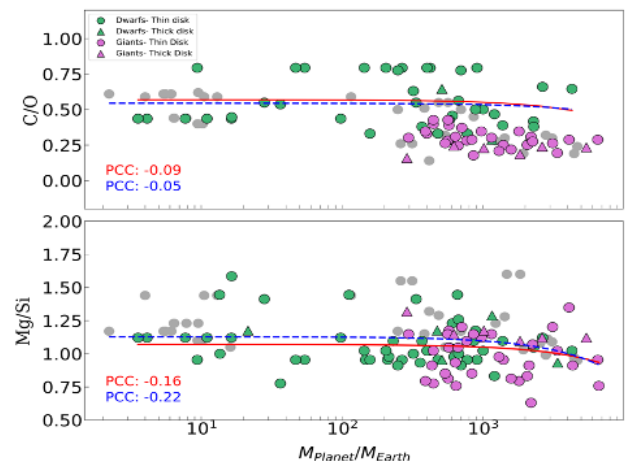


Fig 2. C/O and Mg/Si distributions in planet-hosts vs planetary masses. Green and pink dots represent dwarf and giant hosts from this work. A comparison sample of 25 planet-hosts (grey dots) were taken from [4].

In Fig. 2 we see a weak negative C/O slope for dwarf planet-hosts towards the stars hosting high-mass planets whereas for both dwarf & giant hosts, there is a negative Mg/Si slope towards the stars hosting high-mass planets.

Key words: High resolution spectroscopy; Chemical abundances; Planet-harboring stars; Exoplanets.

Literature

- [1] D. A. Fischer, and J. Valenti, *ApJ*, **622**, 1102 (2005).
- [2] V. Z. Adibekyan, N. C. Santos, et al., *A&A*, **543**, A89 (2012).
- [3] C. Bond, D. P. O'Brien, D. S. Lauretta, *ApJ*, **715**, 1050-1070 (2010).
- [4] G. Tautvaišienė, Š. Mikolaitis, et al., *ApJS*, **259**, 45 (2022).

Milky Way twins

L. S. Pilyugin^{1,2}, G. Tautvaišienė¹

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio av. 3, 10257, Vilnius, Lithuania

²Main Astronomical Observatory, National Academy of Sciences of Ukraine, 27 Akademika Zabolotnoho St, 03680, Kiev, Ukraine

pil620a@gmail.com, grazina.tautvaisiene@tfai.vu.lt

The position of the Milky Way (MW) in the context of the general galaxy population is an important question. Is the Milky Way a typical spiral galaxy, and if not, in what way(s) it differs? Milky Way-like galaxies are usually named as Milky Way analogues (MWA) [1]. There is no single and commonly accepted definition of a Milky Way analogue. Different characteristics of the MW can be used when comparing to other galaxies [1,2,3,4].

The characteristics of a galaxy can be conditionally divided into two types. The parameters of the first type (e.g., morphology, luminosity, stellar mass, rotation velocity) describe the structure and global characteristics of a galaxy at the present-day epoch and can be called as structural parameters. The oxygen abundance at a given radius is defined by the evolution of this region of a galaxy (fraction of gas converted into stars, i.e. astration level, and matter exchange with the surroundings). Then the oxygen abundance can be considered as an indicator of the galactic evolution and can be considered as the evolutionary parameter (the parameter of the second type). A galaxy located close to the MW in the field(s) of the first type of parameters can be referred as the structure analogue to the MW (sMWA). A galaxy located close to the MW in the field of the second type of parameters can be referred to as the evolutionary analogue to the MW (eMWA). If a galaxy is simultaneously both sMWA and eMWA then this galaxy can be considered as a twin of the MW.

In fact, the sMWAs were selected and examined in the previous papers [1,2,3,4]. The oxygen abundance at the optical radius of the Milky Way is appreciably lower in comparison to other galaxies of similar central oxygen abundance. This feature of the Milky Way evidences that its chemical evolution is not typical. Therefore it is highly useful to study the evolutionary analogs of the Milky Way. We search for and examine the galaxies which are simultaneously both, sMWAs and eMWAs. We analyse three structural parameters (the optical radius, stellar mass, and rotation velocity). The rotation curve is not available for some galaxies or the rotation velocity is measured with a large uncertainty (e.g. in face-on galaxies with low inclination angles). Therefore, the stellar mass – optical radius diagram has been used to select the sMWAs. The central abundance – abundance at the optical radius diagram serves to search for eMWAs. We compare the Milky Way with a sample of ~500 spiral galaxies for which radial abundance distributions,

optical radii, stellar masses, and rotation curves are derived by us or compiled from the literature. The obtained candidates to Milky Way twins are examined in more detail.

We found that the eMWAs are quite rare, while the sMWAs are more numerous. The majority of the evolutionary analogues of the Milky Way are not structural analogues. Either the optical radii of the eMWAs are significantly larger in comparison to the MW, or the eMWAs have appreciable lower values of stellar mass and rotation velocity than the Milky Way.

We found four galaxies (NGC 3521, NGC 4651, NGC 2903, and MaNGA galaxy M-8341-09101) being simultaneously both sMWA and eMWA, thus they can be considered as MW twins. The galaxy NGC 3521 can be the closest MW twin. All the characteristics considered (the stellar mass, optical radius, rotation velocity, central oxygen abundance, and abundance at the optical radius) of NGC 3521 are close to those for the Milky Way. The masses of black holes in those galaxies are also similar. However, in order to make a solid conclusion that the galaxy NGC 3521 is the closest twin to the Milky Way, a more accurate radial distribution of abundances in NGC 3521 should be established. Spectral investigations including all the emission lines necessary for reliable abundance determinations (through the R calibration) should be carried out. The distance to NGC 3521 and its optical radius should also be more precise.

Key words: Milky Way, spiral galaxies, fundamental parameters, abundances

References

- [1] G. de Vaucouleurs, W. D. Pence, *Astronomical Journal*, **83**, 1163 (1978)
- [2] F. Hammer, M. Puech, L. Chemin, H. Flores, M. D. Lehnert, *Astrophysical Journal*, **662**, 322 (2007)
- [3] T. C. Licquia, J. A. Newman, M. A. Bershadsky, *Astrophysical Journal*, **833**, 220 (2016)
- [4] N. Boardman, G. Zasowski, A. Seth, et al., *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, **491**, 3672 (2020)

Konvoliucinis neuroninis tinklas žvaigždžių spiečių aptikimui dangaus apžvalgose

Convolutional Neural Networks for Star Cluster Detection in Sky Surveys

Erikas Cicėnas^{1,2}, Karolis Daugevičius¹, Eimantas Kriščiūnas¹, Rima Stonkutė^{1,2}, Vladas Vansevičius¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

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

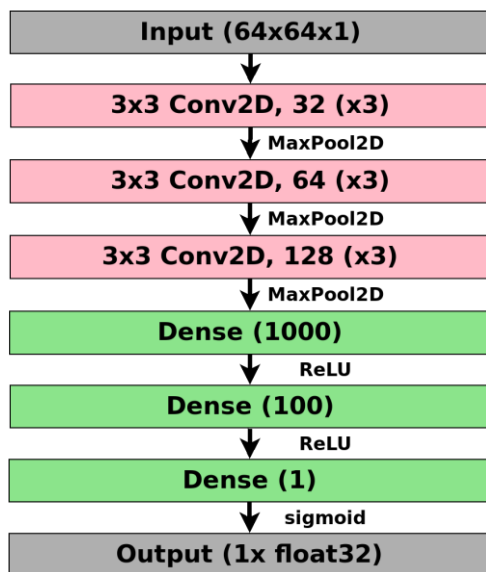
erikas.cicenas@ftmc.lt

Žvaigždžių spiečiai yra vieni svarbiausių objektų tiriant galaktikų dinaminę ir žvaigždėdaros istoriją, jų struktūrą, pradinės masių funkcijos variacijas bei kt. evoliucijos parametrus. Tačiau iki šiol neišspręsta automatinio spiečių aptikimo problema didelėse dangaus apžvalgose. Įprastai ieškoma „rankiniu būdu“ ir pasitelkiant savanorius „citizen science“ platformose [1, 2].

Mūsų tikslas yra sukurti patikimą spiečių aptikimo metodą galaktikų diskuose, naudojant prižiūrimo giliojo mokymosi ir konvoliucinių neuroninių tinklų (CNN) algoritmus. Metodas turi užtikrinti greitą ir kontroliuojamą bei duodantį atsikartojančius rezultatus spiečių aptikimą. Tyrimui naudojome *Panchromatic Hubble Andromeda Treasury* (PHAT) stebėjimų duomenis ir suskaičiavome 800000 stochastinių spiečių modelius, apimančius plačią parametų erdvę.

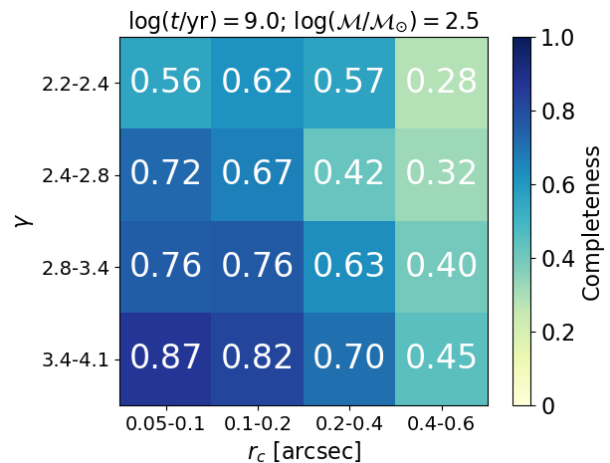
Šiame etape nagrinėjome tik vienos *Hubble Space Telescope* (HST) fotometrines juostas *F475W* nuotraukas. Ištreniravome apie 9 milijonų parametų CNN (1 pav.), kuris nustato, ar į 64x64 px langelį patenka spiečius. Šiuo langeliu skenuojame HST nuotrauką 16 px žingsniu XY plokštumoje.

CNN architektūrą sukūrėme remdamiesi ResNet [3] idėjomis. Tinklas buvo treniruotas su ~740000 spiečių modeliais 300 „epochų“, kiekvienoje naudojant 38400 pavyzdžius.



1 pav. CNN architektūra. Rausvi blokai – konvoliucinės grupės (nurodyti filtrų ir konvoliucinių sluoksnių grupė skaičiai); atliekama 2x2 MaxPool2D procedūra; žalsvi blokai žymi sujungtuosius sluoksnius.

Tinklo efektyvumą įvertinome dirbtinių spiečių testu. Ištyrėme kokius spiečius, suprojektuotus ant realaus Andromedos galaktikos disko, tinklas aptinka. Spiečių, kurių amžius ~1 mlrd. m., o masė ~300 M_{\odot} , aptikimo pilnumai parodyti 2 pav. Žmonės tokius spiečius atranda mažiau patikimai nei mūsų CNN. Matome, kad tinklas koncentruotus spiečius aptinka geriau nei padrikus. Taigi, jo architektūrą dar reikia optimizuoti padrikesnių spiečių paieškai.



2 pav. CNN dirbtinių spiečių aptikimo pilnumas, esant skirtingoms struktūrinių parametų (γ ir r_c) vėrtėms. Čia nagrinėti žmonių jau sunkiai aptinkami spiečiai – jų amžius ir masė nurodyti diagramos viršuje.

Pademonstravome, kad CNN yra tinkama priemonė patikimam spiečių aptikimui netgi tankiuose galaktikų diskuose. Pranešime aptarsime pagrindines šio ypatingai svarbaus ir iki šiol dar iki galo neišspręsto uždavinio problemas bei palyginsime CNN rezultatus su PHAT apžvalgoje žmonių interaktyviai aptiktų objektų katalogais [2]. Taip pat, aptarsime metodo taikymo galimybes *Euclid* kosminės observatorijos atliekamai dangaus apžvalgai.

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, konvoliucinis neuroninis tinklas (CNN).

Literatūra

- [1] G. Pérez ir kt., *ApJ*, **907**, 100 (2021).
 [2] L. C. Johnson ir kt., *ApJ*, **802**, 127 (2015).
 [3] K. He ir kt., arXiv:1512.03385 (2015).

Fosilinių galaktinių tėkmių evoliucija

The evolution of fossil galactic outflows

Kastytis Zubovas^{1,2}, Gediminas Maskeliūnas²

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Astronomijos observatorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

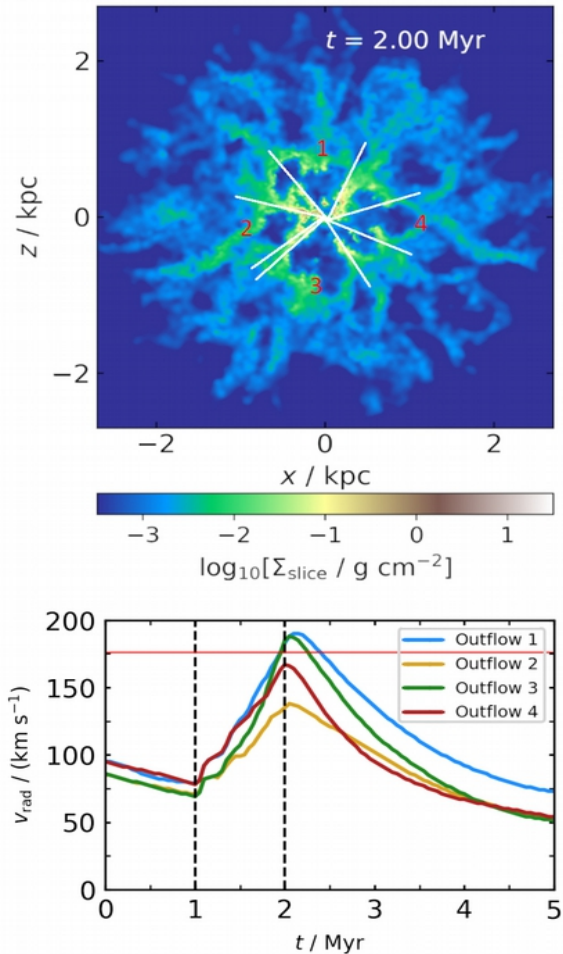
kastytis.zubovas@ftmc.lt

Daugelyje galaktikų randami masyvūs didelio masto dujų srautai, tolstantys nuo centro. Šios tėkmės, paleistos aktyvumo epizodų galaktikos centre metu, gali reikšmingai pakeisti visos galaktikos evoliuciją: sustabdyti ar paspartinti žvaigždėdarą, pernešti sunkiais elementais praturtintas dujas iš centro į galaktikos pakraščius. Tėkmių savybės koreliuoja su aktyvaus galaktikos branduolio šviesiu, tačiau matoma ir reikšminga sklaida aplink paprastus teorinius sąryšius. Vienas būdas paaiškinti sklaidą – branduolio šviesio variacijos 10-100 tūkst. m. laiko skalėmis ir daug lėtesnė tėkmės savybių reakcija į jas [1]. Pagal šį modelį tėkmė turėtų išlikti ilgą laiką ir po branduolio išsijungimo, t. y. turėtume matyti daug fosilinių tėkmių.

Naudodami skaitmeninį hidrodinaminį/N-kūnų kodą Gadget-3 [2], mes išnaginėjome galaktinių tėkmių evoliuciją po aktyvaus branduolio išsijungimo, esant skirtingoms dujų tankio galaktikoje, centrinės juodosios skylės masės ir aktyvumo epizodo šviesio vertėms. Visose modelio realizacijose naudojamos panašios pradinės sąlygos: sferiškas dujų kevalas, kuriam suteiktas turbulentiškas greičių laukas, atitinkantis realių galaktikų savybes. Po milijoną metų trunkančio relaksacijos periodo, per kurį susiformuoja turbulentiškas dujų tankio pasiskirstymas, prasideda 1 mln. m. aktyvumo epizodas. Tada branduolys išjungiamas ir nagrinėjama susidariusių tėkmių – greitai radialiai judančių dujų, formuojančių mažo tankio burbulus – evoliucija dar iki 8 mln. metų.

Daugumoje realizacijų aktyvumo epizodo metu susidaro vienas ar keli dujų burbulai. Kartais burbulai išlieka ir toliau plečiasi keletą milijonų metų po branduolio išsijungimo. Pagrindinis kriterijus fosilinėms tėkmėms formotis – aktyvaus branduolio šviesio santykis su Edingtono riba turi bent 7 kartus viršyti dujų tankio ir viso (dujų, žvaigždžių bei tamsiosios materijos) tankio santykį galaktikoje. Kokybinę burbulo evoliuciją gana patikimai prognozuoja jo dujų vidutinis radialinis greitis aktyvumo epizodo pabaigoje: jei greitis viršija reikalingą virializacijai galaktikos gravitaciniame potenciala, burbulas išlieka ir plečiasi laiko tarpą, palyginamą su aktyvumo epizodu (žr. iliustraciją). Lėtesni burbulai labai greitai sustoja ir išnyksta.

Tikėtina, kad fosilinių tėkmių Visatoje yra keletą kartų daugiau, nei tėkmių aktyviose galaktikose, tačiau jas sudėtinga aptikti ir identifikuoti kaip sukurtas branduolio aktyvumo. Identifikacijai gali pasitarnauti nustatytos esminės fosilinių tėkmių savybės: asimetrija galaktikos centro atžvilgiu, erdvinis atsiskyrimas nuo centro bei šaltų dujų dominavimas.



1 pav. *Viršuje*: modelio tankio žemėlapis aktyvumo epizodo pabaigoje su identifikuotais keturiais tėkmės burbulais; *apačioje*: burbulų vidutinio radialinio greičio kitimas; vertikalios punktyrinės linijos žymi aktyvumo epizodo pradžią ir pabaigą, horizontali raudona linija – virialinį greitį.

Reikšminiai žodžiai: galaktikos, aktyvios galaktikos, tarpžvaigždinė medžiaga, skaitmeninis modeliavimas.

Literatūra

- [1] K. Zubovas and E. Nardini, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc* **498**, 3633 (2020).
 [2] V. Springel, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc* **364**, 1105 (2005)

Pikselinei detektorių lustų prototipų, skirtų CMS II fazės atnaujinimui, kalibracijos tyrimas

Investigation of CMS Phase-II Pixel Detector Chip Calibration

Marijus Ambrozas¹

¹Vilniaus universiteto Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius
marijus.ambrozas@ff.stud.vu.lt

Kompaktiškojo Miuonų solenoido (angl. *Compact Muon Solenoid* – CMS) [1] eksperimentas ruošiasi II fazės atnaujinimui, kuris startuos kartu su CERN Didžiojo hadronų greitintuvo Didelio šviesio patobulinimu (angl. *High-Luminosity Large Hadron collider* – HL-LHC) [2]. Šiuo atnaujinimu siekiama padidinti retų fizikinių procesų aptikimo potencialą. Tai bus pasiekta padidinant vienalaikių protonų susidūrimų skaičių iki 4 kartų, lyginant su dabartinėmis greitintuvo galimybėmis. T.y., iki 200 vienalaikių protonų susidūrimų kas 25 ns.

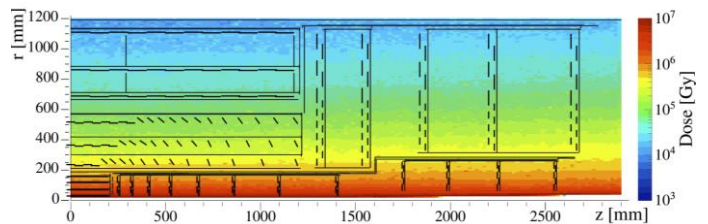
Atnaujintas CMS detektorius turės visiškai naują silicio trekų detektorių posistemę [3], skirtą veikti labai stiprios radiacijos sąlygomis – iki 1.2 Grad per 10 metų veikimo laikotarpį. Taip pat detektorius turės susitvarkyti su iki 4 kartų didesniu dalelių trekų skaičiumi negu dabar, taigi ir su padidėjusiu duomenų kiekiu. Naujam detektoriumi reikalinga geresnė erdvinė skyra, greitesnis duomenų perdavimas, lyginant su dabartiniu detektoriumi, bei precedentų neturintis atsparumas radiacijai.

CERN/RD53 kolektyvas yra atsakingas už atnaujinto CMS Vidinio Trekerio (angl. *Inner Tracker* – IT) pikselinių detektorių lustų kūrimą. Šiuo metu vyksta 2-osios kartos lusto prototipų RD53B CMS (taip pat dar vadinamų CROC_v1) [4] testavimai. Prie lustų prototipų tyrimo prisideda ir Lietuvos fizikai. Pranešime pateiksime naujausius lustų prototipų su sensoriais bandymų rezultatus. Daugiausia dėmesio skirsime lusto kalibravimo proceso optimizavimui realioms eksperimento sąlygoms ir naujausių kuriamos duomenų nuskaitymo (angl. *Data Acquisition* – DAQ) sistemos funkcijų išbandymui. Detektorių testavimui naudojama specialus CMS kolektyvo plėtojamas Ph2_ACF programinės įrangos paketas.

Pateiksime išsamią informaciją apie slenkstinės signalo registravimo įtampos ir signalo formos optimizavimą, bei įvairių duomenų nuskaitymo „trigerio“ opcijų, skirtų lusto bandymams, veikimą. Šiems tikslams naudojame tiek lusto vidinę kalibravimo elektrinę grandinę, tiek radioaktyvų monochromatinių rentgeno spindulių šaltinį.



1 pav. Testavimui naudota vienialustė korta su RD53B CMS lustu



2 pav. Planuojama jonizuojančios radiacijos dozė, teksianti II fazės CMS trekų detektoriumi [3].

Reikšminiai žodžiai: trekų detektorius, pikseliai, lustai, kalibravimas, trigeris.

Literatūra

- [1] CMS Collaboration, J. Instrum. 3 S080042008 (2008)
- [2] O. Aberle, I. Béjar Alonso, O. Brüning et al., [CERN-2020-010](#) (2020).
- [3] CMS Collaboration, [CMS-TDR-014](#) (2017).
- [4] RD53 Collaboration, CERN-RD53-PUB-19-001 (2019)

Mėlyno TADF-OLED ilgaamžiškumo didinimas panaudojant legiravimą iterbiu

Extending the operational lifetime of blue TADF-OLED through ytterbium doping

Karolis Kazlauskas¹, Dovydas Banevičius¹, Giedrius Puidokas¹, Gediminas Kreiza¹, Saulius Juršėnas¹, Edvinas Orentas²

¹Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

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

karolis.kazlauskas@ff.vu.lt

Organic light emitting diodes (OLEDs) are successfully employed in displays providing superior efficiency, contrast, and viewing angle. A remarkable advantage of OLED displays is that they can be made curved, flexible and transparent, thereby significantly expanding their scope of use. However, devices based on phosphorescent or the latest generation thermally activated delayed fluorescence (TADF) emitters suffer from stability issues in the blue range, and thus far are not exploited commercially. The deterioration of these devices, especially noticeable at elevated current densities, is largely due to the presence of long-lived triplet species. Balanced charge carrier transport and broad carrier recombination zone are essential for reducing triplet exciton concentration and suppressing triplet-mediated annihilation processes, which affect the performance and stability of blue-emitting TADF-OLEDs [2]. Doping of organic layers is among the most effective methods to control these features. The doping of electron transport layer (ETL) with metals was demonstrated to be a promising option to facilitate electron injection, transport and improve charge balance [3]. While the case of lithium doping has been well-researched, ytterbium (Yb) doping has received less attention. The existing data is limited to electron injection characteristics, which are favored by the low work function of Yb (2.6 eV) [4].

Herein, the impact of Yb doping of ETL on the blue TADF-OLED performance, and particularly the lifetime, was thoroughly assessed. To this end, a series of OLEDs containing TmPyPB (as ETL) doped at different Yb ratios ranging from 0 to 30 wt% were fabricated and studied (Fig. 1). It was found that the Yb-induced changes in the current density, which also affect device EQE, efficiency roll-off and luminance, result solely from alterations in electron current. The Yb-doping concentrations of 10 wt% or below was shown to reduce current density due to the electron trapping, whereas the higher doping levels indicated Yb-facilitated electron transport.

Most importantly, introduction of Yb extended blue-emitting device lifetime by 2 orders of magnitude compared to the undoped device, so that LT50 of the doped devices reached almost 800 and 50 hours at the luminance of 10^2 and 10^3 cd/m², respectively. The enhanced device stability was attributed to Yb-assisted triplet exciton quenching, which occurred as a result of the recombination zone being in close proximity to the

EML/ETL interface. The reduced triplet density in turn suppressed harmful triplet-mediated annihilation in EML and prolonged device lifetime, however, at the cost of somewhat deteriorated device efficiency.

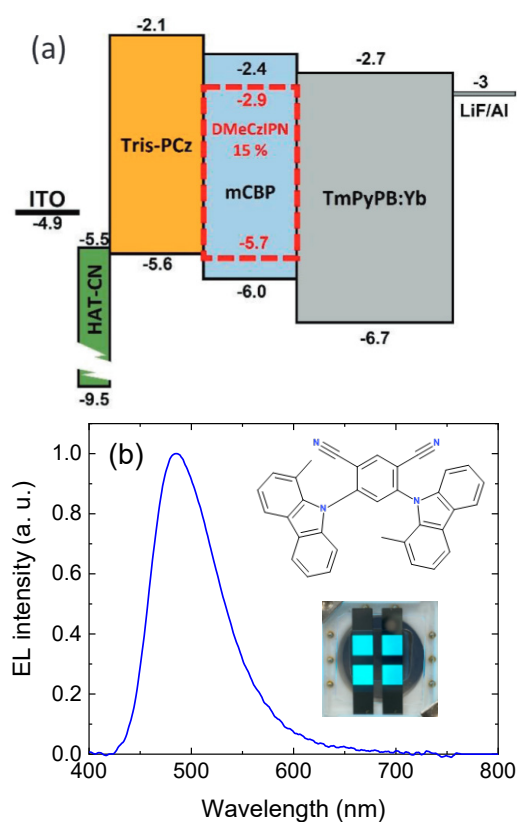


Fig. 1. (a) Schematic representation of TADF-OLED structure; (b) device EL spectrum with the chemical structure of employed blue TADF emitter DMeCzIPN and the picture of Yb-doped OLED device shown in the inset.

Keywords: blue OLED, TADF, device lifetime, ytterbium doping.

References

- [1] Z. Xu, B.Z. Tang, Y. Wang, D. Ma, *J. Mater. Chem. C* **8**, 2614–2642 (2020).
- [2] H. Nakanotani, K. Masui, J. Nishide, T. Shibata, C. Adachi, *Sci. Rep.* **3**, 2127 (2013).
- [3] S.H. Choi, S.J. Lee, K.Y. Lee, H.S. Yang, K. Han, K.H. Kim, S.D. Kim, H.D. Bae, Y.H. Tak, *Jpn. J. Appl. Phys.* **48**, 062101 (2009).
- [4] H. Lee, H. Ahn, C. Lee, J. Kwak, *J. Korean Phys. Soc.* **61**, 1536–1540 (2012).

1/f triukšmas elementariuose (ne)persiklojančių stačiakampių impulsų modeliuose

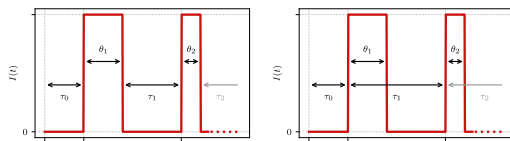
1/f noise from elementary (non)overlapping rectangular pulse models

Aleksejus Kononovicus, Bronislovas Kaulakys

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
aleksejus.kononovicus@tfai.vu.lt

Baltas triukšmas ir Brauno judėjimas yra du geriausiai suvokiami svyravimų įvairiose medžiagose ir prietaisuose pavyzdžiai [1]. Baltas triukšmas dažnai kyla dėl šiluminių svyravimų arba dėl diskretiško aptiktų dalelių pobūdžio (t.y., šratinio triukšmo). Jam būdinga tai, kad jis nėra koreliuotas laike, o jo galios spektrinis tankis yra plokščias. Brauno judėjimas yra baltojo triukšmo laikinis integralas, todėl pats signalas yra koreliuotas, o koreliacijos nėra tarp šio signalo pokyčių. Brauno judėjimas pasižymi $S(f) \sim 1/f^2$ formos galios spektriniu tankiu. Tačiau įvairiose medžiagose ir prietaisuose, ypač žemo dažnio diapazone, dažnai pastebimas $S(f) \sim 1/f^\beta$ (čia $0.5 \leq \beta \leq 1.5$) formos galios spektrinis tankis. Šio triukšmo, literatūroje dažnai vadinamo 1/f triukšmu, žemo dažnio triukšmu, mirgėjimo triukšmu arba rausvuju triukšmu, prigimtis išlieka atviras klausimas [2–4].

Modelis pasiūlytas [5, 6] darbuose aprašo vieno krūvininko (pvz., elektrono), dreifuojančio per kondensuotą medžiagą, pagavimo–išlaisvinimo procesą. Modelyje krūvininkas arba yra laisvas (dreifuoja laidumo juostoje taip generuodamas elektros srovę), arba yra įkalintas pagavimo centre (šiuo atveju elektros srovė nebūtų generuojama). Šiame modelyje stebimas signalas yra sudarytas iš nepersiklojančių stačiakampių impulsų (žr. 1 pav. kairėje). Čia mes apibendriname šį modelį leisdami impulsams susiliesti ir persikloti.

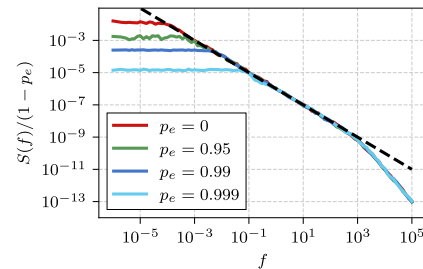


1 pav. Pavyzdinės nepersiklojančių ir persiklojančių impulsų sekos: τ_i – tarpų trukmės, θ_i – impulsų trukmės.

Originaliame, nepersiklojančių stačiakampių impulsų, modelyje 1/f triukšmas yra gaunamas, kai impulsų trukmės yra sąlyginai ilgos, $\langle \theta \rangle \gg \tau_{\min}$ (atitinka $\gamma_\theta \ll \gamma_{\max}$), o tarpai tarp impulsų yra pasiskirstę pagal laipsninį dėsnį $p(\tau) \sim \tau^{-2}$ [5]. Toks τ skirstinys gali būti gautas darant prielaidą, kad atskirų pagavimo centrų išlaisvinimo spartos yra atsitiktinės ir tolygiai pasiskirsčiusios $[\gamma_{\min}, \gamma_{\max}]$ intervale [6].

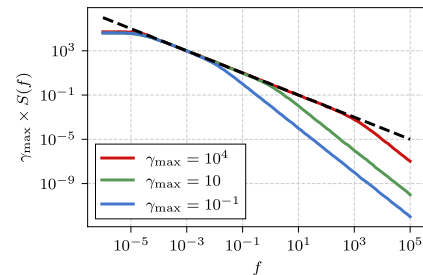
Impulsai gali susiliesti tuo atveju (tarpas tarp jų išnyksta), jei po pagavimo krūvininkas per nykstantai mažą laiką (per kurį srovės trūkis nėra detektuojamas) yra išstumiamas iš pagavimo centro. Tegu tokio “momentinio” išstūmimo tikimybė yra p_e . Tokiu atveju švarus 1/f triukšmas vis tiek yra stebimas, bet pakinta (sumažėja) signalo galia ir susiaurėja 1/f triukšmo

dažnių sritis (žr. 2 pav.).



2 pav. Galios spektrinio tankio kreivės skirtingiems p_e .

Norint leisti impulsams persikloti galima būtų leisti neigiamus τ_i , bet toks atvejis neturi fizikinės prasmės, o bandant skaitmeniškai jį realizuoti kyla nuoseklumo problemų. Paprastesnis sprendimas yra pakeisti τ_i interpretavimą: padarant jį tarpu tarp impulsų pradžių. Originalią interpretaciją atspindi 1 pav. kairysis grafikas, o pakeistą 1 pav. dešinysis grafikas. Dėl to reikia keisti ir modelio fizikinę interpretaciją: laiko intervalais τ_i įvyksta medžiagos sužadimas, kuris iššaukia stačiakampį atsaką, kurio trukmė θ_i . Kai $\theta_i > \tau_i$, tada i -tasis ir $(i + 1)$ -asis impulsai persiklos.



3 pav. Galios spektrinio tankio kreivės skirtingoms γ_{\max} .

Kaip matome 3 pav., impulsų persiklojimas nesugadina ir neiškreipia 1/f triukšmo. Persiklojančių impulsų atveju, švarus 1/f triukšmas gaunamas net kai impulsų trukmės yra sąlyginai trumpos, $\gamma_\theta \gg \gamma_{\max}$ (paveiksle $\gamma_\theta = 1$).

Reikšminiai žodžiai: 1/f triukšmas, žemo dažnio triukšmas, ilga atmintis, telegrafinis triukšmas

Literatūra

- [1] S. Kogan, *Electronic noise and fluctuations in solids* (Cambridge University Press, 1996).
- [2] S. Sadegh *et al.*, *New J Phys* 16: 113054 (2014).
- [3] V. Palenskis, K. Maknys, *Sci Rep* 5: 18305 (2015).
- [4] F. Gruneis, *Phys Lett A* 383: 1401–1409 (2019).
- [5] A. Kononovicus, B. Kaulakys, *Phys Rev E* 107: 034117 (2023).
- [6] A. Kononovicus, B. Kaulakys, arXiv:2306.07009 [math.PR].

Nanodeimantų paramagnetinių defektų geometrijos optimizavimas taikant sparčiuosius metodus

On the geometry optimization of paramagnetic defects in nanodiamonds applying the fast methods

Šarūnas Masys¹, Valdas Jonauskas¹, Žilvinas Rinkevičius^{2,3}

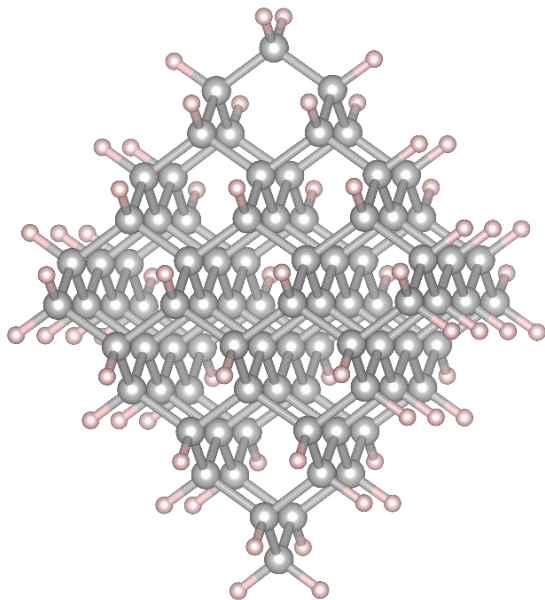
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas

³Karališkasis technologijos institutas, Chemijos, biotechnologijos ir sveikatos inžinerijos mokslų mokykla, Malvinos kel. 10, SE-10691, Stokholmas
sarunas.masys@tfai.vu.lt

Nanodeimantus, arba deimanto nanodaleles, dėl unikalios jų mechaninių, fizikinių bei cheminių savybių rinkinio tikimasi panaudoti tokiose srityse kaip nanokompozitai, tribologija ar nanomedicina [1]. Kalbant apie pastarąją, paramagnetiniai defektai atlieka kertinį vaidmenį vizualizuojant nanodeimantus tiek fluorescencijos pagrindu, tiek magnetinio rezonanso pagrindu technologijomis, todėl labai svarbu juos tinkamai identifikuoti.

Šiame darbe atliekamas 30 paramagnetinių defektų, įterptų į $C_{84}H_{64}$ dydžio nanodeimantą (žr. 1 pav.), geometrijos optimizavimas taikant kelis populiarius sparčiuosius metodus: PBEh-3c [2], r²SCAN-3c [3], B97-3c [4], HF-3c [5] bei GFN2-xTB [6]. Visi skaičiavimai atlikti ORCA kvantinės chemijos paketu [7, 8].



1 pav. Oktaedrinės formos $C_{84}H_{64}$ dydžio nanodeimantas. Pilki rutuliukai žymi anglies, o rožiniai vandenilio atomus.

Lyginant optimizuotas paramagnetinių defektų geometrijas su atskaitinėmis geometrijomis, gautomis PBE0/def2-TZVP lygmeniu [9, 10], pagrindinis dėmesys yra skiriamas ne tik svarbiausių ryšių ilgių, bet ir atskaitinių elektroninio g -tenzorius verčių

atkuriamumui. Kaip žinia, elektroninis g -tenzorius yra vienas iš svarbiausių paramagnetinio elektronų rezonanso parametrų, leidžiančių detalai analizuoti paramagnetinio defekto geometrinę struktūrą bei sukinių pasiskirstymą.

Gauti rezultatai rodo, jog PBEh-3c, r²SCAN-3c ir B97-3c tikslumas yra gana panašus ir gali būti laikytinas geru: vidutiniai ryšių ilgių nuokrypiai nuo atskaitinių verčių atitinkamai siekia 1.74, 1.42 ir 1.47 pm, o izotropinių elektroninio g -tenzorius verčių nuokrypiai yra 170, 150 ir 157 milijoninės dalys (ppm). Tačiau verta paminėti, jog nei vienas iš šių metodų nesugebėjo tiksliai atkurti visų paramagnetinių defektų atskaitinių geometrijų, todėl nagrinėjant didesnes sistemas rekomenduojame juos taikyti pasirinktinai – priklausomai nuo konkretaus paramagnetinio defekto nanodeimante. HF-3c ir GFN2-xTB tikslumą galima atitinkamai laikyti prastu ir vidutinišku, nes jų vidutiniai ryšių ilgių nuokrypiai siekia 7.27 ir 7.14 pm, o izotropinių elektroninio g -tenzorius verčių nuokrypiai yra 1054 ir 496 ppm.

Atkreiptinas dėmesys į tai, jog kai kurių paramagnetinių defektų, pavyzdžiui nikelio ar titano pagrindu, elektroninio g -tenzorius vertės yra ypač jautrios geometrinei konfigūracijai, nes net ir nedideli ryšių ilgių nuokrypiai lemia itin didelius elektroninio g -tenzorius verčių pokyčius. Todėl tiksliai atkuriamos paramagnetinių defektų geometrijos yra labai svarbios tinkamai jų identifikacijai.

Reikšminiai žodžiai: geometrijos optimizavimas, nanodeimantai, paramagnetiniai defektai, elektroninis g -tenzorius.

Literatūra

- [1] S. L. Y. Chang *et al.*, ACS Nano **16**, 8513 (2022).
- [2] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys. **143**, 054107 (2015).
- [3] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys. **154**, 064103 (2021).
- [4] J. G. Brandenburg *et al.*, J. Chem. Phys. **148**, 064104 (2018).
- [5] R. Sure *et al.*, J. Comput. Chem. **34**, 1672 (2013).
- [6] C. Bannwarth *et al.*, J. Chem. Theory Comput. **15**, 1652 (2019).
- [7] F. Neese, WIREs Comput. Mol. Sci. **2**, 73 (2012).
- [8] F. Neese, WIREs Comput. Mol. Sci. **8**, e1606 (2022).
- [9] C. Adamo *et al.*, J. Chem. Phys. **110**, 6158 (1999).
- [10] F. Weigend *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **7**, 3297 (2005).

Integruoto gamtos mokslų kurso modeliai

Models for an integrated science course

Aušra Kynienė¹, Jurga Turčinavičienė², Grita Skujienė², Asta Meškauskienė³, Rita Makarskaitė-Petkevičienė³, Vytautas Kavaliauskas⁴, Agnė Girkontaitė⁵

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius

³Vilniaus universitetas, Filosofijos fakultetas, Ugdymo mokslų institutas, Universiteto g. 9-407, LT-01513 Vilnius

⁴Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

⁵Vilniaus universitetas, Filosofijos fakultetas, Sociologijos ir socialinio darbo institutas, Universiteto g. 9-309, LT-01513 Vilnius

ausra.kyniene@tfai.vu.lt

Vilniaus universiteto mokslininkai atliko tyrimą „Integruotas gamtamokslinis ugdymas Lietuvoje: pasiekimai ir ateities perspektyvos“, kuris vykdytas pagal temą Integralaus gamtamokslinio ugdymo 5–8 klasėse (IGMK) įgyvendinimo galimybes ir veiksmingumą [1]. Vienas iš tyrimų uždavinių – surinkti informaciją kaip mokyklos įgyvendina integruotą gamtos mokslų kursą, kokie ugdymo modeliai yra taikomi. Tyrime dalyvaujančiose mokyklose, kurios įgyvendino IGMK programą, buvo taikomi įvairūs programos įgyvendinimo modeliai. 5–6 klasėse dauguma mokyklų taikė panašų modelį: vienas mokytojas dirbo vienoje klasėje, pamokų planavimą ir veiklas derindamas su kitais gamtos mokslų mokytojais. Nuo septintos klasės dažniau tai pačiai klasei pamokas vedė dažniausiai du mokytojai, pasiskirstę kursą sau artimomis temomis. Aštuntoje klasėje – su klase beveik visose mokyklose dirbo mokytojai dalykininkai, kurie tarpusavyje suderino veiksmų planą ir veiklas. Atliekant tyrimą išsiskyrė kelios mokyklos, kurios ypatingą dėmesį skyrė tiriamajai veiklai. Šiose mokyklose buvo nustatyti patikimai aukštesni mokinių pasiekimai.

Apibendrinus mokyklų patirtį ir išanalizavus kitų šalių patirtį, siūlomi šie integralaus mokymo modeliai:

1. Visas gamtamokslines pamokas veda vienas mokytojas, pasirengęs mokyti integraliai.

2. Visas gamtamokslines pamokas, keisdamiės eiliškumu pagal suderintą turinį, atskirai arba kartu (kartais net vienoje pamokoje) veda visi (arba keli pagal pamokos pobūdį) gamtos mokslų mokytojai. Pirmas modelis šiuo metu mokykloms sunkiai įgyvendinamas dėl šio tipo mokytojų stygiaus. Su šia problema susiduria ne vien Lietuva. Įgyvendinti šį modelį galima trimis mokyklai priimtinais būdais:

1A. Mokykloje dirbantis mokytojas paraleliai įgyja kitų gamtamokslinių dalykų kompetencijų savarankiškai ir įvairiuose kursuose ruošdamasis pamokoms. Šis modelis tinkamesnis mažoms

mokykloms, nes mokytojai daugiau laiko gali skirti pasiruošimui. Nepaisant to, šį modelį galima taikyti įvairiose mokyklose, jei mokytojas yra įgijęs kitų gamtos mokslų dalykų kompetencijas.

1B. Vienas mokytojas veda visas gamtos mokslų pamokas, tačiau joms ruošiasi bendradarbiaudamas su kolegomis.

1C. Skirtingų mokomųjų dalykų mokytojai kartu planuoja pamokas ir vėliau jas veda atskiroms klasėms. Šis modelis tinka, jei mokykloje yra kelios paralelinės klasės.

Nesant integralaus kurso baigusio mokytojo, galimi keli variantai ir 2 modelio, kai mokytojai vykdo ugdymo programą pagal savo dalykinę kompetenciją: 2A. Su ta pačia klase dirba keli mokytojai ir jie keičiasi pagal temas. Tvarkaraštis sudaromas, nurodant integruoto kurso pamokas visiems su ta klase dirbantiems gamtos mokslų mokytojams tuo pačiu metu. Pamoką mokytojai veda pakaitomis, pasiskirstę mokymosi turinį pagal temas. 2B. Su ta pačia klase dirba keli mokytojai, jie keičiasi klasėmis. Trys (arba du) gamtos mokslų mokytojai dėsto savo temas tuo pat metu skirtingose klasėse. Išdėstę savo temas mokytojai apsikeičia klasėmis.

Rekomendacijos diegimui: atlikti modelio įgyvendinimo stebėseną. Siekiant veiksmingai įgyvendinti modelį, svarbią vietą užima mokytojo veiklos įsivertinimas (tiek planuojant mokymo turinį, tiek jį įgyvendinant).

Reikšminiai žodžiai: integralus gamtamokslis ugdymas.

Literatūra

[1] Integruotas gamtamokslis ugdymas Lietuvoje: pasiekimai ir ateities perspektyvos LMT reikminio tyrimo S-REP-21-3 Ataskaita.

https://www.fsf.vu.lt/dokumentai/Ataskaita_visi%C5%A1kai_galutin%C4%97_04_08_2.pdf

ChatGPT ir Bard panaudojimo galimybės mokantis fizikos

Physics Learning with ChatGPT and Bard

Rigonda Skorulskienė

Kauno jėzuitų gimnazija, Rotušės a. 9, LT-44280 Kaunas

rigonda@gmail.com

Pokalbių robotai ChatGPT ir Bard – tai dirbtinį intelektą pasitelkiančios programos, išmokytos suprasti ir generuoti tiek įprastą tekstą, tiek kurti kodus įvairiomis programavimo kalbomis. Generuojant atsakymą, programos naudojasi dideliais tekstinės informacijos kiekiais ir mašininio mokymosi algoritmais.[1, 2]

ChatGPT tapo viešai prieinama 2022 m. lapkričio mėnesį ir vartotojų augimas per pirmas penkias dienas buvo greičiausias pasaulio istorijoje [3]. Bard Europoje prieinama nuo 2023 m. liepos mėnesio [4].

Nuo 2022 m. gruodžio mėn. ChatGPT naudojame fizikos mokymuisi bei mokymui gimnazinėse klasėse, kur dalis mokinių fiziką mokosi anglų kalba. Nuo 2023 m. rugsėjo mėnesio bandomos Bard galimybės.

Patikrintos ChatGPT panaudojimo galimybės:

- gali padėti išsiaiškinti fizikos sąvokas ar dėsnius paprastais ir suprantamais žodžiais. Nesupratęs atsakymo, mokinys gali prašyti kitos formuluotės arba įvesti savo formuluotę ir paprašyti ją patikrinti.
- gali padėti mokiniams spręsti fizikos uždavinius, aiškinant sprendimą žingsnis po žingsnio. Galima paprašyti ir alternatyvaus sprendimo.
- gali rasti klaidą tekste arba uždavinio sprendime ir ją ištaisyti, pakomentuoti testo su pasirenkamaisiais atsakymais teisingus ir neteisingus pasirinkimus.
- gali pateikti reiškinų pavyzdžius realiame gyvenime, pritaikymo galimybes.
- gali veikti kaip idėjų generatorius, ieškant temų projektiniams darbams ar pasirenkant metodą tiriamajam darbui ir pan.

Bard taip pat gali atlikti šias užduotis. Bard privalumai: „Google“ paieška, informacijos pateikimas lentelėse, sąsajos su Googlo dokumentais ir kt.

Dirbtinio intelekto pokalbių programos yra nuolat tobulėjantys įrankiai, tačiau jų atsakymai nėra patikimi. Programa generuoja atsakymus, remdamasi duomenimis, kuriuos gauna mokymosi metu. Programos naudojama informacija gali būti šališka arba netiksli.

Labai svarbu, kad bet kokia pateikta informacija būtų kritiškai vertinama ir patikrinama. ChatGPT programa pakankamai gerai generuoja lietuviškus tekstus, tačiau reikėtų atsižvelgti į tai, kad jos „gimtoji“ kalba yra anglų. Dėl šios priežasties užduotis ar uždavinio sąlyga gali būti neteisingai interpretuota.

Nors Bard save laiko galingesniu ir išsamesniu LLM (*large language model*) įrankiu nei ChatGPT, tačiau pripažįsta, kad ChatGPT vis dar yra geresnis

pasirinkimas lietuviško teksto generavimui ar vertimui [2].

Formuluojant užduotis savarankiškam mokinių darbui ir vertinant šias užduotis, svarbu atsižvelgti į ChatGPT ar Bard galimybes. Jei užduotį gali atlikti dirbtinis intelektas – tai ją reikia pakeisti taip, kad pačioje užduotyje būtų apibrėžta ChatGPT ar/ir Bard naudojimo paskirtis.

Svarbu su mokiniais aptarti ChatGPT ir Bard citavimo taisykles bei leistiną ChatGPT teksto kiekį rašto darbuose.

Pokalbio robotų sugeneruoto lietuviško teksto atpažinimui rekomenduojama programa yra Oxsico DI aptikimas (<https://ai.oxsico.com>). Šia programa taip pat visiškai pasitikėti negalima, bet jos lietuvių kalba yra sparčiai tobulinama [5].

Dirbtinio intelekto įrankiai keičia mokymo ir mokymosi stilių, tačiau jie tikrai neišspręs fizikos mokytojų trūkumo Lietuvoje.

Reikšminiai žodžiai: ChatGPT, Bard, dirbtinis intelektas, fizikos mokymasis, OxsicoDI.

Literatūra

- [1] OpenAI. (2023). ChatGPT (Aug 17 version) [Large language model]. <https://chat.openai.com>
- [2] Google. (2023). Bard (Aug 17 version) [Large language model]. <https://bard.google.com>
- [3] Levi, D. (2022, December 05). ChatGPT crosses 1 million users five days after launch. TechStartups. <https://techstartups.com/2022/12/05/chatgpt-crosses-1-million-users-five-days-launch/>
- [4] McCallum, S. (2023, July 13). Bard: Google's ChatGPT rival launches in Europe and Brazil. BBC News. www.bbc.com/news/technology-66187283
- [5] Oxsico. (2023 rugpjūčio 2). Nuo šiol ir Lietuvoje – sukūrėme sprendimą, padėsiantį atpažinti DI sukurtą tekstą lietuvių kalba. Pranešimas žiniasklaidai. <https://lt.oxsico.com/nuo-siol-ir-lietuvoje-sukureme-sprendima-padesianti-atpazinti-di-sukurta-teksta-lietuviu-kalba/>

**Prof. Henrikas Jonaitis: mokytojas, mokslininkas, didis humanistas...
(110-jų gimimo metinių progai)**

**Prof. Henrikas Jonaitis: teacher, scientist, great humanist...
(on the occasion of the 110th birthday)**

Liudvikas Kimtys

Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Liudvikas.kimtys@ff.vu.lt

Henrikas Jonaitis, gimė 1913 m. liepos 5 d. Vilniuje tarnautojo šeimoje. 1929 m. jis baigė Kauno „Aušros“ berniukų gimnazijos 4 klases, o 1934 m. baigė Aukštesniąją komercijos mokyklą ir įstojo į Vytauto Didžiojo universiteto Gamtos ir matematikos fakultetą, kurį baigė 1941 metais. Studijuodamas jis dirbo raidžių rinkėju spaustuvėje, mokytoju.

Po karo Vytauto Didžiojo universiteto diplomas nebuvo pripažintas, todėl H. Jonaitis studijavo Vilniaus universitete, Fizikos ir matematikos fakultete. Studijas baigė 1948 metais. Tuo pačiu laiku jis neakivaizdiniu būdu studijavo Vilniaus pedagoginiame institute, Gamtos fakultete, ir 1949 m. gavo geografijos specialybės mokytojo diplomą. 1944 m. pradėjo dirbti Vilniaus universiteto Bendrosios fizikos katedros asistentu, nuo 1946 m. - vyresniuoju dėstytoju, o nuo 1951 m. - dar ir Vilniaus pedagoginio instituto Teorinės fizikos katedros vyresniuoju dėstytoju (0,5 etato), o 1944-47 m. dirbo ir Vilniaus 1-sios gimnazijos direktoriumi.

1950 m. H. Jonaičiui buvo suteikta galimybė studijuoti vienų metų aspirantūroje tuometiniame Leningrade pas žymų fiziką profesorių V. Čulanovskį. 1954 m., sėkmingai apgynus Vilniaus universitete disertaciją „*Alfa ir beta-karotinių mišinio kiekybinės analizės spektrofotometriniu metodu klausimu*“, jam buvo suteiktas fizikos ir matematikos mokslų kandidato (*dabar – daktaro*) mokslinis laipsnis. Įdomu pažymėti, kad disertacija (271 p.) parašyta sklandžia lietuvių kalba ir joje yra tik trumpa santrauka (6 p.) rusų kalba. H. Jonaičio moksliniais darbais prasidėjo nauja Lietuvoje tyrimų šaka – eksperimentinė molekulių spektrometrija. Kitais, 1955 m., jam suteiktas docento pedagoginis mokslinis vardas.

Kalbant apie H. Jonaičio mokslinę veiklą, reikia pradėti nuo jo diplominio darbo „*Elektrinės paladžio varžos kitimo priklausomybė nuo okliuduoto vandenilio*“ (darbo vadovas prof. P. Brazdžiūnas). Darbe buvo mėginta pakartoti mokslinėje literatūroje skelbtus duomenis, iki tol laikytus etalonu, tyrinėjant Pd varžos priklausomybę nuo H₂ okliuzijos. Darbe buvo gauta išvada buvo nauja, nes iki tol manyta, kad potencialų skirtumas tarp elektrodų nekinta.

Nuo 1960 m. iki 1976 m. buvo Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedros vedėjas.

Dirbdamas universitete H. Jonaitis, skaitė bendrosios fizikos kursus fizikams, chemikams, medikams ir kitų specialybių studentams. Be to, jis dėstė spektroskopijos specialiuosius kursus fizikams, skaitė fizikos dėstyto metodiką, vadovavo laboratoriniams, kursiniams, diplominiams darbams. Jis buvo vienuolikos aspirantų

kandidatinių disertacijų vadovas.

Nuo 1980 m. H. Jonaičio darbas nukrypo į fizikos istoriją. Šiais klausimais jis paskelbė straipsnių ir kartu su kitais bendraautorais išleido fizikos istorijos pirmąjį tomą. Per savo ilgą darbą universitete jis dalyvavo 55 mokslinėse konferencijose. Daug rašė mokymo klausimais, paskelbė per 40 publicistinių straipsnių, visada sutikdavo paskaityti populiarias paskaitas visuomenei, ypač jaunimui. 1951–1986 m. buvo Lietuvos „Žinijos“ draugijos Fizikos, matematikos ir astronomijos sekcijos biuro, mokslinės-metodinės tarybos pirmininkas; 1959–1977 m. – Lietuvos „Žinijos“ draugijos revizijos komisijos sekretorius. 1957–1980 m. buvo Šiaulių mokytojų instituto (vėliau – Pedagoginis institutas) valstybinių egzaminų komisijos pirmininkas; 1957–1972 m. – žurnalo „Jaunimo gretos“ kolegijos narys. Ilgą laiką jis buvo viso Vilniaus universiteto profsąjungos komiteto narys ir net pirmininkas. Jis niekada nesakydavo: „aš šito darbo nedirbsiu“.

Prof. H. Jonaitis buvo aukštų moralinių principų žmogus, tikras inteligentas. Negalima nepaminėti jo drąsos ir didvyriškumo karo ir vokiečių okupacijos metu. Tuo laiku jis gyveno Vilniuje ir dirbo I gimnazijos mokytoju. Rizikuodamas gyvybe, jis nešdavo savo mokiniams, patekusiems į Vilniaus getą, maisto, rūbų. Jis buvo vienas iš tų, kurie išsaugojo M. Rolnikaitės dienoraštį ir taip prisidėjo prie knygos „*Aš turiu pasakyti*“ išleidimo. Ši knyga išversta į daugelį kalbų. 1980 m. jis buvo apdovanotas Izraelio *Yad Vašem* medaliu „Pasaulio teisuolis“ ir jo garbei Jeruzalėje pasodintas medelis. Be to, jo vardas iškaltas ten pat paminklinėje lentoje.

Prof. H. Jonaitis buvo nepaprastai nuoširdus, visuomet pasirengęs padėti kitiems, didelis Lietuvos patriotas. Jis visą savo gyvenimą paskyrė mokslui, jaunosios kartos auklėjimui, žinių sklaidai.

Mirė Henrikas Jonaitis 1992 m. spalio 16 d. Vilniuje, palaidotas Saulės kapinėse.

Reikšminiai žodžiai: fizikos istorija.

Literatūra

- [1] Henrikas Jonaitis. Bibliografinė rodyklė (Sudarė Z. M. Petrauskienė), Vilnius, VVU-leidykla, 1988, 44 p.

Gamtamokslinio tyrimo kompetencijų ugdymas fizikos laboratoriniuose darbuose

Developing natural sciences research skills and competences in physics laboratory work

Evaldas Matijošaitis¹, Vidita Urbonienė²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9 III rūmai, LT-10222 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

evaldas.matijosaitis@cr.vu.lt

Mokslinis metodas yra apibrėžiamas kaip toks mokymo būdas, kurio metu žinioms įgyti yra taikoma mokslinio tyrinėjimo strategija – iškeliamą problema, informacija renkama teoriniu lygiu analizuojant mokslinę literatūrą, eksperimentiniu keliu atliekant bandymą arba stebėjimą bei statistiniu lygiu apdorojant ir interpretuojant rezultatus. [1] Fizikos studijose laboratoriniai darbai pripažįstami kaip esminis mokslinio metodo taikymo būdas, tačiau tam, kad studentas patirtų mokymosi sėkmę atliekant eksperimentą, būtina įgauti tiriamajam darbui reikalingus gebėjimus ir kompetencijas. Tiriamuosius gebėjimus apibendrintai galima apibūdinti kaip veiksmus, kurie atliekami patikrinti faktams, konstruoti ir išbandyti naujoms idėjoms, rinkti, analizuoti duomenims ir vystyti išvados. [1]

Mokomosiose laboratorijose studentai tobulina mokslo tiriamuosius įgūdžius bei fizikinių reiškinių supratimą per teorinių žinių sąveiką atliekant eksperimentinius veiksmus. Neturint reikiamo teorinio supratimo, tokie praktiniai užsiėmimai gali nepasiekti savo tikslo, nes studentui trūksta teorinio pagrindo formuoti naujoms žinioms. Kita vertus, stingant eksperimentui reikalingų tiriamųjų gebėjimų, studentas gali nepasiekti laboratorinio darbo rezultato, dėl to įprastai eksperimento metu yra sekama griežta veiksmų instrukcija. Gamtos mokslų laboratoriniuose darbuose dėl laiko ir įrangos apribojimų, eksperimentinė metodo dalis per daugelį metų tapo instrukcijų, garantuojančių „teisingą atsakymą“ vykdymu – mažas sisteminis mąstymas ir savarankiškumas vykdant praktinius užsiėmimus nepasiekia mokslinio metodo siekiamų tikslų. [2] Tyrimai rodo, jog į įgūdžius orientuotuose laboratoriniuose kursuose studentai pasiekia didesnę mokslinį savarankiškumą ir susiformuoja stipresnes fizikos nuostatas, nei į teorijos įtvirtinimą orientuotų kursų studentai. [3]

Laboratorinius užsiėmimus, galima suskirstyti į tris šakas pagal sudarytas eksperimento sąlygas bei instrukcijas: uždaroji – instrukcinė, atviroji – eksperimentinė ir besiskirianti – dvilypė laboratorija. [2] Fizikos studijose mokomųjų laboratorijų tipai turėtų būti parenkami pagal studentų turimus ir siektinus ugdyti tiriamuosius gebėjimus ir bei teorines žinias – praktinė veikla galima siekti daugelio skirtingų tikslų, tačiau atsižvelgiant į studentų įvairovę, technologinę prieigą ir ribotą laiką dėstytojai turi nuspręsti, į kuriuos tikslus verta sutelkti dėmesį.

Mokomosiose gamtos mokslų laboratorijose studentų atliekami darbai gali būti praplėsti arba pakeisti virtualių

laboratorių pagalba. Virtuali laboratorija apibrėžiama kaip techninės ir programinės įrangos sistemų derinys, leidžiantis besimokančiajam atlikti su gamtos mokslais susijusius eksperimentus be tiesioginio kontakto su realia įranga. Ypatingai šis metodas yra pravartus fizikos studijose mokantis plika akimi nestebimų mokslo reiškinių ir apie nestebimus objektus, arba išbandant nerealias tyrimo sąlygas. Modeliavimo pagalba šie nematomi fizikos konceptai paverčiami studentams matomais ir manipuliuojamais tyrimo objektais.

Organizuojant užsiėmimus fizikos mokomosiose laboratorijose virtualios laboratorijos gali užpildyti atotrūkį tarp teorinių paskaitų ir praktinių laboratorinių užsiėmimų. Studentai, virtualioje laboratorijoje išbandę eksperimentą kaip pasiruošiamąją veiklą prieš atliekant realų laboratorinį darbą, pasižymi geresniu eksperimentinės užduoties konceptualių supratimu, geriau naudoja mokslo tiriamuosius įgūdžius bei atlieka praktinius darbus greičiau, nei „tradicinį“ pasiruošimą turintys studentai. Nors instrukcijos kiek apriboja studentų mokslinį savarankiškumą, virtualiose laboratorijose jos yra būtinos naudingai mokymosi patirčiai užtikrinti. Tam gali būti pritaikytas interaktyvus ugdymo turinys, pavyzdžiui, atviro kodo H5P technologija, skirta kurti įvairaus tipo edukacinį turinį, kuriame besimokantysis gali būti aktyviu dalyviu. Fizikos studentai šios technologijos pranašumu labiausiai išskiria galimybę mokytis savu tempu ir vertina tai kaip veiksmingą priemonę pasiruošiant laboratoriniams užsiėmimams. [4]

Reikšminiai žodžiai: fizikos ugdymas, laboratoriniai darbai, virtualios laboratorijos.

Literatūra

- [1] Vázquez-Villegas, P.; Mejía-Manzano, L.A.; Sánchez-Rangel, J.C.; Membrillo-Hernández, J. Scientific Method's Application Contexts for the Development and Evaluation of Research Skills in Higher-Education Learners. *Educ. Sci.* 2023, 13, 62. 10.3390/educsci13010062.
- [2] Kirschner, P.A. Epistemology, practical work and Academic skills in science education. *Sci Educ* 1, 273–299 (1992). 10.1007/BF00430277
- [3] Wilcox, B.; Lewandowski, H. (2017). Developing skills versus reinforcing concepts in physics labs: Insight from a survey of students' beliefs about experimental physics. *Phys. Rev. Phys. Educ. Res.* 13. 10.1103/PhysRevPhysEducRes.13.010108
- [4] Kosmaca, J., Cinite, I., & Barinova, G. (2023). Exploring interactive H5P video as an alternative to traditional lecturing at the physics practicum. In V. Lamanaukas (Ed.), *Science and technology education: New developments and Innovations. Proceedings of the 5th International Baltic Symposium on Science and Technology Education (BalticSTE2023)* (pp. 111-121). Scientia Socialis Press. 10.33225/BalticSTE/2023.111

Kaip keičiasi Lietuvos fizikų požiūris į Europos lyčių lygybės politiką?

How is the attitude of Lithuanian physicists to the European gender equality policy changing?

Dalia Šatkovskienė¹, Sandra Pralgauskaitė¹, Živilė Rutkūnienė², Kristina Plauškaitė³

¹Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius

²Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

³Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

sandra.pralgauskaitė@ff.vu.lt

Europos Sąjungoje tarp pagrindinių vertybių svarbią vietą užima lyčių lygybė. Todėl šio klausimo sprendimui moksle taip pat skiriamas didelis dėmesys. Lyčių lygybė yra vienas iš Europos Bendrosios Mokslinių Tyrimų Erdvės (ERA) vystymo bei Atsakingo Mokslo ir Inovacijų (RR&I) politikos prioritetų. Klausimo sprendimo būdų ir jų efektyvumo nagrinėjimui bei taikymams finansuoti yra skiriamos projektinės EK bendrosios programos lėšos. Atliekama situacijos stebėseną ir analizė ES mastu [1].

Lyčių lygybės moksle klausimo sprendimo strategija (toliau - Strategija) tampriai siejama su visų suinteresuotų šalių (Europinio ir nacionalinio lygmens mokslo politikų ir mokslinę veiklą reguliuojančių ir finansuojančių institucijų, mokslo organizacijų vadovų ir mokslininkų visuomenės) glaudžiu bendradarbiavimu. Strategija siekiama institucionalizuoti problemą [2], tai yra nepalikti jos sprendimo atskiriems individams, o modernizuoti mokslo institucijas taip, kad jos sudarytų vienodas galimybes abiejų lyčių mokslininkams visapusiškai panaudoti savo talentus mokslo kūrimo procese bei mokslo administravime. Strategijos diegimas mokslo institucijose yra paremtas tiek šalyse narėse priimtais nacionaliniais lyčių lygybės įgyvendinimą užtikrinančiais įstatymais, tiek reikiamu proceso finansavimu. Vienu iš svarbių lyčių lygybės įgyvendinimo Strategijos aspektų yra proceso eigos stebėsenos užtikrinimas ES mastu. Tuo tikslu rekomenduojama, kad institucijų Lyčių lygybės planuose (LLP) atsispindėtų lyčių lygybės klausimo sprendimo gairės, lyčių lygybės aspektu būtų peržiūrimos, modernizuojamos ir tobulinamos mokslo vadybos ir mokslinio darbo kultūros sritys (pritaikant jas abiejų lyčių poreikiams bei skatinant moterų lyderystę moksle) bei užtikrinamas taip vadinamas „lyčių dimensijos“ įtraukimas į mokslines ir mokymo programas. EK bendrosios programos „Horizon 2020“ rėmuose buvo finansuojami projektai, padedantys sukurti mokslo institucijoms LLP. Šiuo metu vykdomai programai „Horizon Europe“ rengiant paraiškas ES finansuojamiems moksliniams projektams, atsižvelgiama į vieną iš ES politikos iniciatyvų, skirtų lyčių pusiausvyrai mokslo institucijose ir universitetuose gerinti. Vienas iš tinkamumo kriterijų yra tai, kad yra parengtas ir vykdomas LLP, nustatantis prioritetus ir aiškius tikslus (remiantis nuodugniu *status quo* įvertinimu), konkrečias priemones, kurios bus įgyvendinamos siekiant pagerinti lyčių lygybę mokslinių tyrimų organizacijoje [3].

Sparčiai vystantis tarptautiniam moksliniam bendradarbiavimui, kai eksperimentuose dalyvauja fizikai iš įvairių šalių (CERN, XFEL, ESS, ITER ir kt.), tampa svarbus ir persikertančių diskriminacijų poveikis, susijęs su tokiais faktoriais kaip rasė, etniškumas, lytis, neįgalumas ir kiti skirtumai, sukuriantys unikalius efektus, veikiančius tyrėjų kolektyvus. Lietuvos fizikų visuomenei vis plačiau įsijungiant į tarptautinį bendradarbiavimą, laikas ruoštis spręsti ir šiuos klausimus.

Pranešime nagrinėjama, kaip Lietuvos fizikų bendruomenė supranta įvairius lyčių lygybės aspektus, į ką reiktų atkreipti dėmesį ir kokias priemones reiktų taikyti, kad neliktume „gilioje praeityje“ tarp išsivysčiusių Europos šalių. Pažymėtina, kad mokslas yra veikla, kurią vykdo žmonės ir socialinių klausimų sprendimas stipriai įtakoja profesinės veiklos rezultatus. Pranešimas remiasi Lietuvos mokslo institucijų dokumentais ir statistika, kurią jos renka, įgyvendindamos LLP. Įvairiais aspektais išanalizuoti duomenys rodo, kad fizikų visuomenė vis dar yra labai vyriška ir, nors tam tikri pokyčiai joje matomi, reikia nemažai nuveikti, kad pasiektume savitarpio supratimą tarp abiejų lyčių fizikų. Pranešime siūloma pradėti plačią diskusiją šiuo klausimu įvairiuose lygmenyse, siekiant gerinti savitarpio supratimą Lietuvos fizikų bendruomenėje. Tai turėtų ženkliai sumažinti nereikalingas įtampas moksliniuose kolektyvuose ir padidintų abiejų lyčių motyvaciją vystyti fizikos mokslą, o tuo pačiu prisidėtų ir prie strateginių Lietuvos tikslų - paversti šalį šiuolaikinių technologijų kūrėja.

Reikšminiai žodžiai: lyčių lygybė, mokslo politika, struktūriniai pokyčiai, tikslieji mokslai, fizika.

Literatūra

- [1] She Figures 2021, Gender in Research and Innovation Statistics and Indicators. https://kifinfo.no/sites/default/files/ec_rtd_shefigures-2021-report.pdf (2023 09 16).
- [2] Struktūriniai pokyčiai mokslinių tyrimų srityje, https://eige.europa.eu/sites/default/files/documents/ti_pubpdf_mh_0417156ltn_pdfweb_20170913125432.pdf (2023 09 16).
- [3] Horizon Europe Work Programme 2021-2022, 13. General Annexes, p. 12. https://ec.europa.eu/info/funding-tenders/opportunities/docs/2021-2027/horizon/wp-call/2021-2022/wp-13-general-annexes_horizon-2021-2022_en.pdf (2023 09 16).

Lietuvos fizikė – sesuo Marija Margareta Milevičiūtė

Lithuanian physicist – sister Maria Margaret Mileviciute

Judita Puišo

¹Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
judita.puiso@ktu.lt

1978 m. Jungtinių Amerikos valstijų mokyklos žurnalas „MARIA HERALD“ lietuvių angliakasio dukterį palygino su Albertu Einšteinu ir Marija Kiuri, emigrantų globėja motina Cabrini ir deive. Kas buvo ši Amerikos lietuvė ?

Sesuo Marija Margareta Milevičiūtė (Catherine Helen Melevage) gimė 1893 m. rugsėjo 23 d. Shenandoah (JAV). Ji mokėsi Mahanoy City, vėliau Holy Family mokyklose bei Servants of the Immaculate Heart of Mary seminarijoje. 1911 m. Catherine Helen Melevage įstojo Šv. Kazimiero seserų kongregaciją ir gavo sesers Marijos Margaretos vardą.

Nuo 1913 m. iki 1922 m. sesuo M. Margareta mokytojavo Šv. Kazimiero akademijoje bei ėjo šios akademijos vedėjos pareigas. Sesuo M. Margareta studijavo Čikagos De Paulo universitete (JAV) filosofiją ir įgijo bakalauro mokslo laipsnį, baigė chemijos ir fizikos studijas, įgydama magistro mokslo laipsnį.

1923 m. sesuo M. Margareta atvyko į Lietuvą. Jai buvo pavesta vadovauti kuriamai Šv. Kazimiero kongregacijos ir „Saulės“ švietimo draugijos „Saulės“ mergaičių progimnazijai Kaune. 1923 m. spalio mėn. 11 d., vadovaujantis Švietimo ministro įsakymu, sesuo M. Margareta buvo paskirta Kauno „Saulės“ mergaičių progimnazijos direktore. Jos pastangomis 1925 m. rugpjūčio 1 d. „Saulės“ mergaičių progimnazija įgijo gimnazijos teises. 1925–1926 mokslo metais gimnazijoje veikė šešios klasės. Sesuo M. Margareta ne tik vadovavo, mokytojavo „Saulės“ gimnazijoje, bet ir dėstė fiziką bei chemiją „Saulės“ mokytojų seminarijoje. Ji taip pat skatino Šv. Kazimiero kongregacijos seseris mokyti Lietuvos universitete, ypatingai Matematikos-gamtos fakultete.

Kadangi sesuo M. Margareta buvo JAV pilietė, atsižvelgus į Švietimo ministerijos 1926 m. spalio 11 d. raštą, jai buvo leista eiti direktorės pareigas tik iki 1926 m. spalio 15 d. Vėliau šis leidimas dar kelis kartus pratęstas iki 1926–1927 mokslo metų pabaigos.

Sesuo M. Margareta 1927 m. birželio 2 raštiškai informavo Švietimo ministerijos Aukštesniojo mokslo departamentą apie 1928 metais planuojamą atidaryti 8-ąją gimnazijos klasę, prašydama papildomo finansavimo.

1927 m. birželio 30 d., vadovaudamasi Švietimo ministerijos sprendimu, „Saulės“ draugijos centro valdyba seserį Margaretą atleido nuo 1927 m. rugpjūčio 1 d. iš „Saulės“ mergaičių gimnazijos vadovės pareigų. 1927 m. liepos 4 d. Lietuvių Švietimo draugija „Saulė“ kreipėsi į „Saulės“ Draugijos mergaičių gimnazijos direktorę seserį M. Margaretą Milevičiūtę dėl tolesnio darbo „Saulės“ gimnazijoje. Atsižvelgus į pakartotinius „Saulės“ draugijos centro valdybos ir „Saulės“ mergaičių gimnazijos tėvų prašymus, seseriai M. Margaritai buvo leista eiti toliau „Saulės“ mergaičių gimnazijos direktorės pareigas.

1928 m. birželio 16 d. sesuo M. Margareta Milevičiūtė buvo atleista iš direktorės pareigų ir atšaukta į Čikagą (JAV), nepaisant, kad mokyklos direktorę užstojo ne tik mokytojai, bet ir moksleivių tėvų komiteto nariai.

Grįžusi į JAV, 1928 m. rugpjūčio 14 d., sesuo M. Margareta paliko Šv. Kazimiero vienuolyną, pasilikdama tik oficialų Margaretos vardą. Iki Antrojo pasaulinio karo ji ilgus metus dirbo fizikos mokytoja, vadovavo Čikagos ir Naujosios Filadelfijos valstybinėms mokykloms.

JAV išitraukus į Antrąjį pasaulinį karą mokytoja Margareta Milevičiūtė nuo 1943 m. dirbo S Government at Fort Monmouth, Squier Laboratorijoje (Camden, New Jersey (JAV)). Po daugelio metų ji, pildydama anketą, nurodė, kad dirbo minėtoje kompanijoje inžiniere. Reikia paminėti, kad RCA buvo viena iš JAV Valstybės nacionalinio saugumo komercinių partnerių, jungusių amerikiečių ir vokiečių mokslininkus, vykdančius tyrimus gynybos srityje.

1954 birželio 23 d. Margaretai Milevičiūtei buvo leista sugrįžti į Čikagos Šv. Kazimiero vienuolyną. Sugrįžusi į Šv. Kazimiero vienuolyną ji gavo M. Margaret Anne vardą, mokė fizikos ir chemijos Šv. Kazimiero aukštesnėse mokyklose iki pat 1974 metų.

Sesuo Margareta mirė 1979 m. spalio mėn. 31 d., būdama 86 metų. Ji palaidota Čikagos Šv. Kazimiero kapinėse.

Nors sesuo Margareta Lietuvoje tebuvo vos keletą metų, įvesta „margaretiška“ tvarka ir dvasia išliko per visą „Saulės“ gimnazijos gyvavimo laikotarpį. „Saulės“ gimnazijos bendruomenė dar ilgus metus prisiminė seserį M. Margaretą Milevičiūtę kaip originalią, išsilavinusią seserį. Jos pasiūlyta mergaičių mokymosi ir auklėjimo sistema turėjo suteikti kuo daugiau praktinių žinių. Jos iniciatyva „Saulės“ gimnazijoje mokėsi skirtingų tautybių, pilietybių ir tikėjimo išpažinimo mokinės. „Saulės“ gimnazijos vadovė pasižymėjo ne tik savo originalumu, kilnumu, bet ir inteligencija, kuri turėjo didelę įtaką ne tik gimnazijos mokytojams, bet ir moksleivėms.

Dėkoju KTU profesoriui Stanislovui Sajauskui, dr. Anitai Scarborough, Kauno „Saulės“ gimnazijos muziejui, Kauno regioniniam valstybės archyvui, ypatingai archyvarei Nijolei Ambraškienei, visiems, padėjusiems surinkti medžiagą ir parengti šį pranešimą.

Reikšminiai žodžiai: Fizika, chemija, gimnazija, mokytoja, inžinierė, Kaunas, RCA, JAV.



Lietuvos
Nacionalinė
Fizikos
Konferencija

STENDINIAI PRANEŠIMAI

SESIJA 1

Stereolitografijos būdu iš cirkonio dioksido atspausdinto gyvsidabrio halogenidų sorbcijai skitro sorbento privalumai ir trūkumai

Advantages and disadvantages of adsorbent for mercury (II) halides printed by method of stereolithography from yttria-stabilized zirconia

Darius Valiulis¹, Andriejus Urba¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Aplinkotyros lab., Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

Darius.Valiulis@ftmc.lt

Kartu su gyvsidabrio halogenidų matavimo atmosferoje metodų kūrimu didėja supratimas apie reikšmingą šių junginių keliamą pavojų gamtai ir žmonių sveikatai. Tai ypač aktualu vertinant šių junginių sklaidą šalia anglimi kūrenamų elektrinių. Anglies deginimas yra vienas iš pagrindinių antropogeninio gyvsidabrio šaltinių atmosferoje. Dėl didelės chloro koncentracijos anglyse ir išmetamosiose dujose susidaro dideli HCl kiekiai, kurie oksiduoja Hg⁰ į HgCl₂. Gyvsidabrio bromidas ir jodidas paprastai susidaro pakankamai dideliais kiekiais ir išmetamosiose dujose. Dėl didelio toksiškumo žmonių sveikatai ir aplinkai gyvsidabrio halogenidų sklaidos matavimas ir įvertinimas yra labai svarbūs. Tačiau dėl mažos minėtų junginių koncentracijos atmosferoje tinkamas mėginio paėmimas yra esminė analizės užduotis. Vienas iš siūlomų metodų buvo cirkonio oksidu dengto paviršiaus naudojimas selektyviam gyvsidabrio halogenidų sorbcijai iš atmosferos. Eksperimentiniai duomenys rodo, kad cirkonio dioksidas visiškai atitinka minėtų junginių sorbento savybes. Kitas reikalavimas tokiam sorbentui yra mažas jo ortakių medžiagos poringumas (kad nesikauptų junginiai, galintys absorbuoti metalinį gyvsidabrį iš oro srauto). Po kiekvieno halogenidų sorbcijos desorbcijos ciklo sorbentą reikia pašildyti iki 1000 °C, kad būtų pašalinti pašaliniai nusėdę junginiai, kurių kaupimasis ypač sorbento porose gali sukelti nepageidaujamą metalinio gyvsidabrio sorbciją. Todėl sorbentas turi būti mažo poringumo ir atlaikyti kuo didesnę matavimo ciklų skaičių (be didelių įtrūkimų sorbciniame paviršiuje). Remiantis tyrimų duomenimis, cirkonio keramika turi atitikti šiuos reikalavimus.

Sorbentas buvo atspausdintas stereolitografiniu būdu naudojant suspensiją, sudarytą iš cirkonio dioksido

(stabilizuoto yttriumi) miltelių. Sorbentas buvo sudarytas iš pnekių cilindro formos atskirai atspausdintų dalių. Buvo eksperimentuojama su minėtų cilindrių vidine struktūra, keičiant kanalų ir porų dydžius bei tarpusavio išsidėstymą. Spausdinimo parametrai buvo parinkti siekiant optimizuoti medžiagos akytumo charakteristikas.

Gyvsidabrio halogenidų sorbcijos efektyvumas spausdintu sorbentu įvertintas Gardis-5 CVAA analizatoriumi su GA-730 kalibravimo sistema (sukurta ir pagaminta Fizinių ir technologijos mokslų centre, Lietuva). Taip pat buvo įvertinta sorbcijos efektyvumo dinamika per 400 adsorbcijos ciklų. Įtrūkimų skaičiaus, sorbento porėtumo pokyčiai ir jų charakteristikos po minėtų ciklų skaičiaus taip pat buvo įvertinti naudojant SEM analizės būdą.

Literatūra

- [1] Urba et al. A pilot study of different materials applied for active sampling of gaseous oxidized mercury in the atmospheric air. *Atmospheric Pollution Research*, Volume 8, Issue 4, July 2017, Pages 791-799.
- [2] M.A. Engle et al. The influence of ozone on atmospheric emissions of gaseous elemental mercury and reactive gaseous mercury from substrates. *Atmos. Environ.* (2005).
- [3] J.L. Ambrose et al. Fast time resolution oxidized mercury measurements during the reno atmospheric mercury intercomparison experiment (RAMIX). *Environ. Sci. Technol.* (2013).
- [4] M.S. Gustin et al. Do we understand what the mercury speciation instruments are actually measuring? Results of RAMIX. *Environ. Sci. Technol.* (2013).

Kietų dalelių taršos sezoninė kaita Peshawar ir Lahore (Pakistanas) didmiesčiuose, jos įtaka vėžinių ir lėtinių plaučių ligų atvejų augimui

Seasonal variation of particulate pollution in metropolitan cities of Peshawar and Lahore (Pakistan) and how it impact the development of chronic pulmonary disease and lung cancer

Abdullah Khan¹, Darius Valiulis¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Aplinkotyros lab., Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

Abdullah.Khan@ftmc.lt

Oro tarša kietosiomis dalelėmis Pešavaro ir Lahore miestuose yra viena didžiausių pasaulyje [1]. Tyrimų tikslas buvo nustatyti taršos šaltinius, jos kitimo sezoniškumą ir ryšį su lėtinių plaučių ligų atvejų padidėjimu, lyginant su santikinei KD neužterštomis vietovėmis.

Tyrimų vieta Pešavaro mieste buvo Haji Camp autobusų terminalas ir Kohato autobusų terminalas, o tyrimo vietos Lahore mieste buvo pasirinktos Niazi ir Badami Bagh autobusų terminaluose. Pagrindinis dėmesys buvo skiriamas KD10 ir su Pb masės koncentracijai abiejų miestų pagrindinėse autobusų stotyse. Tyrimai parodė, kad koncentracijos vasaros sezonais abiejuose miestuose buvo mažesnės, palyginti su žiemos sezonu. Tačiau Hadži autobusų terminalo vidutinė koncentracija buvo didelė – 492,5 µg/m³, palyginti su Kohato autobusų stotimi – 468,5 µg/m³ žiemos sezonu, kur, kaip ir vasarą, vidutinė koncentracija Haji autobusų terminale buvo 413 µg/m³. Kohato autobusų stotyje buvo 396,3 µg/m³. Panašiai, Lahore vidutinė PM10 koncentracija buvo didesnė Badami Bagh autobusų stotyje, palyginti su Niazi autobusų terminalu abiem sezonais. Vidutinė koncentracija Niazi autobusų stotyje žiemą buvo 708 µg/m³, o vasarą – 478,2 µg/m³. Panašiai vidutinė koncentracija Badami Bagh autobusų stotyje yra 531,8 µg/m³ vasaros sezono metu ir 784 µg/m³ žiemos sezonu. Pb koncentracija buvo analizuojama naudojant atominės absorbcijos spektrometrą. Žiemą nustatytos Pb koncentracijos buvo didesnės, palyginti su abiejų miestų vasaros vertėmis. Panašiai vidutinė Pb koncentracija Hadži autobusų terminale buvo 732,7 ng/m³, o Kohat adda – 692,9 ng/m³ žiemą, o vasarą – atitinkamai 532,3 ng/m³ ir 489,1 ng/m³.

Žiemos sezono vidutinės Pb koncentracijos vertės Lahore Niazi autobusų stotyje buvo 837,6 ng/m³ ir Badami Bago autobusų stotyje 910,5 ng/m³. Vasarą Niazi autobusų stoties vertės buvo 624,9 ng/m³ ir Badami Bagh autobusų terminale buvo 674,9 ng/m³. Visų vietų koreliacijos rezultatai parodė, kad PM10 teigiamai koreliuoja su Pb, o transporto priemonių skaičius ir koreliacijos vertė svyravo nuo 0,353 iki 0,964.

Tuo būdu buvo nustatyti reikšmingi koncentracijų svyravimai metų bėgyje, o lyginant su Lietuvoje vyraujančios KD ir Pb koncentracijas su minėtais miestais, jos yra dviem eilėms mažesnės. Nustatytos koncentracijų vertės panaudotos plaučių ligų sergamumo priežasčių tolesnei analizei.

Literatūra

[1] Alam, K., Mukhtar, A., Shahid, I., Blaschke, T., Majid, H., Rahman, S., ... & Rahman, N. (2014). Source apportionment and characterization of particulate matter (PM10) in urban environment of Lahore. *Aerosol and Air Quality Research*, 14(7), 1851-1861.

[2] Chernyshev, V. V., Zakharenko, A. M., Ugay, S. M., Hien, T. T., Hai, L. H., Kholodov, A. S., ... & Golokhvast, K. S. (2018). Morphologic and chemical composition of particulate matter in motorcycle engine exhaust. *Toxicology reports*, 5, 224-230.

[3] Dewan, N., Majestic, B. J., Ketterer, M. E., Miller-Schulze, J. P., Shafer, M. M., Schauer, J. J., ... & Carmichael, G. R. (2015). Stable isotopes of lead and strontium as tracers of sources of airborne particulate matter in Kyrgyzstan. *Atmospheric Environment*, 120, 438-446.

Anglies aerolių kilmės Maniloje, Filipinuose apibūdinimas: lyginamasis tyrimas dviejose vietose

Characterizing Carbonaceous Aerosol Origins in Metro Manila, Philippines: A Comparative Study at Two Sites

Touqeer Gill¹, Simonas Kecorius^{1,2}, Kamilė Kandrotaitė¹, Vadimas Dudoitis¹, Leizel Madueno³, Alfred Wiedensohler³, Steigvilė Byčėnienė¹ and Kristina Plauškaitė¹

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

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

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

touqeer.gill@ftmc.lt

According to the 2021 report by the World Health Organization (WHO), a staggering 99% of the global population is exposed to air quality that exceeds the guideline limits set by WHO, with elevated levels of pollutants [1]. This critical issue is particularly pronounced in urban environments, where carbonaceous aerosol particles represent a significant portion of fine particulate matter (PM_{2.5}) [2]. Black Carbon (BC) particles, primarily generated through combustion processes such as biomass burning and internal combustion engine emissions, pose a severe threat to human health. To address this persistent concern, it is crucial to gain a comprehensive understanding of BC particle sources, their scale, and source-specific concentrations, especially in economically developing countries. Heightening awareness about this ongoing environmental crisis is a vital initial step toward achieving sustainable development.

An extensive field campaign was conducted in the urban environments of Metro Manila, Philippines, at two locations: Quezon City's East Avenue roadside (QCG site) and Manila's North Port (Port site) as part of the "A Transdisciplinary Approach to Mitigate Emissions of Black Carbon" (TAME-BC) project. During a three-month period from December 2019 to February 2020, the mass concentration of equivalent black carbon (eBC) was measured by using a 7-wavelength Aethalometer (AE-31). To investigate the magnitude of air pollution in Metro Manila, the focus was set on the sources of eBC, as well as mass concentration variation. Wavelength dependent absorption coefficient analysis revealed that at Port site transport (eBC_{TR}) and biomass burning (eBC_{BB}) related eBC contribute approximately 86% and 14% to the total eBC mass, respectively. In the case of Quezon City, this contribution was 80% and 20%, respectively (Fig. 1a, 1b). The time series analysis in figure 1c and 1d illustrates the dynamic changes in light absorption coefficients of elemental carbon (eBC) and brown carbon (BrC) at the port and QCG sites. Notably, the light absorption coefficient of BrC at 370 nm ($b_{\text{abs,BrC}}$) exhibited spatial variability, ranging from 0.02 to 0.80 Mm⁻¹. At the port site, eBC contributed significantly with 80%, surpassing BrC 20%, while a similar trend was observed at the QCG site, with eBC contribution 78% compared to BrC 22%.

The diurnal pattern of eBC_{TR} at both sites (QCG and Port) exhibits a higher mass concentration during the

morning hours (6-8 h) and a lower mass concentration during midday (11-13 h). Both sites, QCG and Port, display a similar trend for eBC_{BB} mass concentration, which reached a maximum between 6-8 hours and minimum between 11-13 hours (Fig. 2).

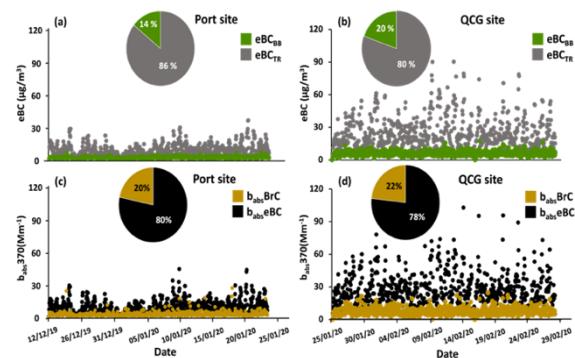


Fig. 1 Time series and contributions of the hourly average eBC_{TR} and eBC_{BB} to the total eBC, at port (a) and QCG (b) sites, as well as $b_{\text{abs,BrC}}$ and $b_{\text{abs,BC}}$ to the total b_{abs} (Mm⁻¹) at Port site (c) and QCG sites (d).

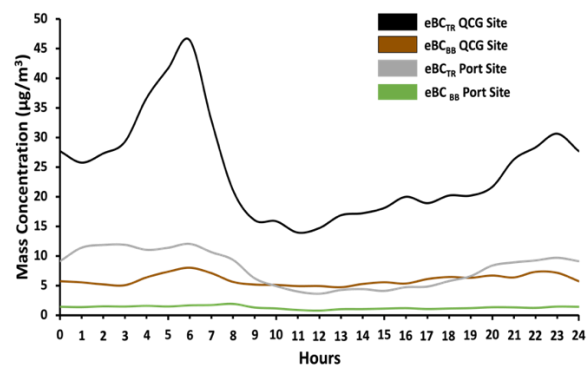


Fig. 2 eBC_{TR} and eBC_{BB} diurnal trend at Manila Port site and QCG site.

Keywords; Equivalent black carbon, source apportionment, Absorption ångström exponent.

Literature

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

Akustinis ultrasmulkių dalelių filtras dujų išmetimo sistemoms

Acoustic ultrafine particle filter for gas exhaust systems

Kamilė Kandrotaitė^{1,2}, Steigvilė Byčenkienė¹, Artūras Kilikevičius³, Jonas Matijošius³, Kristina Plauškaitė¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras (FTMC), Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

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

³Vilniaus Gedimino technikos universitetas (VILNIUS TECH), Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

kamile.kandrotaitė@ftmc.lt

XXI amžiuje oro tarša yra viena didžiausių visuomenės grėsmių, kasmet nusinešanti milijonus gyvybių. Oro taršos sukeltos sveikatos problemos dažniausiai susijusios su smulkiomis dalelėmis (angl. *fine particle*, FP), galinčiomis patekti giliai į kvėpavimo takus, kur plaučių išsivalymo procesai yra mažiau veiksmingi. Daugelis tyrimų įrodo FP toksiškumą ir jų ryšį su ligomis [1]. Taip pat tyrimuose akcentuojama mažesnių nei 0,1 μm aerodinaminio skersmens (PM0.1) dalelių dar vadinamų itin smulkiomis dalelėmis (angl. *ultra fine particle*, UFP), svarba, nes jos sudaro didžiąją dalelių skaitinės koncentracijos dalį. Šios UFP dalelės yra itin pavojingos dėl savo nanometrinių dydžio, kuris leidžia joms giliau prasiskverbti į kvėpavimo takus ir padidina jų nusėdimo efektyvumą bei organizmo įsisavinimą.

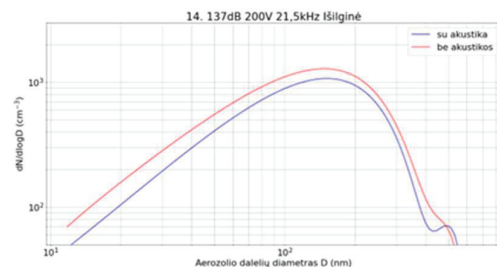
Pastaraisiais metais atmosferos kokybei buvo skiriamas didelis mokslinių tyrimų dėmesys. Vienas iš veiksmingų būdų pagerinti oro kokybę yra kenksmingų aerolio dalelių šalinimas naudojant technologines priemones, tokias kaip akustinė aglomeracija, turinti didelį potencialą [2]. Prieš naudojant tradicines kietųjų dalelių šalinimo technologijas, išmetamosiose dujose esančios itin smulkios dalelės yra veikiamos didelio intensyvumo garso bangomis, kurios skatina santykinę aerolio dalelių judėjimą ir padidina jų aglomeracijos greitį. Aerolio daleles veikiant didelio intensyvumo akustiniu lauku gali prasidėti suspenduotų dalelių sulipimo procesas, žinomas kaip akustinė aglomeracija [3].

Šis tyrimas nagrinėja būdus mažinti ultra smulkiųjų kietųjų dalelių koncentraciją atmosferoje taikant skirtingus akustinės aglomeracijos parametrus. Šio tyrimo tikslas yra suprasti ir optimizuoti aglomeracijos efektyvumą nagrinėjant akustinės aglomeracijos charakteristikas ir jų įtaką dalelių judėjimui akustiniame lauke.

Šiam darbui atlikti buvo sukonstruotas eksperimentinis stendas, kuris imituoja oru sklindančias kietąsias daleles sistemoje su išankstine akustine dalelių aglomeracija prieš dalelių matavimą. Pagrindinę įrenginio dalį sudaro: korpusas ir kietųjų dalelių dozavimo įranga; akustinio lauko generavimo dalis; akustinių parametrų matavimo dalis; duomenų kaupimo ir apdorojimo įranga; dalelių matavimo įranga - skenuojantis aerolio dalelių skaitiklis (angl. *Scanning Mobility Particle Sizer Spectrometer*, SMPS).

Šiame tyrime atlikta 12 akustinių eksperimentų matuojant aerolio dalelių dydžio (nm) pasiskirstymą esant skirtingoms sąlygoms. Tarp eksperimentų matuojamas aerolio dalelių dydžio pasiskirstymas

ne naudojant akustinės aglomeracijos technologijos (t.y. be akustikos). Kiekvieno eksperimento metu buvo keičiama įtampa (V), dažnis (kHz) bei garso dažnių intensyvumas (dB). Iš gautų rezultatų nustatyta, kad dalelių koncentracijos pagal dydį pasiskirstymas taikant akustines bangas ir be akustikos nepakitė arba pakito minimaliai daugelyje matavimo bandinių. Parinkus optimalią kombinaciją 137 dB, 200 V, 21.5 kHz nustatytas apie 30 % aerolio dalelių skaitinės koncentracijos sumažėjimas (1 pav.). Atlikus duomenims polinominės regresijos analizę nustatyta papildoma antra skaitinės koncentracijos moda, kurios vidutinis dalelių skersmuo yra apie 500 nm. Tai gali rodyti aerolio dalelių aglomeracijos efektą dalelėms jungiantis į didesnius dydžius. Atlikus tyrimą nustatyta, kad akustinės aglomeracijos technologija turi daugiau įtakos mažesnės nukleacinės modos dalelėms.



1 pav. Aerolio dalelių skaitinės koncentracijos ir skersmens pasiskirstymas taikant 137dB, 200V ir 21.5kHz išilginės akustikos parametrus taikant polinominės regresijos analizę.

Įgyvendinant projektą taršos mažinimui buvo specialiai sukurtas tyrimų stendas. Gauti rezultatai patvirtina, kad akustinės aglomeracijos stendas yra efektyvus ultrasmulkių aerolio dalelių skaitinės koncentracijos mažinimui. Nustatyta, kad sukurtas akustinių bangų stendas gali būti optimizuojamas skatinant platesnį ir novatoriškesnį transporto priemonių išmetamos oro taršos mažinimo sprendimų taikymą.

Reikšminiai žodžiai: aerolio dalelės, akustinė aglomeracija, oro tarša.

Šis darbas buvo finansuojamas EUREKA NETWORK projekto E!13639 ACOUSTIC (projekto Nr. 01.2.2-MITA-K-702-12-0003) lėšomis.

Literatūra

- [1] Leclercq, B. et al., Environmental pollution 243 (2018)
- [2] Zhou, Dong. et al., Powder Technology 289 (2016)
- [3] Riera, E. et al., Power Ultrasonics (2023)

Stabiliųjų anglies ir sieros izotopų pritaikymas KD_1 šaltinių identifikacijai ir atskyrimui COVID-19 pandemijos metu

Application of carbon and sulfur isotopes for the identification and partition of PM_1 pollution sources during the COVID-19 pandemic

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

¹Branduolinių tyrimų skyrius, fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

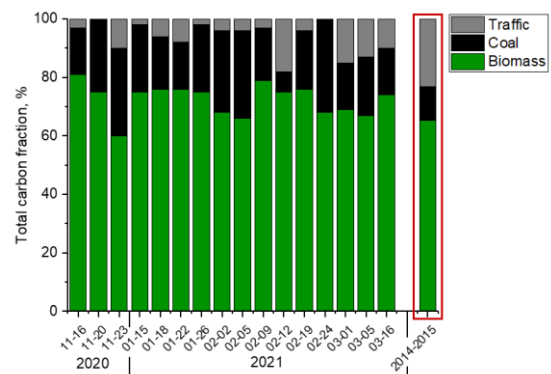
²Aplinkotyros skyrius, fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
laurynas.bucinskas@ftmc.lt

Atmosferos sulfatų ir anglies kietosios dalelės (KD_1 , dalelės su mažesniu nei $1 \mu m$ skersmeniu) susidaro vykstant įvairiems natūraliems ir antropogeninės veiklos procesams. Kietosios dalelės atlieka svarbų vaidmenį atmosferos chemijoje ir klimato kaitoje, taip pat, gali daryti neigiamą įtaką žmonių sveikatai [1, 2]. Miesto aerozolių šaltiniai yra elektrinės, transporto priemonių eismas, namų šildymas, biomasės deginimas ir kitos pramoninės emisijos. Taikant stabilųjų izotopų ir radioaktyviosios anglies analizės metodų derinį, galima išsamiai diferencijuoti anglies ir sieros aerozolių taršos šaltinius.

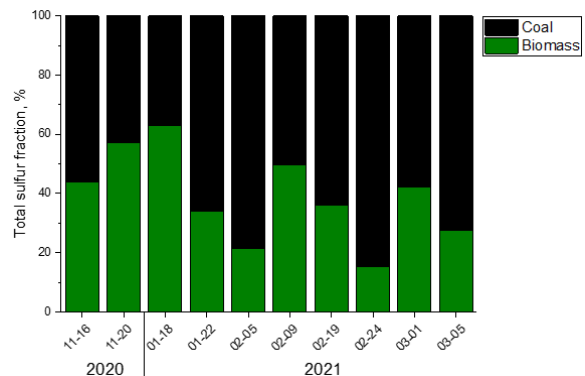
Šio darbo tikslas buvo pritaikyti stabilųjų izotopų ir radioanglies metodikas sulfatų ir anglies kietųjų dalelių šaltinių charakterizavimui miesto aplinkoje. Sieros ir anglies koncentracijos bei izotopinė sudėtis buvo išmatuotos KD_1 mėginiuose, paimtuose per laikotarpį nuo 2020-11-11 iki 2021-10-21 Vilniuje, Lietuvoje ant Fizinių ir technologijos mokslų centro stogo.

Buvo atlikta anglies ($^{14}C/^{12}C$, $^{13}C/^{12}C$) ir sieros izotopų ($^{34}S/^{32}S$) analizė, siekiant kiekybiškai įvertinti iškastinių ir neiškastinių emisijų KD_1 įnašus. Šaltinių charakterizavimas atskleidė tris pagrindinius anglingųjų KD_1 emisijos šaltinius (1 pav.): biomasės deginimą ($73 \pm 5 \%$), anglies deginimą ($21 \pm 6 \%$) ir transporto emisijas ($6 \pm 5 \%$). Anglies koncentracijos buvo tame pačiame ruože prieš COVID-19 karantiną kaip ir jo metu, tačiau pandemijos metu pakito anglies izotopų santykiai ($\delta^{13}C$) ir tirtų šaltinių pasiskirstymas. Transporto emisijos dalis buvo vidutiniškai 2,3 karto mažesnė karantino metu.

Sulfatų KD_1 svarbiausieji šaltiniai (2 pav.) buvo anglies deginimas ($60 \pm 10 \%$) ir biomasės deginimas ($40 \pm 10 \%$). Tačiau žiemą, biomasės deginimas tampa vyraujančiu vietiniu sulfatų KD_1 šaltiniu Lietuvoje, susijusiu su padidėjusia namų ūkio šildymo veikla. Šiame darbe, taip pat, buvo atsižvelgta į oro masių kilmę, kad būtų galima detaliau interpretuoti izotopų sudėties pokyčius ir KD_1 šaltinių indėlius.



1 pav. Transporto, biomasės ir anglies deginimo emisijų anglingųjų KD_1 indėliai. Raudonai pažymėta 2014 – 2015 metų šaltinių frakcijos [3].



2 pav. Transporto, biomasės ir anglies deginimo emisijų sieros KD_1 indėliai.

Reikšminiai žodžiai: kietosios dalelės, stabilieji izotopai, anglis, radioanglis, sierra.

Literatūra

- [1] C. A. Pope ir D. W. Dockery, "Health effects of fine particulate air pollution: Lines that connect", J. Air Waste Manag. Assoc., t. 56, nr. 6, 2006.
- [2] C. Tomasi, C. Lanconelli, M. Mazzola ir A. Lupi, "Aerosol and Climate Change: Direct and Indirect Aerosol Effects on Climate", *Atmospheric Aerosols*, 2016.
- [3] I. Garbarienė, J. Šapolaitė, A. Garbaras, Ž. Ežerinskis, M. Pocevičius, L. Krikščikas, A. Plukis ir V. Remeikis. „Origin identification of carbonaceous aerosol particles by carbon isotope ratio analysis,” *Aerosol Air Qual Res*, 2016, doi: 10.4209/aaqr.2015.07.0443.

Metinė anglies turinčių aerozolio dalelių kaita vertinant per izotopinės sudėties prizmę

Yearly variation of carbonaceous aerosols through isotopic composition view

Agnė Mašalaitė¹, Inga Garbarienė¹, Andrius Garbaras¹, Justina Šapolaitė¹, Žilvinas Ežerinskis¹, Laurynas Bučinskas¹, Ulrike Dusek² and Vidmantas Remeikis¹

¹State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nuclear Research, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania

²Centre for Isotope Research (CIO), Energy and Sustainability Research Institute Groningen (ESRIG), University of Groningen, Groningen, 9747AG, the Netherlands
agne.masalaite@ftmc.lt

Atmospheric aerosol particles play an important role in many environmental processes, influencing climate change processes and human health. The stable carbon isotope (¹³C) and ¹⁴C have the potential to give insights into the sources and processing of organic aerosol. However, the use for source apportionment has been somewhat limited, because the ¹³C source signatures vary and show some overlap. The ¹⁴C analysis is a powerful tool for distinguishing between fossil and non-fossil (contemporary) carbonaceous aerosol sources. The impacts of urban and coastal aerosols are diverse and far-reaching. Variation in the local pollution sources during the seasons changes drastically, and all the studies are highly desirable to provide a complete picture of air pollution for a given area. This study explores a dataset of year-round collected aerosol particles (PM₁) at urban and coastal areas. This is the first study, where annual variation of isotopic composition ($\delta^{13}\text{C}$) and fraction of contemporary carbon (f_c) revealed the main pollution sources and manifests their utility in aerosol research. The additional data leads to a comprehensive analysis of aerosol particles and a description of the seasonal variation.

72 filters from the urban site and 103 from the coastal site were measured to receive the seasonal variations at both sites. The stable carbon isotope ratio values of total carbon were determined using an elemental analyzer “Flash EA 1112” coupled to an isotope ratio mass spectrometer “Thermo Finnigan Delta Plus Advantage” (EA-IRMS) via a ConFlo III interface. The ¹⁴C/¹²C ratio (radiocarbon) of samples with sufficient carbon content (68 filters) was analyzed using a single stage accelerator mass spectrometer (SSAMS) “NEC”.

The time series of the monthly averaged $\delta^{13}\text{C}_{\text{TC}}$ values of aerosol particles from urban and coastal sites exhibited a pronounced seasonal cycle (Fig. 1). Distinct seasonal variations were observed in $\delta^{13}\text{C}_{\text{TC}}$, with enrichment in winter and depletion in spring indicating a shift among emission sources in urban site. The situation is slightly different in coastal site. The variation of isotopic composition for individual filters was within 3 ‰ difference between the minimum and maximum value at coastal site but variation between averaged values of the month was only by 1.6 ‰.

We demonstrate with an extensive source study that in Lithuania and likely other Eastern European regions, the

seasonal variability of TC with high winter maxima, revealed the strong influence of residential heating with wood and pollutants from long-range air mass flow from southern countries (coal combustion). Air mass back trajectory analysis revealed that South and Southeaster continental air masses are more loaded with higher levels of TC than northerly air masses.

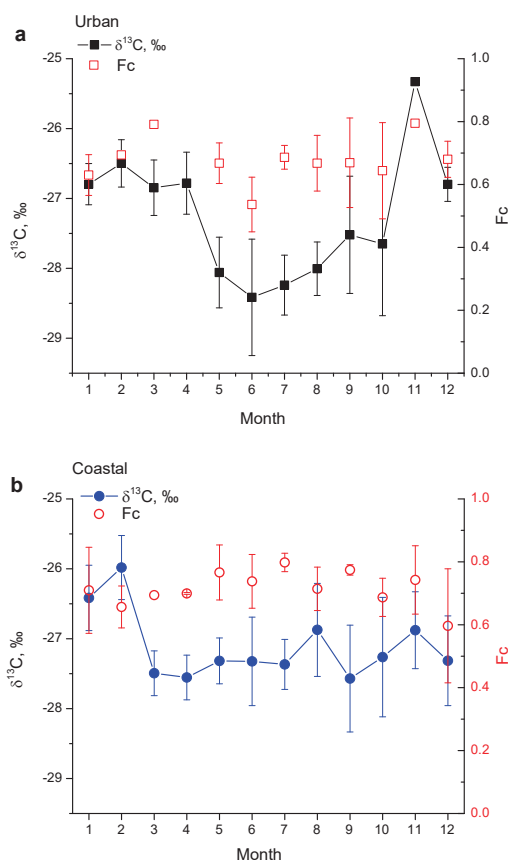


Figure 1. Yearly variation of stable carbon isotopic composition and f_c at urban (a) and coastal (b) sites.

Keywords: isotope, carbonaceous aerosol, IRMS, pollution.

„Nulinio taško“ ^{137}Cs bei Pu izotopinės sudėties foniniai tyrimai radiacinei aplinkai Rytų Lietuvoje įvertinti

"Zero point" ^{137}Cs and Pu Isotopic Composition Background Studies to Assess the Radiation Environment in Eastern Lithuania

Andrius Puzas¹, Christian Bernhardtsson², Guillaume Pédechontaa-Hiaa², Mattias Jönsson², Sören Mattsson², Nikolaj Tarasiuk¹, Diana Adlienė³, Ieva Jogaitė³, Marina Konstantinova¹, Rasa Gvozdaitė¹, Rūta Druteikienė¹, Vida Juzikienė¹, Vidmantas Remeikis¹

¹ – Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, Vilnius, LIETUVA

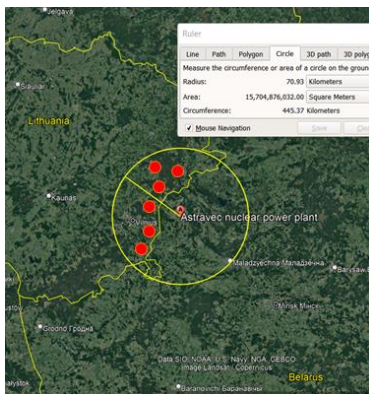
² – Lundo universitetas, Carl-Bertil Laurells 9, Malmė, ŠVEDIJA

³ – Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, K. Donelaičio g. 73, Kaunas, LIETUVA

andrius.puzas@ftmc.lt

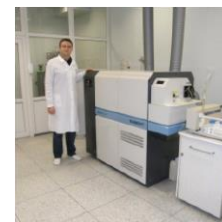
Radionuklidų koncentracijos aplinkoje nustatymas yra žingsnis užregistruojant neįprastus įvykius bei galimai įvykusias avarijas branduoliniuose objektuose. Radionuklidai gali nukeliauti šimtus kilometrų nuo savo šaltinio ir esant palankioms meteorologinėms sąlygoms, gali būti aptinkami ore ir nusėdę ant žemės.

Norint nustatyti ir įvertinti indėlį į antropogeninių radionuklidų kiekį aplinkoje ir tvirtai atskirti jį nuo ankstesnių pasaulinių branduolinių bandymų ar branduolinių objektų emisijų, būtina nustatyti antropogeninių radionuklidų foninį „nulinį tašką“. Tai ypač svarbu aplink esamus šaltinius, pvz. atominės elektrines. Šiame darbe radiocheminis radionuklidų atskyrimas, alfa, gama ir masės spektrometrijos matavimo metodai buvo sujungti, siekiant nustatyti antropogeninių radionuklidų koncentracijas ir sudėtį dirvožemio mėginiuose 70 km spinduliu aplink Baltarusijos atominę elektrinę Astravę Lietuvos teritorijoje (1 pav.).



1 pav. Dirvožemio ėminių ėmimo vietos

Gama spektrometriniai matavimai buvo atlikti naudojant naujausią alfa spektrometrijos įrangą, o gama spektrai buvo užregistruoti naudojant HPGe koaksialinį detektorių. Radionuklidų izotopų santykiai buvo išmatuoti magnetinio lauko sektoriaus masių spektrometru „Element 2“ kartu su didelio jautrumo APEX mėginių įvedimo sistema (2 pav.).



2 pav. Magnetinio lauko sektoriaus „Element 2“ masių spektrometras

Šiame darbe $^{137}\text{Cs}/^{239,240}\text{Pu}$, $^{238}\text{Pu}/^{239,240}\text{Pu}$, $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$ izotopinių „pirštų atspaudų“ vertės atskleidė, kad ankstesni šaltojo karo laikų branduolinio ginklo bandymų iškritos vyrauja daugumoje ėginių ėmimo vietų 70 km spinduliu aplink Astravę atominę elektrinę Lietuvos teritorijoje.

Reikšminiai žodžiai: radionuklidai, radioekologija ^{137}Cs , Pu , masių spektrometrija.

Apšviečiant aerolio daleles miesto aplinkoje: juodosios anglies šaltinių kilmės atskyrimas ir optinis aerolio dalelių klasifikavimas Vilniuje ir Varšuvoje šiltuoju sezonu 2022

Shedding light on urban aerosols: black carbon source apportionment and identification of aerosol types in Vilnius and Warsaw during the warm season of 2022

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

¹SRI Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių av. 231, 02300 Vilnius

²Institute of Geophysics, Faculty of Physics, University of Warsaw, Ludwika Pasteura 5, 02-093 Warsaw

agne.minderyte@ftmc.lt

The driving force behind our work was the quest to uncover aerosol optical characteristics, namely absorption, scattering and single scattering albedo (SSA), black carbon (BC) mass concentration, and source contribution in two neighbouring capitals Vilnius and Warsaw.

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

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

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

The study provides a better perception of prevailing aerosol types, their optical characteristics and the impact on atmospheric radiative transfer which have not been addressed previously during the warm season in urban environments in the region of Lithuania and Poland.

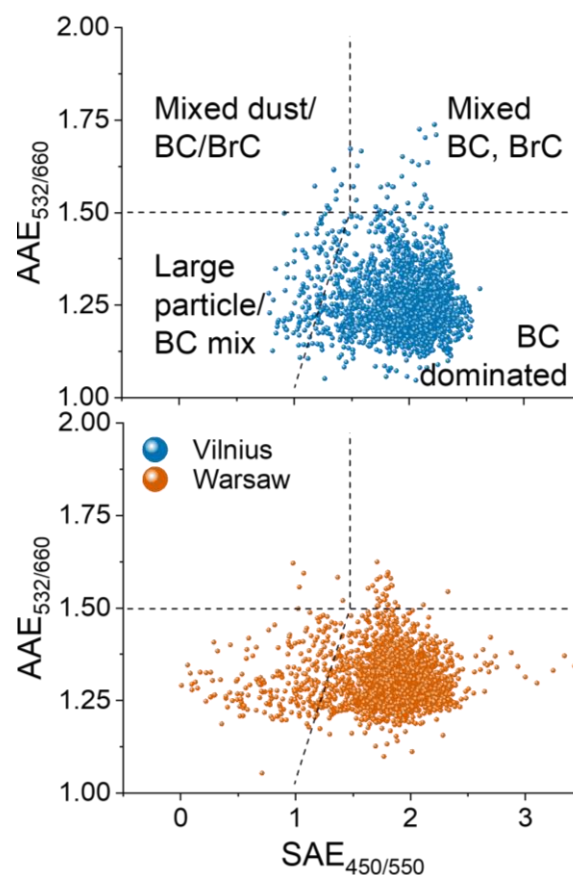


Figure 1. Relationship between the AAE and SAE in Vilnius and Warsaw during the warm season of 2022.

The optical division scheme was proposed by Cappa et al. [2].

Keywords: Optical properties, absorption Ångström exponent, scattering Ångström exponent, Black Carbon, Source Apportionment.

References

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

Aerolio dalelių dinamikos tyrimai uždaroje šaudykloje

Aerosol particle dynamics studies in a closed shooting range

Andrius Garbaras^{1,2}, Vadimas Dudoitis¹, Inga Garbarienė¹, Vaida Vasiliauskienė^{2,3}, Laurynas Bučinskas¹, Steigvilė Byčenkienė¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo g. 5A, LT-10322 Vilnius

³Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

andrius.garbaras@ftmc.lt

Kariškiams, policijos pareigūnams, apsaugos darbuotojams, šauliams šaudyti iš kovinių ginklų šaudyklose yra profesinė būtinybė. Taip pat pramoginės šaudyklos yra populiarios daugelyje šalių. Uždara šaudykla – tai patalpa, kurioje gali vykti šaudmenų naudojimo mokymai. Šiuo metu Lietuvoje veikia 34 šaudyklos, iš kurių 21 atvira ir 13 uždarojo tipo. 2007 m. pasaulyje buvo apie 650 mln. civilių ginklų ir 200 mln. šaunamųjų ginklų priklausė nacionalinėms valstybėms 2007 m. visame pasaulyje (SAS, 2007).

Šūvio metu susidaro sudėtingas cheminių medžiagų, kietųjų dalelių (PM) mišinys ir išsiskiria ne tik pagrindinės degimo dujos, tokios kaip anglies dioksidas (CO₂) ir vandens garai (H₂O), bet ir anglies monoksidas (CO), vandenilio cianidas (HCN), amoniakas (NH₃), azoto oksidai (NO_x), sieros dioksidas (SO₂), vandenilio chloridas (HCl). Be to, didžiulį kiekį aerozolių dalelių sudaro suodžiai ir metalai, pavyzdžiui, švinas (Pb), varis (Cu), cinkas (Zn) ir geležis (Fe), taip pat nedideli kiekiai chromo (Cr) ir molibdeno (Mo) yra išmetami į patalpų aplinką dėl šaudymo veiklos. Metalų turinčios dalelės susidaro dėl dilimo tarp kulkos ir šautuvo vamzdžio [1].

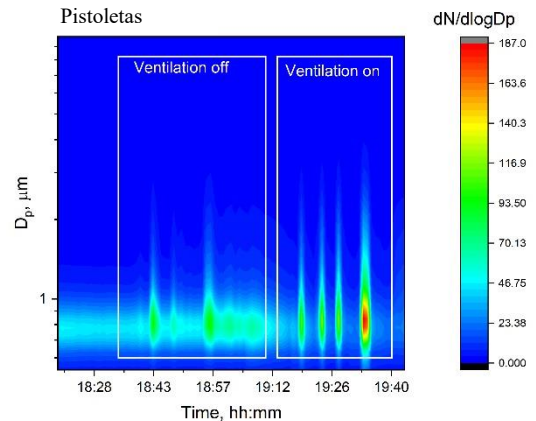
Nustatyta, kad šaudymo metu kietųjų dalelių kiekis ore šaudyklose yra 100–1000 kartų didesnis nei fono lygis [2]. KD lygis priklauso nuo daugelio veiksnių, iš kurių svarbiausi yra naudojami šoviniai ir kalibras, šūvių skaičius ir ventiliacijos kokybė uždaroje šaudyklose.

Šio tyrimo metu uždaro tipo šaudykloje buvo šaudoma iš pistoleto (kalibras 9x19) ir pusiau automatinio šautuvo (kalibras 5,56*45). Eksperimento metu buvo atliekami šūviai vienodais intervalais, kad galima būtų palyginti skirtingų ginklų emisijas.

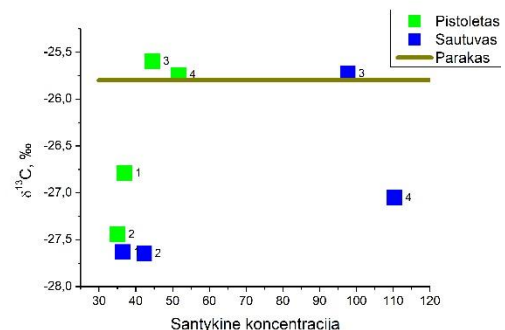
Pagrindinis tyrimo tikslas – įvertinti ventiliacijos įtaką skirtingo dydžio aerozolių dalelių dinamikai uždaroje šaudykloje.

Tyrimo metu naudoti matavimo prietaisai: Aerodinaminis aerozolių spektrometras (APS, TSI 3321), kaskadinis impaktorius (4 kaskadų), izotopų santykio masių spektrometras (DeltaV Advantage).

Nustatyta, kad ventiliacija turi įtakos dalelių koncentracijai šaudymo metu (1 pav.). Išjungus ventiliaciją, šaudymo metu susidariusios dalelės išlieka ore, tuo tarpu įjungus ventiliaciją, pasiekiamos foninės vertės tarp šaudymo epizodų.



1 pav. Aerozolių dalelių koncentracijos kaita šaudant pistoletu esant skirtingiems vėdinimo režimams.



2 pav. Parako ir aerozolių dalelių $\delta^{13}\text{C}$ vertės. Skaičiai prie simbolių žymi dalelių dydžio intervalą (1-[100-10 μm]; 2-[10-2,5 μm]; 3-[2,5-1 μm]; 4-[<1 μm]).

Parako ir šaudymo metu susidariusių įvairaus dydžio aerozolių dalelių $\delta^{13}\text{C}$ vertės buvo panašios mažų dalelių intervale (2 pav. taškai 3, 4, KD<2,5 μm). Tai rodo, kad šios dalelės buvo išmestos šūvio metu, ir jos gali būti siejamos su nesudegusiomis parako sudedamosiomis dalimis. Didesnio kalibro ginklas generavo didesnę KD koncentraciją.

Reikšminiai žodžiai: Aerozolių dalelės, KD2,5, šaudykla.

Literatūra

[1] CM Grabinski et al. J Occup Environ Hyg. 14: 461–472 (2017).

[2] G. Sujetovienė, J.J. Česnyaitė. Toxicol. Environ. Health. 84, 273–278 (2021).

Radionuklidų savitųjų aktyvumų tyrimas Baltijos jūros pakrantės smėlio bandiniuose

Study of Specific Activities of Radionuclides in Sand Samples from the Baltic Sea Coast

Gražina Grigaliūnaitė-Vonsevičienė ir Artūras Jukna

Fizikos katedra, Vilniaus Gedimino Technikos Universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

grazina.grigaliunaite-vonseviciene@vilniustech.lt

Darbe ištirti savitieji aktyvumai pagrindinių gamtinės kilmės radionuklidų kalio (^{40}K), radžio (^{226}Ra), torio (^{232}Th), nustatyti Baltijos jūros neužliejamame ir užliejamame pakrantės smėlyje, Kuršių Nerijoje. Vidutiniai savitieji aktyvumai jūros vandeniui neužliejamoje dalyje (ant smėlio kopos viršaus) gauti 170 Bq/kg, 14 Bq/kg ir 9 Bq/kg, atitinkamai ^{40}K ($t_{1/2} = 1,248 \cdot 10^9$ metų), ^{226}Ra ($t_{1/2} = 1599$ metų) ir ^{232}Th ($t_{1/2} = 14 \cdot 10^9$ metų), sauso smėlio bandinių atvejais. Gautos aktyvumų vertės ištirtuose bandiniuose pastebimai skiriasi nuo gautų kitose, nei Lietuva vietovėse; pvz. Kipre, Viduržemio jūros pakrantėje jos siekia 467 Bq/kg ir 20 Bq/kg, ir 18 Bq/kg [1] sauso smėlio bandinių atvejais. Nustatytas ^{40}K ir ^{232}Th radionuklidų savitasis aktyvumas taipogi mažesnis už šių radionuklidų aktyvumų vidutines vertes nustatytas Lietuvoje ir paskelbtas UNSCEAR2000 [2].

Pastaruosius dešimtmečius nerimą keliantis Baltijos jūros vandens užterštumas [3] įtakoja ^{40}K , ^{226}Ra , ^{232}Th radionuklidų koncentraciją. Dėl jūroje vykstančio vandens maišymosi (vandens srovių, vėjų vyraujančių kryptų bei liūčių) radionuklidų savitasis aktyvumas Baltijos jūros vandenyje nuolat kinta. Tad tikrasis teršalų kiekis gali būti nustatytas tik intensyvinant periodinius teršalų koncentracijos jūros vandenyje tyrimus arba, kartu atliekant tyrimus ir bangomis užliejamos jūros pakrantės smėlio, kuriame įstringa vandenyje netirpios dalelės, su prie jų prikibusiais radionuklidais.

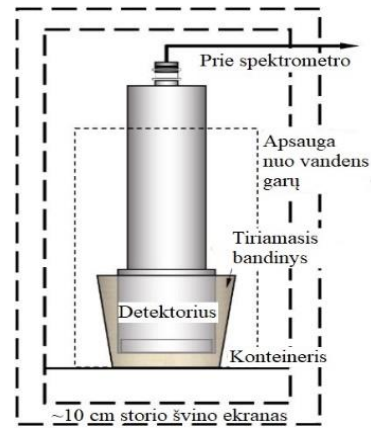
Darbe ištirti bandiniai, buvo džiovinami 3-4 val. krosnyje esant 500-600 K temperatūrai, o atvėsinus per ~2-3 val. iki 320 K, nedelsiant įdėti į gamą spektrometrą taip, kad bandinys pilnai apgaubtų cilindro formos gama spindulių detektorius (1 pav.). Kiekvieno bandinio spinduliuotę NaI $76 \times 76 \text{ mm}^2$ ploto detektorius registravo 72 val. nuo 30 keV iki 1670 keV energijų intervale.

Radionuklidų savitieji aktyvumai skaičiuoti iš lygties [1, 4]:

$$A = \left(\frac{S/t_1 - (S_f/t_f)}{m\epsilon\eta} \right), \quad (1)$$

čia A – radionuklido savitasis aktyvumas smėlio bandinyje (Bq/kg), S , S_f – radionuklido ir fono spinduliuotės spektre užregistruotas smailės plotas atitinkamai (imp); t_1 , t_f – radionuklido bandinyje ir foninės spinduliuotės aktyvumo matavimo laikas (s) atitinkamai; η – radionuklido spinduliuotės energinė kvantinė išėiga; ϵ – spektrometro detektoriaus efektyvumas ir m – smėlio bandinio masė (kg).

Eksperimentiniai rezultatai patvirtino, jog jūros



1 pav. Siekiant didesnio matavimų rezultatų tikslumo, smėlio bandinys neplonesniu nei 2,5 cm storio sluoksniu gaubia gama spektrometro detektorius.

vandeniui užliejam pakrantės smėlio bandiniuose, gautos pastebimai didesnės vidutinės savitojo aktyvumo vertės, lyginant su smėliu ant kopų viršaus (Neužliejamų jūros vandeniui). Gauti tyrimų rezultatai parodyti 1 lentelėje.

1 lentelė. Radionuklidų vidutiniai savitieji aktyvumai ant kopos A1 ir pakrantėje A2, sauso smėlio bandinių atveju.

Radionuklidai	A1(Bq/kg)	A2(Bq/kg)
^{232}Th	9	15
^{40}K	170	310
^{226}Ra	14	16

Verčių vidutinis 33 % skirtumas gali būti paaiškintas smėlio kopų erozija, sukelta kritulių, vėjo ir pakrantės smėlio pernaša bangomis ir/ar nulemtas žmonių veiklos, pvz.: dirbtinai atstatant eroduotą smėlėtą pakrantę.

Savitojo aktyvumo natūraliose ekosistemose kitimas leidžia vertinti taršos poveikį aplinkai ir galimų prižasčių pokyčius.

Reikšminiai žodžiai: gama spektrometrija, savitasis aktyvumas, Kuršių Nerija.

Literatūra

- [1] S. Akbar, F.Mirekhtary, Marine Pollution Bulletin. 154, 111041 (2020).
- [2] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation. (2000). Report to the general assembly, with scientific annexes. United Nations Publications, Annex B.
- [3] HELCOM (2010). Balt. Sea Environ. Proc. 120B.
- [4] A. Abasi, Radiat. Prot. Dosim. 155,335 (2013).

Proporcinguomo daugiklių metodo taikymai metalinių radiaktyviųjų atliekų charakterizavimui PREDIS projekte

Scaling factors approach applications for metallic radioactive waste in PREDIS

Rita Plukiene¹, Artūras Plukis¹, Kristina Mikalauskiene¹, Laurynas Juodis¹, Anastasia Savidou², Marie Charlotte Bornhöft³, Eileen Langegger³, Jose Luis Leganés Nieto⁴, Filippo Gagliardi⁵

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania,

²National Centre of Scientific Research "Demokritos" (NCSR), Patr. Gregoriou E & 27 Neapoleos Str, 15341 Agia Paraskevi, Greece

³DMT GmbH & Co. KG, Friedrich-Ebert-Damm 145, 22047 Hamburg, Germany

⁴ENRESA, C. de Emilio Vargas, 7, 28043 Madrid, Spain

⁵NUCLECO, via Anguillarese, 301 - 00123 Roma, Italy

rita.plukiene@ftmc.lt

The WP4 in PREDIS project is devoted to metallic radioactive waste (MRW) characterization and classification, treatment and conditioning and also volume reduction activities. The methodology for characterization of the metallic waste is similar to all reactor types and is usually based on measurements, modeling and scaling factor (SF) application. Pre-dismantling classification of MRW using modelling allows preliminary evaluation of the size of controlled areas and expected activities, while SF approach is used for classification of the low activity waste and materials (LLW, VLLW, Exempt Waste) [1]. Many of the important long-lived radionuclides contained in MRW are difficult to measure (DTM) low energy gamma, beta or alpha emitting nuclides. Identification of DTM nuclides using complex radiochemical analysis is costly, time consuming and not practical for large numbers of waste packages. SFs between the DTM nuclides and easy to measure (ETM) nuclides can be applied for evaluation of the radioactive inventory. Briefly, the SF is based on the empirical dependence between specific activities of nuclides in the investigated sample when the main pollution source is the same: $k_i = A_i/A_{key}$, where A_i is the specific activity of the DTM radionuclide, A_{key} is the specific activity of the ETM key radionuclide, k_i is a constant called the scaling factor. The scaling factors of DTM radionuclides are determined by the measurement runs, statistically processing the results according to the correlation of the investigated radionuclide with the key nuclides. After establishing of SF, the inventory of the DTM nuclides in a waste package can be derived based upon external gamma radiation measurements of ETM. Usually the ^{60}Co is used as the key nuclide. The activity concentrations of the DTM nuclides are then calculated according to the functional relationship established between the activity concentration of ^{60}Co and the DTM nuclides (such as for example ^{63}Ni). For fission products (FPs) there was no choice possible other than ^{137}Cs . Alternatives, such as ^{94}Nb could be used in some metallic waste. A suitable ETM for alpha emitters is ^{241}Am , which usually is used as key nuclide for alpha emitters and transuranium elements. Optimized Nuclide Vector (NV) – the result of SF application for MRW stream for

selected disposal site is obtained by analyzing and systemizing the information about MRW streams, identifying the optimal list of relevant radionuclides, describing inter-correlations between ETM and DTM nuclides including multivariate analysis of the already measured data at the sites and numerical analysis of activation and contamination parts as shown in Fig. 1. Finally, according to the level of MRW activation the waste management route can be selected: management as radioactive waste, unconditional clearance, clearance after decontamination e.g. sand blasting, clearance and melt, melt and clearance etc. [2].

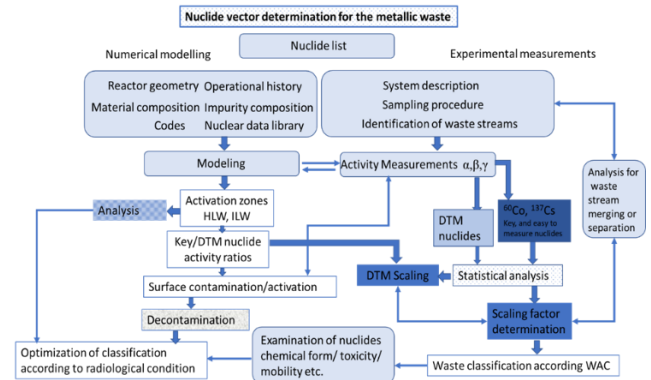


Fig 1. Optimized scheme of Nuclide Vector determination.

Keywords: metallic radioactive waste, scaling factors, nuclide vector, easy-to-measure (ETM) radionuclides, difficult-to-measure (DTM) radionuclides.

This project has received funding from the Euratom research and training programme 2019-2020 under grant agreement No 945098.

Reference

- [1] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Classification of Radioactive Waste, IAEA Safety Standards Series No. GSG-1, IAEA, Vienna (2009).
- [2] [4] M.-Ch. Bornhoeft et al., Int. Conf. on Rad. Waste Management: Solutions for a Sustainable Future, IAEA Headquarters Vienna, Austria, 15-19 May 2023.

Nedestrukcinis radioaktyviųjų kietųjų atliekų charakterizavimas pasitelkiant gama spektrometrinius Komptono/fotosmailės santykio matavimus bei MCNP6 modeliavimą

Non-destructive radioactive solid waste characterization using gamma spectrometric Compton/photopeak ratio measurements and MCNP6 modeling

Kristina Mikalauskienė, Marina Konstantinova, Elena Lagzdina, Darius Germanas, Rita Plukienė, Artūras Plukis, Arūnas Gudelis ir Vidmantas Remeikis
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
kristina.mikalauskiene@fmc.lt

Viena iš svarbių užduočių sklandžiam ir sėkmingam atominės elektrinės eksploatavimo nutraukimo procesui yra radioaktyviųjų atliekų tvarkymo optimizavimas, taikant jų grupavimą ir atskyrimą [1]. Siekiant sumažinti atliekuose šalinamų metalinių radioaktyviųjų atliekų kiekį, turėtų būti taikomi veiksmingi charakterizavimo, dezaktyvavimo ir/arba lydymo procesai. Norint efektyviai apibūdinti labai mažo aktyvumo metalo atliekas, paviršinių užterštumą reiktų nustatyti paprastu nedestrukciniu γ -spektrometriu matavimu arba derinant dozės galios/ γ -spektrometrijos matavimus.

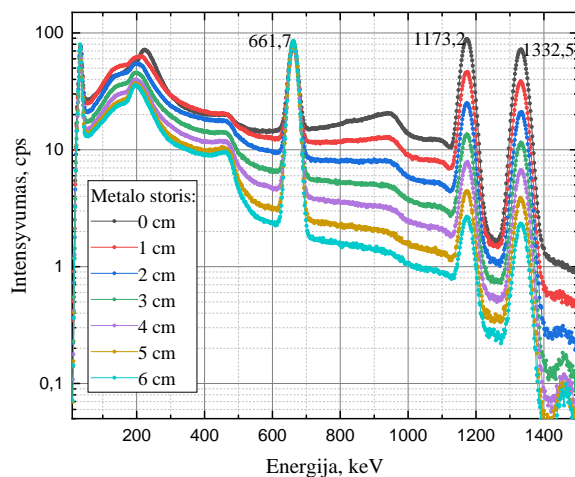
Šio darbo tikslas – ištirti ^{60}Co (korozijos produktas, radionuklidai daugiausiai susidarantis neutronų aktyvacijos metu) ir ^{137}Cs (kuro dalijimosi produktas būdingas paviršinei taršai) šaltinių γ spektrus skirtingomis metalinių atliekų ekranavimo sąlygomis. Siekta išsiaiškinti parametrus, kuriuos būtų galima panaudoti paviršiaus ir tūrio aktyvumui atskirti pasitelkiant nedestrukcinis gama spektrų matavimus bei MCNP6 modeliavimą [2].

Darbe atlikti ^{60}Co ir ^{137}Cs šaltinių γ spektrų tyrimai esant skirtingam metalinių konstrukcijų (radioaktyviųjų metalinių atliekų analogo) storiams naudojant skirtingos skiriamosios galios detektorius – du HPGe (angl. *high purity germanium*) detektorius ir cerio bromido CeBr_3 scintiliacinį detektorių. HPGe detektoriai pasižymi dideliu santykinu efektyvumu (daugiau nei 25%) bei labai gera skiriamąja geba (2.0 keV ties 1.332 MeV). CeBr_3 detektorius, nors ir savo skiriamąja geba neprilygsta HPGe detektoriams, tačiau yra lengvas ir transportabilus, o jo skiriamosios gebos pakanka ^{60}Co ir ^{137}Cs radionuklidų nustatymui bei kitų radiologinio monitoringo užduočių atlikimui.

Eksperimentiniai rezultatai su skirtingų storių metalinėmis plokštelėmis parodė, kad galima atskirti paviršiuje esantį ^{60}Co šaltinį nuo tūrinės aktyvacijos (viduje esančio šaltinio). Komptono sklaida didėja (1 pav.) storėjant metalo sluoksniui. Ekranavimo storiumi padidėjus 1 cm, Komptono sklaidos/fotosmailės santykis padidėja 5-10 proc.

Lyginant išmatuotų ir sumodeliuotų taškinių ^{60}Co ir ^{137}Cs šaltinių γ spektrus bei Komptono sklaidos krašto ir fotosmailės santykius, gautas geras eksperimentinių ir modeliavimo rezultatų atitikimas. Tokia spektrinės analizės metodika leidžia pagal fotosmailės ir Komptono sklaidos krašto intensyvumus ir jų santykius spręsti apie radionuklidų pasiskirstymą metalinėse atliekose. Ši metodika gali būti panaudojama nustatant realių

radioaktyviųjų metalinių atliekų mėginių paviršiaus užterštumą ar tūrinę taršą radionuklidais, o tai ypač naudinga rūšiuojant radioaktyviuosius atliekas, vertinant jų priimtumo kriterijus galutinio saugojimo vietose ir kt.



1 pav. Taškinių ^{137}Cs ir ^{60}Co šaltinių Komptono sklaidos kraštų ir fotosmailių kitimas CeBr_3 detektoriuje esant skirtingo storio metalo ekranavimui.

Reikšminiai žodžiai: γ spektrometrija, Komptono sklaidos kraštas, Komptono/fotosmailės santykis

Literatūra

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

Šie tyrimai iš dalies buvo finansuoti iš 2019–2020 m. Euratomo mokslinių tyrimų ir mokymo programos pagal dotacijos sutartį Nr. 945098.

RADIONUKLIDŲ SUSIDARYMO AUKŠTO ĮSODRINIMO BRANDUOLINIO REAKTORIAUS KURE VERTINIMAS

EVALUATION OF RADIONUCLIDE PRODUCTION IN HIGHLY ENRICHED NUCLEAR REACTOR FUEL

Džiugas Vyšniauskas^{1,2}, Rita Plukienė¹, Artūras Plukis¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
dziugas.vysniauskas@ff.stud.vu.lt

Modeliniu būdu charakterizuojant radioaktyvias atliekas, susidariusias branduolinio objekto eksploataavimo metu, yra labai svarbus tikslus šaltinio aprašymas. Pasitaiko situacijų, kai turima reaktoriaus, jame naudoto branduolinio kuro bei konstrukcinių medžiagų informacija, o taip pat eksploatacijos istorija, nėra tiksliai žinoma. Tačiau vis tiek tenka kaip nors įvertinti tikėtinas susidariusių nuklidų koncentracijas ir aktyvumus bei paklaidas, nulemtas netiksliai žinomų reaktoriaus veikimo parametrų. Pasinaudojus skaitiniais metodais ir varijuojant šiais netiksliai žinomais parametrais gaunamas nuklidų aktyvumų intervalas, iš kurio paprastai pasirenkamos didžiausios, konservatyvų radioaktyviųjų atliekų tvarkymo scenarijų atitinkančios, aktyvumų vertės. Tai būtina saugiam ir efektyviam tolimesniam radioaktyviųjų atliekų tvarkymui bei utilizacijai.

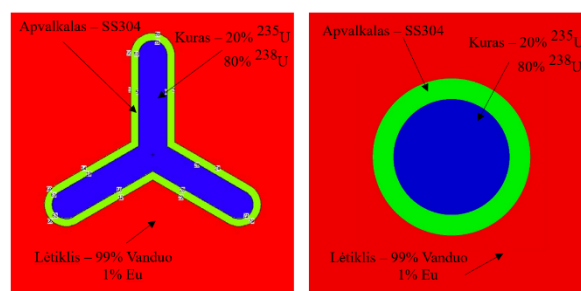
Nuklidinės sudėties modeliavimui naudojami skaitiniai metodai – deterministinis diferencialinių lygčių sprendimas bei stochastinės Monte Karlo simuliacijos. Pastaruoju metu, plačiai taikomi hibridiniai metodai [1], kai neutronų srautas ir jų sąveika su medžiaga įvertinama stochastiniais būdais, o gauti rezultatai panaudojami tiksliau įvertinti kuro evoliuciją deterministiniais metodais. Neutronų sąveikos skerspjūviai yra itin svarbūs norint atlikti tikslius panaudoto branduolinio kuro ar reaktoriaus konstrukcijų aktyvacijos skaičiavimus. Pirmu artėjimu, mikroskopiniai neutronų sąveikos skerspjūviai yra pastovūs, t. y. funkcija nuo neutronų energijos. Tačiau iš eksperimentinių duomenų žinoma, kad sąveikos skerspjūvių vertės nėra konstantos, jie priklauso nuo temperatūros, kuro sudėties ir net rinklės geometrinių parametrų [2].

Šiame darbe keliais aspektais (kuro elementų geometrijos, medžiagų sudėties ir reaktoriaus veikimo parametrų įtakos) vertinamas buvusios Paldiskio karinės mokomosios bazės demonstracinių povandeninių laivų aukšto įsodrinimo branduolinio reaktorių kuro k_{eff} ir nuklidinės sudėties šaltinis. Šie reaktoriai skirti povandeniniams laivams ir galimai turėjo nestandartinę kuro elementų geometriją [3]. Darbo metu nagrinėti šie pagrindiniai reaktoriaus bei kuro elementų parametrai: kuro elemento geometrija (trišakė ir cilindrinė žr. pav. 1 ir 2) ir europio neutronų sugėriklio strypo skersmuo aukšto įsodrinimo reaktoriaus aktyviojoje zonoje.

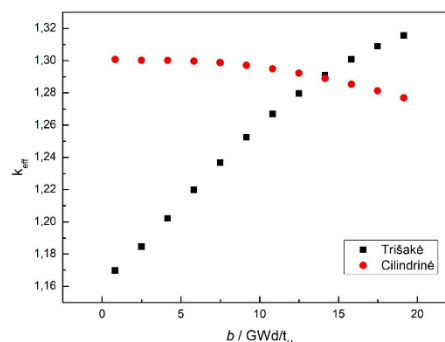
Modeliavimui pasirinktų reaktorių simuliacija buvo atliekama deginant kurą etapais – reaktorių veikė 6 ciklus po 37 dienas 90 MW galia. Po to sekė 14528 dienų

(~40 m.) aušinimo laikotarpis. Pagal turimus duomenis, tai galėtų būti reali reaktoriaus eksploatacijos istorija, turint omenyje reaktoriaus naudojimą mokymo tikslais.

Skaičiavimams atlikti panaudoti du programinės įrangos paketai – SCALE bei MCNP. Gauti rezultatai buvo palyginti su viešai prieinamais duomenimis apie tiriamus objektus.



1 pav. Povandeninio laivo reaktoriaus kuro elemento geometrijos variantai. Kairėje – trišakė, dešinėje – cilindrinė.



2 pav. Neutronų daugėjimo koeficiento priklausomybė nuo išdegimo skirtingoms kuro konfiguracijoms.

Reikšminiai žodžiai: kuro evoliucija, branduolinis kuras, kompiuterinis modeliavimas

Literatūra

- [1] John C. Wagner et al., *Review of Hybrid (Deterministic/Monte Carlo) Radiation Transport Methods, Codes, and Applications at Oak Ridge National Laboratory* (Oak Ridge National Laboratory, 2011)
- [2] Weston M. Stacey, *Nuclear Reactor Physics* (Wiley-VCH, Weinheim, 2018)
- [3] Ole Reistad, Povl L. Ølgaard, *Russian Nuclear Power Plants for Marine Applications* (Nordic nuclear safety research, Roskilde, 2006)

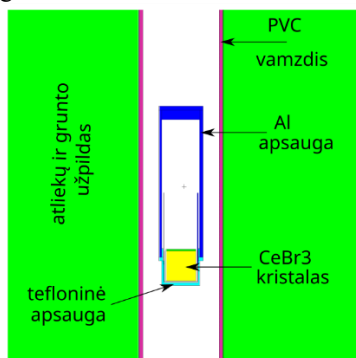
Didesnio efektyvumo CeBr₃ detektoriaus panaudojimas radioaktyviųjų atliekų savitojo aktyvumo matavimams in-situ

Application of CeBr₃ detector with improved effectiveness for in-situ measurement of radioactive waste specific activity

Laurynas Juodis, Darius Germanas, Artūras Plukis, Rita Plukienė, Vidmantas Remeikis
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
laurynas.juodis@ftmc.lt

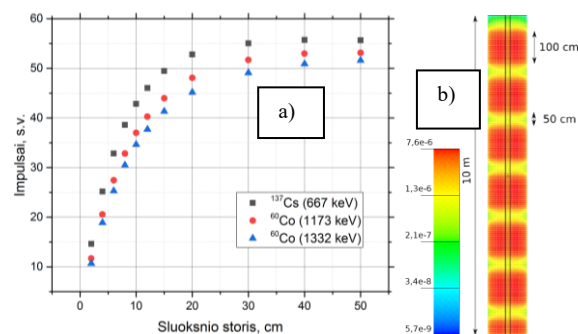
Didelės energinės skyros ir efektyvumo medžiagų panaudojimas jonizuojančiosios spinduliuotės detektavimui atveria naujas galimybes šiuolaikinės branduolinės energetikos problemoms spręsti. Šiame darbe pateikiami CeBr₃ detektoriumi gauti radioaktyviųjų atliekų charakterizavimo rezultatai, nustatant jų savitąjį aktyvumą [Bq/kg] in-situ, t.y., kai radioaktyviųjų atliekų aktyvumas yra tiesiogiai išmatuojamas radioaktyviųjų atliekų atliekyne. Toks branduolinės spektrometrijos taikymas leidžia greitai ir minimaliomis sąnaudomis ištirti didelius pašalintų atliekų tūrus, nesuardant bendros atliekyno struktūros ir integralumo, gaunant informaciją apie atliekų savitąjį aktyvumą ir jo pasiskirstymą, homogeniškumą.

Programa MCNP 6.2 [1] sukurtas CeBr₃ detektoriaus patalpinto gręžinyje modelis (1 pav.), kuriuo sumodeliuotas šios medžiagos detektoriaus atsakas į konkrečios energijos jonizuojančiosios spinduliuotės gama kvantus realiomis radioaktyviųjų atliekų atliekyno gręžinio sąlygomis.

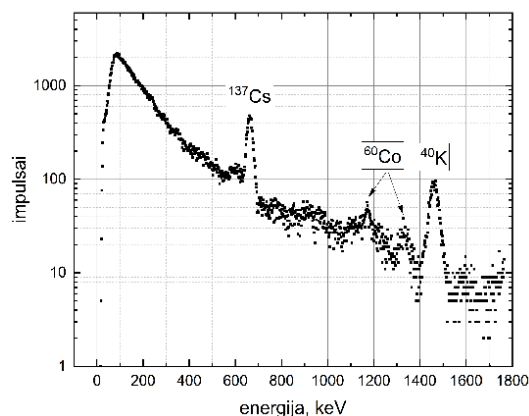


1 pav. CeBr₃ detektoriaus gręžinyje modelio schema

Programa MCNP 6.2 įvertintas detektoriaus atsakas į ⁶⁰Co ir ¹³⁷Cs spinduliuotę radioaktyviųjų atliekų ir grunto užpilde, kai šie technogeniniai spinduliai yra tolygiai pasiskirstę šiame užpilde aplink gręžinio vamzdį (2 pav. a)). Matyti, kad kai atliekų ir grunto storis aplink detektorių viršija 30 cm, detektoriumi registruojamų gama kvantų skaičius praktiškai nebedidėja dėl kvantų sugerties atliekose ir grunte. Taip pat modelinis vertinimas rodo, kad detektoriumi galima patikimai išskirti radioaktyviųjų atliekų sluoksnius, jei atliekų sluoksnių ir neužteršto grunto tarp sluoksnių storis yra 50 cm ir daugiau (2 pav. b)).



2 pav. a) Sumodeliuota detektoriumi registruojamų impulsų skaičiaus (s. v.) priklausomybė nuo atliekų ir grunto sluoksnio storio; b) Gama kvantų srautas atliekų ir grunto sluoksnyje (s. v.)



3 pav. CeBr₃ detektoriumi užregistruoti ⁶⁰Co ir ¹³⁷Cs technogeniniai spinduliai gręžinyje

Sukurtas gręžinio su detektoriumi modelis leido įvertinti labai mažo aktyvumo (apie 0,1 Bq/g) atliekų ⁶⁰Co ir ¹³⁷Cs savitąjį aktyvumą (3 pav.) atliekose aplink atliekyne įrengtus gręžinius. Užregistruotos savitojo aktyvumo vertės yra palyginamos su paimtų bandinių aktyvumo vertėmis. In-situ matavimai parodė, kad atliekyne išgręžtų gręžinių artimoje aplinkoje gama spindulių aktyvumo „dėmių“, reikšmingai viršijančių vidutinį atliekų aktyvumą, neužfiksuota.

Reikšminiai žodžiai: jonizuojančioji spinduliuotė, detektorius, in-situ matavimai, aktyvumas.

Literatūra

[1] J.F., Briesmeister, MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Code, Program Manual, Tech. Rep. (LANL, Los Alamos, New Mexico, 2000) LA13709M, (2000).

Žvaigždžių su patvirtintomis masyviomis egzoplanetomis cheminė sudėtis

Chemical Composition of Stars with Confirmed Giant Planets

Ugnė Jonauskaitė¹, Edita Stonkutė¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius
ugne.jonauskaite@ff.stud.vu.lt

Pirmoji egzoplaneta, 51 Pegasi b, prie saulės tipo žvaigždės buvo atrasta 1995 metais šveicarų mokslininkų M. Mayor ir D. Queloz [1]. Per beveik 30 metų nuo šio atradimo planetų skaičius žymiai padidėjo kosminių misijų (pvz. Kepler, TESS) dėka ir šiuo metu siekia kone 5500. Planetų atradimų sėkmė priklauso ir nuo antžeminių teleskopų, kurių duomenų analizė padeda charakterizuoti žvaigždes, o kartu ir prie jų skriejančias planetas. Tik detaliai ištyrus žvaigždę galima charakterizuoti ir jos planetas.

Yra nustatyta, kad žvaigždės atmosferos fiziniai parametrai (pvz. metalingumas, $[Fe/H]$) koreliuoja su planetų aptikimo tikimybe. G ir K spektrinių klasių žvaigždžių, aplink kurias buvo aptiktos planetos, $[Fe/H]$ yra vidutiniškai didesnis negu žvaigždžių be planetų [2]. Taip pat nustatyta, kad ir kiti cheminiai elementai gali suteikti informacijos apie žvaigždes ir jų planetas.

Autoriai teigia, kad cheminiai elementai – Mg, Si, Al ir Ti turi panašią įtaką kaip ir geležis. Nustatyta, kad kiekvieno iš šių cheminių elementų santykis su geležimi yra vidutiniškai didesnis žvaigždėse su milžinėmis planetomis, negu be planetų [3].

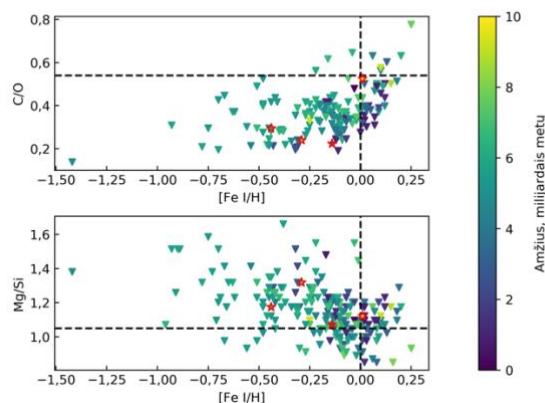
Teoriniai planetų formavimosi modeliai rodo, kad tiek C/O, tiek Mg/Si elementų gausų santykiai gali suteikti informacijos apie planetų formavimosi vietą žvaigždės proto-planetiniame diske bei uolėtų planetų mineralogiją [4].

Detalūs cheminės sudėties tyrimai gali padėti atsakyti į daugelį klausimų, susijusių su planetų formavimosi prie kitų žvaigždžių. Taigi, mano darbo tikslas buvo susipažinti su tyrimais ir atlikti detalią žvaigždžių su patvirtintomis masyviomis planetomis cheminės sudėties analizę. Darbe analizavau aukštos skiriamosios gebos VUES spektrus, gautus Molėtų astronomijos observatorijos 1,65 m teleskopu ir išsamiai ištyriau keturių žvaigždžių (TYC1445-2560-1, TYC794-1622-1, TYC4099-1626-1 ir TYC1853-1187-1) cheminę sudėtį.

Nustačiau cheminių elementų: anglies, deguonies, magnio, silicio ir itrio gausas sintetinių spektrų metodu su TURBOSPECTRUM programiniu paketu naudojant MARCS atmosferų modelius ir Gaia-ESO atominių linijų sąrašą. O žvaigždžių amžius nustačiau su UniDAM kodu ir pagal $[Y/Mg]$ santykio koreliaciją su amžiumi. Taip pat palyginau žvaigždžių amžių nustatymus remiantis dviem skirtingais metodais. Mano nustatytas vidutinis žvaigždžių imties amžius pagal UniDAM yra $7 \pm 3,74$ milijardai metų, o pagal $[Y/Mg]$ priklausomybę nuo amžiaus yra $11 \pm 1,56$ milijardų metų.

Paveiksle Nr. 1 matoma, kad mano nustatyti imties žvaigždžių C/O ir Mg/Si gausų santykiai (raudonos žvaigždės) nesiskiria nuo žvaigždžių be planetų

(trikampiai [5]). Mano imties žvaigždė submilžinė TYC1853-1187-1 turi didžiausią anglies ir deguonies (C/O) santykį, kaip ir tikėtasi, o šios žvaigždės C/O ir Mg/Si vertės artimos Saulės vertėms. Saulei šių santykių vertės yra C/O=0,54 ir Mg/Si=1,05. Kita imties žvaigždė milžinė TYC1445-2560-1 turi didžiausią Mg/Si gausų santykį, kur vertė yra artima 1,40.



1 pav. C/O ir Mg/Si priklausomybės nuo metalingumo. Trikampiais pažymėti duomenys iš [5], raudonomis žvaigždėmis – šiame darbe nustatyti duomenys. Punktyrinėmis linijomis pažymėtos Saulės vertės. Nuspalyvinta pagal UniDAM amžių.

Nustatytos žvaigždžių su masyviomis planetomis cheminių elementų: anglies, deguonies, magnio, silicio ir itrio gausos bei C/O, Mg/Si gausų santykiai, išskyrus taip vadinamų alfa-elementų $[Mg/Fe]$ ir $[Si/Fe]$ priklausomybę nuo metalingumo $[Fe/H]$, rodo, kad žvaigždžių su planetomis cheminė sudėtis panaši į žvaigždžių be planetų. Žvaigždžių su planetomis imties metalingumo vidurkis yra $\langle [Fe/H] \rangle = -0,22 \pm 0,19$. Reikalinga didesnė žvaigždžių su planetomis imtis patvirtinti gautus rezultatus.

Reikšminiai žodžiai: astrospektroskopija, žvaigždės su planetomis, Paukščių Tako galaktika.

Literatūra

- [1] M. Mayor ir D. Queloz, Nature, **378**, 355–359 (1995).
- [2] G. Gonzalez, MNRAS, **285**, 403–412 (1997).
- [3] V. Z. Adibekyan, N. C. Santos, ir kt., A&A., **543**, 10, (2012)
- [4] C. Bond, D. P. O’Brien, D. S. Lauretta, ApJ, **715**, 1050–1070 (2010)
- [5] G. Tautvaišienė, Š. Mikolaitis, ir kt., ApJS, **248**, 19 (2020)

Ultravioletinių P II linijų f -vertės gautos iš astrofizikinių stebėjimų ir teorinių skaičiavimų

Astrophysical and Computational Oscillator Strengths for Ultraviolet P II Lines

Rasa Karpuškienė¹, Frances H. Cashman², Varsha P. Kulkarni³, Romas Kisielius¹, Fatima L. Elkhatab³

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Space Telescope Science Institute, 3700 San Martin Drive, Baltimore, MD 21218, USA

³Department of Physics and Astronomy, University of South Carolina, Columbia, SC 29208, USA

Romualdas.Kisielius@tfai.vu.lt

Most chemical elements beyond He are produced in stellar nucleosynthesis and supernova explosions. Understanding the evolution of these elements is thus fundamental to astrophysics for a number of reasons. The history of element production is directly linked to the history of star formation in galaxies. Indeed, different elements are synthesized in stars of different masses. For example, α -elements such as O, Mg, Si, and S originate primarily in massive stars, while Fe-group elements form mainly in type Ia supernova explosions. Measurements of abundances of these different elements as a function of cosmic time thus provide powerful insights for understanding how the global star formation rate and supernova explosion rate evolved with time. This history of chemical enrichment in galaxies also has implications for the evolution of the intergalactic background radiation, cosmic reionization, and even the rate of binary black hole mergers.

Furthermore, chemical evolution of galaxies has implications for even the formation of planetary systems. Abundance measurements for a vast range of elements have been performed in numerous astronomical objects, including the Sun, other stars, and in the inter-stellar medium (ISM) in the Milky Way. Measurements are also available for the ISM and the circumgalactic medium (CGM) of nearby galaxies such as the Small Magellanic Cloud (SMC) and the Large Magellanic Cloud (LMC). Abundance measurements of the ISM and CGM are much more challenging for the more distant galaxies, but have still been accomplished using absorption line spectroscopy of background sources such as quasars and gamma-ray bursts (GRBs). The strongest of these absorbers are the damped Lyman-alpha absorbers (DLAs) and sub-DLAs. Studies performed using the Hubble Space Telescope (HST) in the ultraviolet and ground-based telescopes in the optical have made it possible to determine element abundances in DLA/sub-DLAs, which in fact, are the most precisely measured abundances in distant galaxies.

Abundance measurements for the volatile element phosphorus are important for measuring the metallicity in the interstellar and circumgalactic gas. However, the accuracy of these measurements is limited by the large uncertainties in the oscillator strengths of some of the key transitions of the dominant ion P II.

Using a combination of quasi-relativistic Hartree-Fock theoretical calculations and observational measurements [1], we present an updated oscillator strength of $f = 0.1529 \pm 0.0093$ for the poorly

constrained P II resonant transition at 961.401 Å, which arises from the ground electronic state $3s^23p^2\ ^3P_0$ to the excited level $3s^23p3d\ ^3D^0$. This result utilizes archival UV/optical spectra obtained with the Far-Ultraviolet Spectroscopic Explorer for 12 OB stars in the Milky Way and the SMC with the Very Large Telescope for a quasar with a damped Ly α absorber at $z = 2.811$. We also determine theoretical oscillator strengths for the P II resonant transitions at $\lambda = 963.801, 972.779, 1124.945, 1152.818, 1301.874, \text{ and } 1532.533$ Å, as well as for multiple P II fine structure and excited level transitions.

The improvement in the oscillator strengths of the P II transitions will be helpful for studies of interstellar phosphorus abundances in galaxies. More accurate P II column densities determined using our results would enable more accurate determination of P depletion on dust grains, and of P abundances in the ISM of local as well as distant galaxies, providing more secure assessments of the evolution of metallicity with cosmic time, and thus placing additional constraints on the cosmic star formation history.

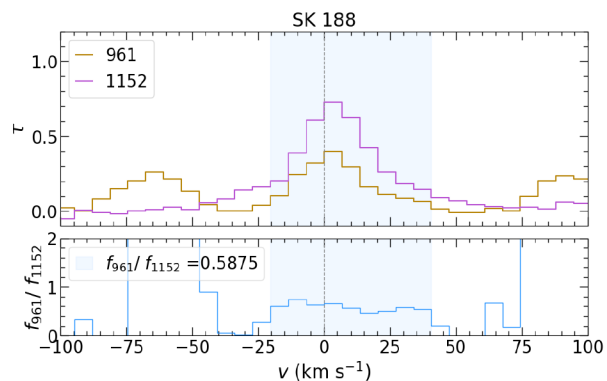


Fig. 1. Interstellar absorption lines of P II toward SK 188, a Wolf-Rayet star in the SMC. The top panel shows the optical depth profiles for the 961 and 1152 Å transitions. The bottom panel shows the ratio of the 961 profile to the 1152 Å profile. The flat region of the curve shaded in light blue was used to calculate the f -ratio of $\lambda\lambda$ 961/1152.

Reikšminiai žodžiai: laboratorinė astrofizika, ultravioletinės linijos, atominiai duomenys

Literatūra

- [1] F. H. Cashman, R. Kisielius, V. P. Kulkarni, R. Karpuškienė, F. Elkhatab, ApJ, 2023 (submitted)

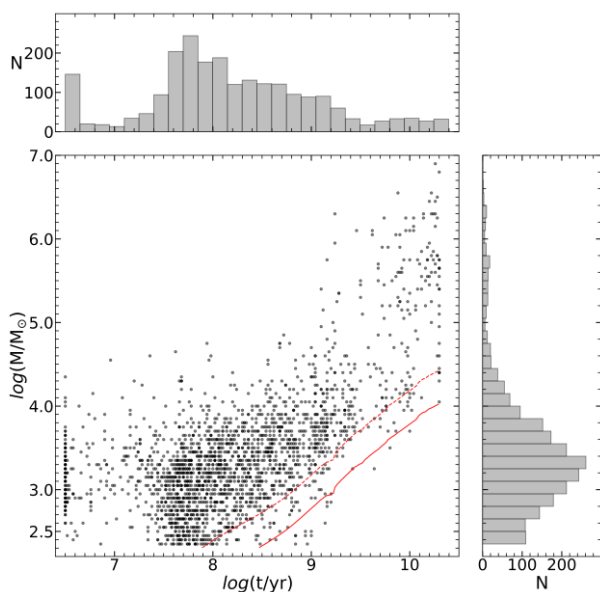
Andromedos galaktikos žvaigždžių spiečių sistema

Star Cluster System of the Andromeda Galaxy

Eimantas Kriščiūnas, Karolis Daugevičius, Erikas Cicėnas, Rima Stonkutė, Vladas Vansevicius
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
eimantas.krisciunas@ftmc.lt

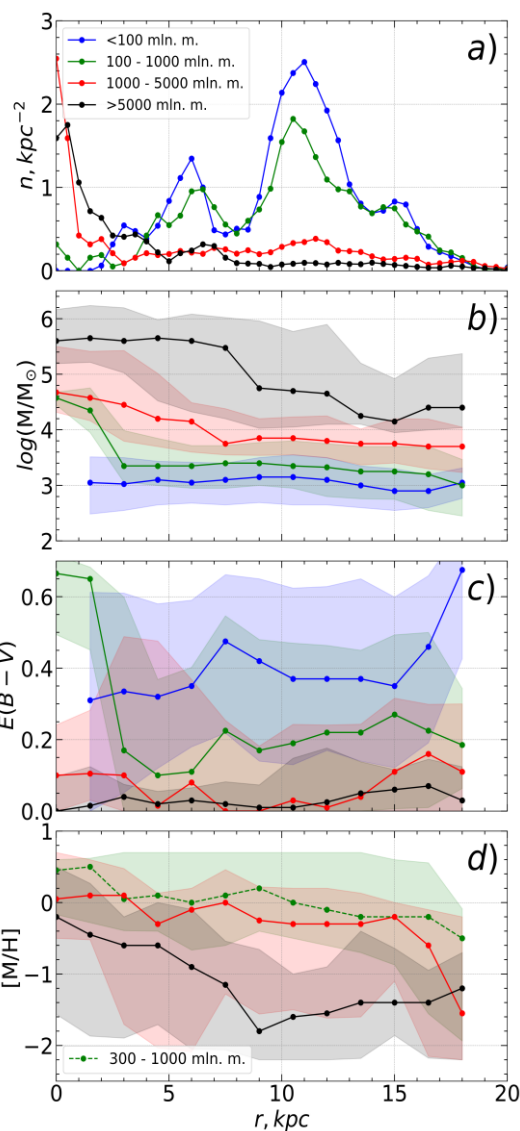
Patikimiausi žvaigždžių spiečių tyrimai kitose galaktikose atliekami Hablo kosminiu teleskopu (*angl.* Hubble Space Telescope – HST). PHAT (*angl.* The Panchromatic Hubble Andromeda Treasury) apžvalga padengia trečdalį Andromedos galaktikos (M31) disko. HST įgalino identifikuoti daug žvaigždžių spiečių, kurie nebuvo matomi antžemiais teleskopais [1]. Atlikome 2214 spiečių apertūrinę fotometriją [2, 3] ir nustatėme amžių, masę, ekstinkciją, metalingumą bei ištyrėme M31 galaktikos spiečių sistemos struktūrą.

Spiečių amžiaus ir masės diagrama parodyta 1 pav. Raudonos linijos žymi apžvalgos ribas, kur dėl selekcijos efektų jau neturėtų būti aptinkami mažos masės spiečiai. Matome aktyvios žvaigždėdaros epizodą 30-100 mln. m. laikotarpyje.



1 pav. Žvaigždžių spiečių masė nuo amžiaus. Linijos rodo spiečių aptikimo ryškio ribas: 21,5 (brūkšninė) ir 22,5 (ištinė).

Spiečiai iki 1 mlrd. m. amžiaus matomi 6, 11 ir 15 kpc spindulio žieduose (2a pav.). Senesni objektai pasiskirstę gan tolygiai dėl migracijos. Nedidelis senų (>5 mlrd. m.) spiečių skaičius ir jų koncentracija į centrą rodo, kad didžioji jų dalis yra halo objektai. Tolstant nuo galaktikos centro, spiečių masė kinta nedaug (2b pav.). Maža ekstinkcija (2c pav.), būdinga senesniems nei 1 mlrd. m. spiečiams, leidžia manyti, kad dėl selekcijos daugiausia stebime objektus esančius virš M31 disko plokštumos. Nustatytas radialinis metalingumo gradientas (-0.03 dex/kpc) 300-1000 mln. m. amžiaus spiečiams gerai atitinka deguonies ir azoto gausos gradientus išmatuotus pagal HII sritis: -0.02 ir -0.03 dex/kpc [4].



2 pav. Žvaigždžių spiečių parametrai: a) amžius, b) masė, c) ekstinkcija, d) metalingumas radialinės priklausomybės. Spalvotos sritys – 16-84 pct ribos.

Pranešime bus plačiau aptarta M31 galaktikos spiečių sistemos struktūra, radialiniai ir azimutiniai parametrai skirstiniai bei pateikti jų evoliucinės analizės rezultatai.

Reikšminiai žodžiai: M31 galaktika, žvaigždžių spiečiai.

Literatūra

- [1] L. C. Johnson ir kt., *Astrophys. J.*, **802**, 127 (2015).
- [2] R. Naujalis ir kt., *Astron. Astrophys.*, **654**, A6 (2021).
- [3] E. Kriščiūnas ir kt., *Astron. Astrophys.*, **677**, A100 (2023).
- [4] N. E. Sanders ir kt., *Astrophys. J.*, **758**, 2 (2012).

Žvaigždžių spiečių tyrimo galimybės artimoje Visatoje

The Limits of Star Cluster Studies in the Local Universe

Karolis Daugevičius, Eimantas Kriščiūnas, Erikas Cicėnas, Rima Stonkutė, Vladas Vansevicius
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
karolis.daugevicius@ftmc.lt

Didžioji dalis žvaigždžių susiformuoja spiečiuose ir asociacijose. Todėl duomenys apie šių objektų fizinius ir struktūrinius parametrus yra efektyvus įrankis nagrinėti galaktikų žvaigždėdaros istoriją ir suprasti žvaigždžių bei galaktikų formavimąsi lemiančius procesus.

Žvaigždžių spiečių tyrimui plačiai taikomas apertūrinės fotometrijos metodas derinant rezultatus su stochastiniais teoriniais spiečių modeliais [1]. Šis metodas pranašesnis už kitus, nes jį galima taikyti platesniame spiečių amžių diapazone ir tolimesnėse galaktikose. Tačiau mažos masės ($< 1000 M_{\odot}$) spiečių atveju metodas yra jautrus pradinės masių funkcijos (IMF) stochastiniams efektams [2]. Todėl ypatingai svarbu nustatyti šių efektų dydį ir metodo taikymo ribas.

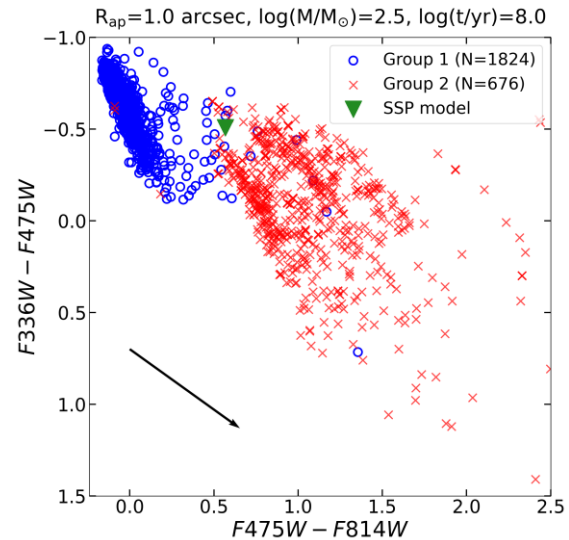
Mes parengėme platų spiečių modelių tinklą 6 fotometriniuose juostose, apimančių visą realių spiečių parametru erdvę. Kiekviename iš 500 tinklo mazgų sugeneravome po 100 skirtingų modelių ir į kiekvieną iš jų „pažiūrėjome“ šimtu skirtingų kampų. Spiečių 2D vaizdai atitinka realius Andromedos galaktikos (M31) spiečius stebėtus PHAT apžvalgoje [3]. Spiečių vaizdai (iš viso 30 mln.) buvo išmatuoti apertūrinės fotometrijos metodu.

Fotometrijos rezultatai (1 pav.) rodo, kad jauni mažos masės spiečiai be (*Group 1*) ir su (*Group 2*) žvaigždėmis po pagrindinės sekos yra iš esmės skirtingi. *Group 1* objektai užima daug mažesnį dvispalvės diagramos plotą, lyginant su *Group 2* spiečiais, kurie yra daug raudonesni ir pasižymi didesne spalvos rodiklių sklaida. Palyginimui parodyta paprastųjų žvaigždžių populiacijų (SSP) modelių vieta, kuri neatspindi modeliinių ir realių spiečių įvairovės.

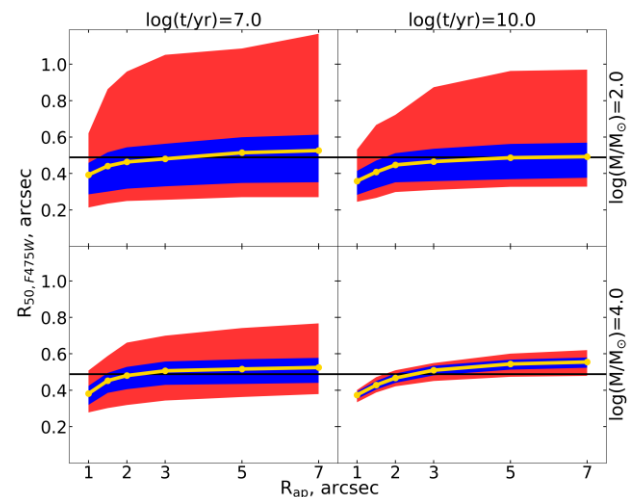
Nustatėme, jog siekiant užtikrinti patikimus M31 spiečių fotometrijos rezultatus, apertūros spindulys turi būti gana didelis, >3 arcsec (>10 pc). Taip pat nustatėme, kad tipinių spiečių modelių atveju nėra reikšmingų radialinių spalvos rodiklių gradientų, o tai pagrindžia mūsų pasiūlyto adaptyvios apertūrinės fotometrijos metodo [4, 5] prielaidas.

Parodėme, kad dėl stochastinės IMF ir projekcijos efektų nustatyti mažos masės spiečių struktūriniai parametrai, pvz. pusės šviesos spindulys – R_{50} , gali būti labai netikslūs (2 pav.). Todėl tiriant spiečių irimą bei jų dydžio evoliuciją pagal fotometriškai nustatytus struktūrinius parametrus būtina naudoti papildomus kriterijus.

Pranešime bus plačiau aptartos apertūrinės fotometrijos metodo taikymo ribos žvaigždžių spiečių tyrimui artimoje Visatoje, naudojant veikiančių ir ateities kosminių teleskopų duomenis.



1 pav. Spiečių modelių fotometrinė diagrama: apertūra, masė, amžius nurodyti virš diagramos. Ekstinkcijos vektorius (rodyklė), $A_V = 1$.



2 pav. R_{50} sklaida (16-84 pct sritys) dėl stochastinės IMF (raudona) ir stebėjimo krypties (mėlyna). Geltona linija – R_{50} mediana, juoda tiesė – teorinė R_{50} vertė.

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, galaktikos.

Literatūra

- [1] P. de Meulenaer ir kt., *Astron. Astrophys.*, **550**, A20 (2013).
- [2] M. Fouesneau, A. Lançon, *Astron. Astrophys.*, **521**, A22 (2010).
- [3] J. J. Dalcanton ir kt., *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, **200**, 18 (2012).
- [4] R. Naujalis ir kt., *Astron. Astrophys.*, **654**, A6 (2021).
- [5] E. Kriščiūnas ir kt., *Astron. Astrophys.*, **677**, A100 (2023).

Pažangi karštųjų nykštukių klasifikacija naudojant Gaia DR3 ir dirbtinį intelektą

Advanced Classification of Hot Subdwarfs: a Gaia DR3 and AI Approach

Carlos Viscasillas Vázquez¹, Enrique Solano², Ana Ulla Miguel³, Marco Antonio Álvarez González⁴, Raúl Santoveña Gómez⁴, Minia Manteiga Outeiro⁴, José Carlos Dafonte Vázquez⁴, Esther Pérez Fernández³, Carlos Rodrigo², Alba Aller², Raquel Oreiro³.

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio av. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

²Centro de Astrobiología (CSIC-INTA), Camino Bajo del Castillo s/n, E-28692 Villanueva de la Cañada, Madrid, Spain

³IFCAE -- Universidade de Vigo (UVIGO), Campus Lagoas-Marcosende, s/n, 36310 Vigo, Spain

⁴CIGUS CITIC - University of A Coruña, Campus Elviña s/n, A Coruña, 15071, Spain

⁵CIGUS CITIC - University of A Coruña, Paseo de Ronda 51, A Coruña, 15011, Spain

carlos.viscasillas@ff.vu.lt

Hot subdwarf stars (hot sds) are compact blue evolved objects, burning He in their cores surrounded by a thin H envelope. In the H-R Diagram they are located by the blue end of the Horizontal Branch, near the so-called Extended Horizontal Branch. Besides, most models agree on a quite probable common envelope binary evolution scenario in the Red Giant (RG) phase, because it is virtually impossible for a single RG to lose so much of its total mass by its own. However, the actual current binarity rate for this class of objects is a yet unsolved, but key question in this field. We conduct an in-depth analysis of hot sds classification utilizing the dataset provided by [1] and with a dual purpose: to further our comprehension of the evolutionary processes underlying hot subdwarf stars and to augment our insights into binary systems belonging to this stellar category. Our analysis incorporates the use of the recently released Gaia DR3 data, with a particular focus on the processing of BP/RP spectra through state-of-the-art artificial intelligence (AI) techniques. These techniques include Self-Organizing Maps (SOMs) and specialized software tools, to build up on previous hot sds uncovering via Virtual Observatory techniques ([2], [3]).

We have now worked with hot sd catalogues by [4] (with about 6,000 confirmed objects) and [5] (about 39,000 candidates). We selected training samples from [1] and [6] and then applied to a larger catalog of over 39,000 blue candidates from [5]. Techniques such as supervised ML and probabilistic color-magnitude approaches were utilized to classify binary systems (Figure 1). At this point, we compute a single-binary frontier and probability of belonging to each class using Support Vector Machines (SVMs) [7]. For a SOM classification, we worked with GDR3 BP/RP spectra of 2815 objects out of the [4] catalogue. The result is plotted in Figure 2, with the aid of the Gaia Utility for the Analysis of self-organizing maps (GUASOM) [8]. For comparison, we also used a 'cosine similarity' measure to check the spectra of a well-defined subsample of 35 binaries from [1] and 53 single stars from [6]. Preliminary results from the application of this methods show promising outcomes.

Key words: *binary hot subdwarfs, virtual observatory, artificial intelligence.*

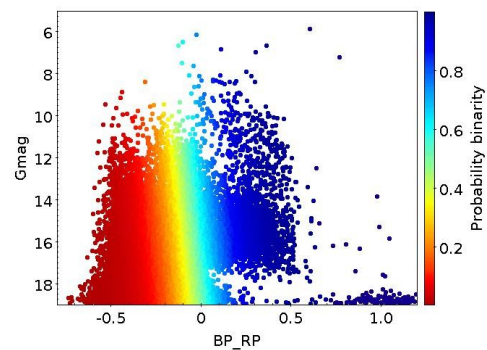


Figure 1. Colour-magnitude diagram color coded by probability of being binary.

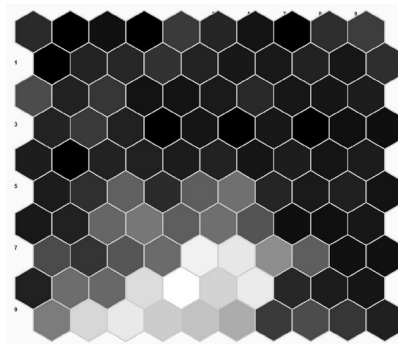


Figure 2. SOM classification of 2815 objects from GDR3.

Acknowledgments

This abstract is framed within a MW-Gaia Cost Short-Term Scientific Mission (STSM), as a collaborative effort between members from the Galician Group for the Gaia Satellite (GGG), in conjunction with partners from the Gaia DPAC consortium, the Spanish Virtual Observatory (SVO), and the Vilnius University (presenter author).

Literatūra

- [1] Solano, E.; Ulla, A.; Pérez-Fernández, E. et al. *MNRAS* **514**, 3 (2022).
- [2] Oreiro R. Rodríguez-López C. Solano E. Ulla, A. Østensen R. García-Torres M. *A&A* **530** A2 (2011).
- [3] E. Pérez-Fernández, A. Ulla, E. Solano, R. Oreiro, C. Rodrigo, A., *MNRAS*, **457**, 3, 11 (2016).
- [4] Geier, S. *A&A*, **635**, A193 (2020).
- [5] Geier, S.; Raddi, R.; Gentile Fusillo, N. P.; Marsh, T. R. *A&A*, **621**, A38 (2019).
- [6] Drilling, J. S. ; Jeffery, C. S.; Heber, U. et al. *A&A* **551**, A31 (2013).
- [7] Boser, B. E., Guyon, I. M., & Vapnik, V. N. 1992, in Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory.
- [8] Álvarez, M. A. ; Dafonte, C.; Manteiga, M.; et al. *NC&A* **34**, (2022).

Stacionarios eulerinės gardelės panaudojimas greitai grįžtamojo ryšio injekcijai IDH aktyviųjų galaktikų modeliuose

A fast grid-based feedback injection method in SPH AGN simulations

Matas Tartėnas¹, Kastytis Zubovas^{1,2}

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

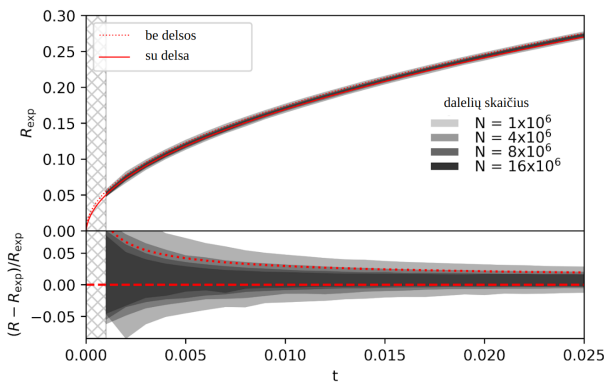
²Vilniaus universitetas, Astronomijos observatorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

matas.tartenas@ftmc.lt

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

Šiuo metu grįžtamąjį ryšį išplėstų dalelių hidrodinamikos (IDH) modeliuose galime įtraukti keliais būdais. Paprasčiausias - sferinė energijos injekcija [2]. Šis intuityvus metodas išdalina per laiko žingsnį sukaupią energiją artimiausioms šaltinio kaimynėms. Deja, metodas nėra tinkamas, kai tyrimui svarbu detali dujų, supančių šaltinį, struktūra ar kai jų išsidėstymas smarkiai netolygus [3]. Plačiai naudojamas ir sudėtingesnis, diskrečiais energijos paketais (DEP) grįžtas metodas [4]. Jis yra gerokai lankstesnis - leidžia atsižvelgti į galimą GR sklidimo greitį ar netolygumą. Tačiau jis taip pat reikalauja gerokai daugiau skaičiavimo resursų.

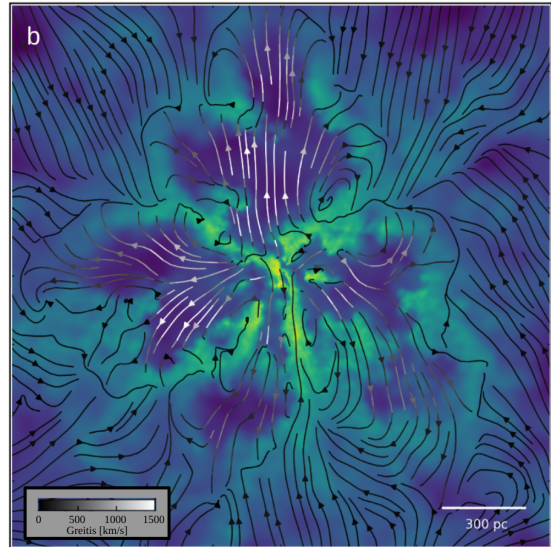
Mes sukūrėme alternatyvų greitą GR injekcijos metodą *gridWind*, kuriame neprarandamas DEP suteikiamas lankstumas, tačiau gerokai sumažinamas skaitmeninių resursų poreikis. *gridWind* metodo esmė - SJS (ar kito šaltinio) kuriamo vėjo propagavimas radialiai sferine gardele išorės kryptimi pastoviu greičiu $v \sim 0.1c$. Vėjo-dalelės sąveikos srityje dalelei pridėdama energija ar judesio kiekis proporcingas tos dalelės indėliui į bendrą tankio lauką.



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

Naudojant šį metodą mes galime keisti vėjo parametrus priklausomai nuo laiko ar krypties, pavyzdžiui, sekti kūgiškus vėjo gūsius sklindančius iš plokštumos kryptį keičiančio akrecinio disko.

Šiuo metu *gridWind* metodas implementuotas hibridiniame n-kūnų/IDH kode *Gadget-3* [5]. Pav. 1 pavaizduotas judesio kiekio GR palaikomos sferos plėtimasis homogeniškoje dujose. Naudodami *gridWind* metodą gauname rezultatus, palyginamus su DEP [4]. Be to, metodas leidžia naudoti didesnę dalelių skaičių, negu būtų praktiška naudojant DEP dėl milžiniško sąveikų skaičiaus. Nors naudojama stacionari gardelė, metodas geba atkurti sudėtingas dujų struktūras, bei atkuria realistiškas tėkmes aktyvaus galaktikos branduolio (AGB) modelyje atvaizduotame tankio žemėlapyje pav. 2.



2 pav. AGB sukuriama tėkmė po 1 mln. trukusio aktyvumo epizodo. Netolygumai dėl turbulencijos.

Reikšminiai žodžiai: galaktika, aktyvūs galaktikų branduoliai, hidrodinaminiai modeliai, skaitiniai metodai

Literatūra

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

Astroseisminiai amžiai Galaktikos archeologijoje

Asteroseismic ages for Galactic archeology

Erika Pakštienė¹, G. Tautvaišienė¹, Š. Mikolaitis¹, A. Drazdauskas¹, E. Stonkutė¹, R. Minkevičiūtė¹,
Yuriy Chorniy¹, V. Bagdonas¹, R. Urbonavičiūtė¹

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Lithuania

erika.pakstiene@tfai.vu.lt

Tam, kad suprasti Galaktikos cheminę evoliuciją, būtina įvertinti tris pagrindinius žvaigždžių parametrus: cheminę sudėtį, amžių ir gimimo vietą. Skirtingi parametrai gali būti nustatomi iš skirtingų šaltinių. Pavyzdžiui, detali cheminė žvaigždžių sudėtis gali būti nustatoma iš didelės skiriamosios raiškos žvaigždžių spektrų. Žvaigždžių gimimo vieta gali būti gaunama iš Gaia kosminio teleskopo archyvų. Žvaigždžių amžiai gali būti nustatomi pagal žvaigždžių spiečių izochronas arba naudojant astroseisminį žvaigždžių modeliavimą.

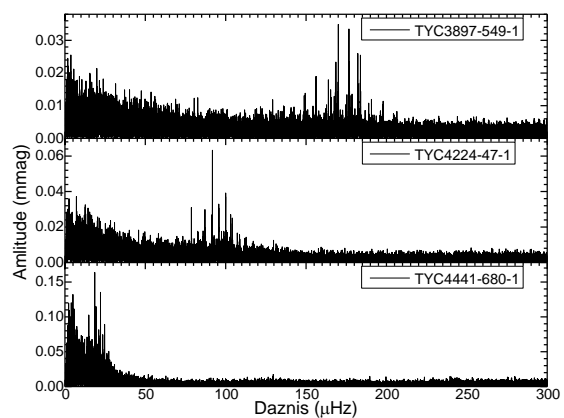
Tiksliai nustatyti žvaigždžių amžių yra ganėtinai sudėtinga, todėl kombinuojant skirtingus amžiaus nustatymo metodus galima padidinti nustatomo amžiaus tikslumą. Astroseisminių amžių nustatymas yra vienas tiksliausių iki šiol naudojamų amžių nustatymo būdų, bet jis gali būti naudojamas tik kintamo šviesio žvaigždėms. Nekintamų žvaigždžių amžiaus nustatymui turi būti naudojami kiti nepriklausomi metodai.

Vienas iš tokių nepriklausomų amžiaus nustatymo metodų galėtų būti paremtas žvaigždžių cheminės sudėties (pvz. C/N, Mg/Fe, Y/Mg) priklausomybe nuo amžiaus. Norint nustatyti šias priklausomybes būtini labai tikslūs amžiai. Astroseisminiai kintamo šviesio žvaigždžių tyrimai leidžia šių žvaigždžių amžių nustatyti daug tiksliau nei kitais metodais [1]. Todėl cheminių elementų priklausomybių nuo amžiaus tikslumui įvertinti ir pagerinti nusprendėme panaudoti kintamo šviesio žvaigždžių su Saulės tipo pulsacijomis laikinės skyros stebėjimus, gautus su TESS kosminiu teleskopu.

Saulės tipo kintamų žvaigždžių pulsacijų spektras turi griežtą struktūrą, šių žvaigždžių pulsacijų modas (ypač $l=0$ ir $l=2$) ganėtinai paprasta identifikuoti pagal jų išsidėstymą pulsacijų spektre, nes stebimi vienodi dažnių tarpai tarp gretimų tos pačios rūšies modų. Priklausomai nuo žvaigždės fizikinių parametru, evoliucijos stadijos ir amžiaus skiriasi stebimų pulsacijų dažniai (1 pav.) bei dažnių tarpai tarp modų. Iš pulsacijų spektrų nustatyti didieji dažnių intervalai $\delta\nu$ ir maksimalios pulsacijų amplitudės dažnis ν_{\max} sėkmingai naudojami žvaigždės evoliucijos stadijos įvertinimui bei masės, dydžio, šviesio, atitinkamai ir $\log(g)$ bei tankio apskaičiavimui pagal nesudėtingas formules [2]. O papildomai panaudojant iš spektroskopijos gautus parametrus tokius kaip T_{eff} ir $[\text{Fe}/\text{H}]$ galima apskaičiuoti ir žvaigždžių amžių modeliuojant jų evoliuciją.

Šiame darbe mes pristatome pirmuosius mūsų rezultatus, kuriuos gavome sujungę astroseisminius amžius, nustatytus iš TESS kosminio teleskopo fotometrinių laikinės skyros stebėjimų, bei kai kurių cheminių elementų gausų, nustatytų iš Molėtų

astronomijos observatorijoje stebėtų didelės skiriamosios raiškos spektrų, analizę. Tyrimui buvo naudojami 439 kintamų žvaigždžių, šviesesnių nei 8 mag ir esančių TESS siauriniame nuolatinio regėjimo lauke, stebėjimai. Dauguma šio rinkinio žvaigždžių yra pagrindinę seką palikusios submilžinės arba milžinės, kurios yra vėsesnės nei F5 spektrinės klasės žvaigždės.



1 pav. Paveiksle pateikti trijų iš mūsų tirtų skirtingo amžiaus žvaigždžių pulsacijų spektrai, atitinkantys Saulės tipo pulsacijų kriterijus skirtinguose dažnių ruožuose.

Ištyrėme skirtingų cheminių elementų gausų tarpusavio priklausomybes, priklausomybes nuo žvaigždžių fizikinių parametru, tame tarpe ir priklausomybes nuo astroseisminio amžiaus. Nustatėme, kad $[\text{C}/\text{N}]$ priklausomybė nuo astroseisminių amžių yra stipriausia lyginant su kitais cheminiais elementais. Taip pat nustatėme akivaizdžią, nors ir silpną, $[\text{Mg}/\text{Fe}]$ priklausomybę nuo astroseisminio amžiaus.

Reikšminiai žodžiai: Saulės tipo pulsacijos, Galaktikos evoliucija, Galaktikos archeologija, žvaigždžių spektroskopija, TESS kosminis teleskopas, fotometrija.

Literatūra

[1] Yveline Lebreton & Josefina Montalbán, *The Ages of Stars* Proceedings IAU Symposium No. 258, (2008).

[2] Kjeldsen, H. & Bedding, T. R., *A&A*, 293, 87, Paper I (1995)

Žvaigždės su planetomis. Aukštos skiriamosios gebos spektroskopiniai stebėjimai su Molėtų astronomijos observatorijos 1,65 m teleskopu

Exoplanet-hosts. High-resolution spectroscopic follow-up with 1,65 m telescope at Molėtai astronomical observatory

Edita Stonkutė¹, Gražina Tautvaišienė¹, Arnas Drazdauskas¹, Renata Minkevičiūtė¹, Šarūnas Mikolaitis¹, Ashutosh Sharma¹

¹ Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius edita.stonkute@tfai.vu.lt

Žvaigždės su planetomis yra viena iš aktyviausių astrofizikos temų šių dienų moksliniuose tyrimuose. Tai įrodo ir 2019 m. paskirta Nobelio premija astronomams M. Mayor ir D. Queloz už 1995 m. atrastą pirmąją egzoplanetą, besisukančią apie žvaigždę, panašią į mūsų Saulę. Egzoplanetų atradimai ir tyrimai tik išibėgėja. Šiai dienai jau yra rastos daugiau kaip 5500 planetos. Matome, kad šios planetos yra įvairios ir dažnos, tačiau kur ir kaip jos susiformavo Galaktikoje lieka neaišku. Po naujausių tyrimų apie skirtingus planetų formavimosi procesus, aišku viena – kuo geriau ištyrinėsime žvaigždę, tuo tiksliau galima bus apibūdinti planetas. Pavyzdžiui, žvaigždės cheminė sudėtis yra atspindys elementų protoplanetiniame diske, iš kurio formuojasi ir pačios planetos.

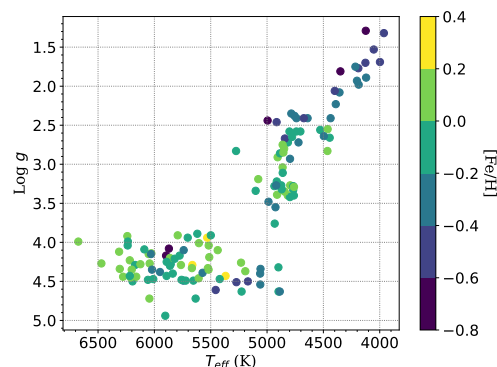
Lietuvoje, Vilniaus universiteto, Fizikos fakulteto, Teorinės fizikos ir astronomijos instituto mokslo bazėje Molėtų astronomijos observatorijoje su 1,65 m teleskopu ir aukštos skiriamosios gebos spektrografu, mes vykdome žvaigždžių su planetomis spektroskopinius stebėjimus. Šių stebėjimų ir tyrimų esmė yra detali žvaigždžių cheminės sudėties, kinematikos ir amžiaus analizė. O taip pat korelacijų su planetų parametrais, pvz. tokiais kaip masė, tyrimas.

Vykdydami šį projektą jau atstebėjome virš 130 žvaigždžių apie kurias skrieja 174 planetos ir nustatėme šių žvaigždžių atmosferų pagrindinius parametrus T_{eff} , $\log g$, $[\text{Fe}/\text{H}]$ ir cheminių elementų C, N, O, Li, Mg, Si gausas, kinematiką ir amžius. Toliau vykdome astronominius stebėjimus ir lygiagrečiai analizuojame duomenis. Šioje konferencijoje detaliau pristatysiu vykdomus tyrimus.

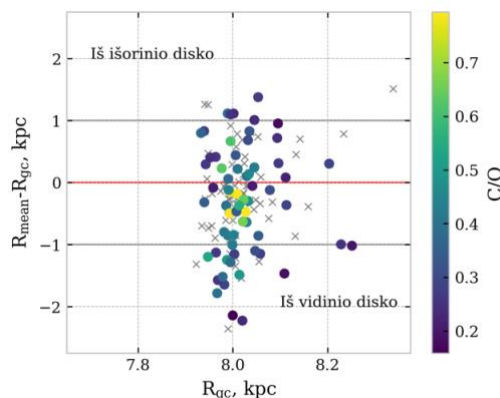
Paveiksle nr. 1 pateikta žvaigždžių su planetomis efektinės temperatūros (T_{eff} , [K]) ir laisvojo kritimo pagreičio ($\log(g)$, [cgs]) pasiskirstymas. Rezultatai nuspalvinti pagal žvaigždžių fotosferų metalingumą ($[\text{Fe}/\text{H}]$). Imtį sudaro 131 F-G-K spektrinės klasės žvaigždės, iš kurių yra 60 milžinės ir 71 nykštukė. Žvaigždžių su planetomis imties vidutinis metalingumas ($\langle [\text{Fe}/\text{H}] \rangle = -0.12 \pm 0.22$) yra mažesnis nei Saulės. Matome, kad planetos formuojasi tiek prie metalingų, tiek prie nemetalingų žvaigždžių.

Imties žvaigždės yra Saulės aplinkoje, o norint analizuoti aplinką Galaktikoje, kurioje jos susiformavo, reikia nustatyti šių žvaigždžių nuotolius nuo Galaktikos centro ir galaktinius orbitos parametrus. Paveiksle nr. 2 pateikta žvaigždžių su planetomis vidutinio galaktinio orbitos spindulio ir atstumo iki Galaktikos centro

skirtumo priklausomybė nuo stebimo atstumo iki Galaktikos centro. Matome, kad daugumos žvaigždžių R_{mean} ir R_{GC} skirtumo modulis yra mažesnis nei 1. Vadinasi jų orbitos yra apskritiminės arba savo orbitose žvaigždės yra tokiame taške, kur stebimas atstumas iki Galaktikos centro apytikriai sutampa su jų R_{mean} verte.



1 pav. Žvaigždžių su planetomis efektinės temperatūros (T_{eff} , K) ir laisvojo kritimo pagreičio ($\log(g)$, cgs) pasiskirstymas. Rezultatai nuspalvinti pagal žvaigždžių fotosferų metalingumą ($[\text{Fe}/\text{H}]$).



2 pav. Žvaigždžių su planetomis vidutinio galaktinio orbitos spindulio (R_{mean} , kpc) ir stebimo atstumo iki Galaktikos centro (R_{GC} , kpc) skirtumo priklausomybė nuo atstumo iki Galaktikos centro (R_{GC} , kpc). Rezultatai nuspalvinti pagal žvaigždžių C/O santykį, raudona linija žymi $R_{\text{mean}}=R_{\text{GC}}$, o pilkos linijos - žvaigždžių migracijos ribą.

Reikšminiai žodžiai: astro-spektroskopija, žvaigždės su planetomis, Galaktika.

Anglis ir azotas kaip papildomų maišymo procesų indikatoriai evoliucionavusiose žvaigždėse

Carbon and nitrogen as tracers of extra mixing processes in evolved stars

Markus Ambrosch¹, Šarūnas Mikolaitis¹, Gražina Tautvaišienė¹, and Corinne Charbonnel²

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio Av. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

²Department of Astronomy, University of Geneva, Chemin Pegasi 51, 1290, Versoix, Switzerland

markus.ambrosch@ff.vu.lt

Stars spend most of their lives on the main sequence of the Hertzsprung-Russel diagram, where they burn hydrogen to helium in hydrostatic equilibrium. During this phase, the material from the stellar core does not reach the surface of the star, and the chemical composition of the stellar atmosphere stays constant. In later evolutionary stages, the fusion reactions in the stellar core change, and the stars move towards the red giant branch of the Hertzsprung-Russel diagram. Now convective mixing processes can transport material from the core of the star all the way to its surface, and vice versa. As a consequence of this "dredge-up", changes in the chemical composition of the stellar atmosphere can be observed [1].

Among other effects, the mixing leads to a decrease of the observed carbon-to-nitrogen ratio $[C/N]$ and a reduction of the $^{12}C/^{13}C$ ratio. However, recent works observe $[C/N]$ and $^{12}C/^{13}C$ ratios that are too low to be explained by the standard convective mixing alone. Several mechanisms have been suggested as explanations for the observed extra mixing. The effects of thermohaline instability and rotation-induced mixing on the observable surface abundances of carbon, nitrogen, and the carbon isotopic ratio have been studied by [3]. To constrain their stellar evolution models, we have investigated high-resolution, high signal-to-noise spectra of 350 evolved red giant stars.

Our analysis of the atmospheric $[C/N]$ and carbon isotopic ratios of these stars confirm the presence of non-standard mixing processes. The model calculations from [3], which include the extra mixing effects of rotation and thermohaline instability, fit better to our determined abundances, than the models that include only the standard convective "dredge-up" mixing. Our results therefore supply further evidence that rotation and the thermohaline instability are the key mechanisms that cause the extra mixing of stellar material.

References

- [1] Iben, Icko, J., *ApJ*, 147, 624 (1967)
- [2] Charbonnel, C. & Lagarde, N., *A&A*, 522, A10 (2010)
- [3] Lagarde, N., Reylé, C., Robin, A. C., et al., *A&A*, 621, A2 (2019)

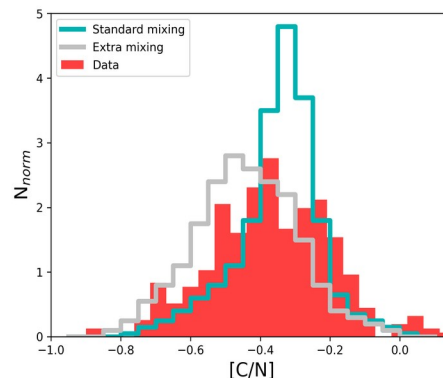


Figure 1: Normalized histogram of the $[C/N]$ ratios of our sample stars (red). Unfilled histograms show model predictions from [3] for standard convective mixing (cyan) and additional extra mixing induced by rotation and thermohaline instability (gray).

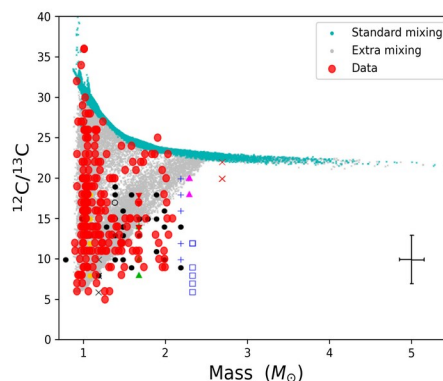


Figure 2: Carbon isotopic ratios $^{12}C/^{13}C$ relative to stellar mass. Stellar evolution models from [3] that include extra mixing, are depicted as small gray data points. Standard mixing models are shown in cyan. Our results are shown as red data points, other colorful symbols are results from other works.

Key words:

Stars: abundances, stellar evolution

Methods: stellar spectroscopy

Jauno mažo tankio padrikojo spiečiaus FSR 0384 astrofotometrinis tyrimas

Astrophotometric analysis of young sparse open cluster FSR 0384

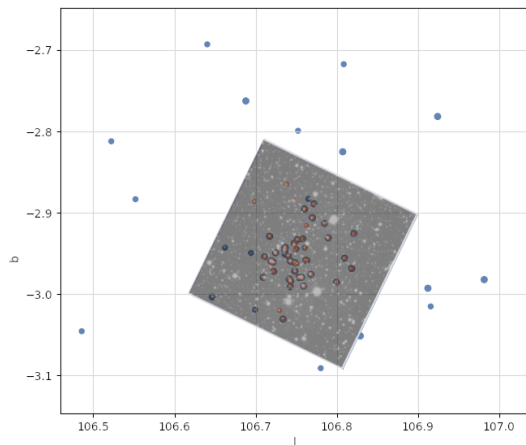
Justas Zdanavičius¹, Dmitrij Semionov¹, Robert Boyle², Saulius Raudeliūnas¹, Marius Maskoliūnas¹

¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius

²Vatican Observatory Research Group, Steward Observatory, Tucson, AZ 85721, USA.

dmitrij.semionov@ff.vu.lt

Padrikųjų spiečių gyvavimo trukmė ir iširimo greitis bei jų priklausomybė nuo galaktocentrinio atstumo yra svarbūs mūsų Galaktikos žvaigždinio disko evoliucijos faktoriai. Jų įvertinimas reikalauja kaip plataus masto spiečių apžvalgų analizės, taip ir detalaus pavienių padrikųjų spiečių tyrimų. Ypatingai svarbu yra susieti spiečių žvaigždinės populiacijos parametrus (nustatant bendrą žvaigždžių amžių, cheminę sudėtį ir t.t.) ir dinaminį amžių (nustatomą iš viso spiečiaus bendrų judėjimo charakteristikų).



1 pav. FSR 0384 centrinės srities optinis vaizdas, gautas Vatikano Observatorijoje.

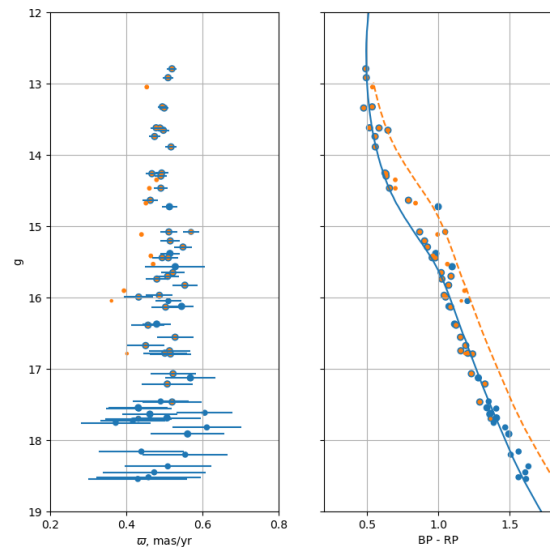
FSR 0384 yra mažos masės padrikasis spiečius, esantis tarp mūsų Galaktikos Vietinės (Local Arm) ir Persėjaus (Perseus Arm) spiralinių vijų. Publikacijos, besiremiančios Gaia duomenimis (pvz. [1]), aprašo jį kaip kompaktišką (kampinis dydis $D < 10'$), turinčią apie 60 narių, žvaigždžių sankaupą. Tačiau jo fundamentaliųjų parametrų nustatymą apsunkina tarpžvaigždinė ekstinkcija ir masyvių narių trūkumas. Dėl to amžiaus ir atstumo neapibrėžtumo problemai išspręsti vien tik Gaia apžvalgos duomenų neužtenka.

Šiame darbe mes panaudojome kompleksinį šios problemos sprendimo būdą, papildomai pasitelkiant daugiaspalvę Vilniaus fotometrines sistemą. 2022 m. Vatikano astronominėje observatorijoje (Arizona, JAV) buvo atlikti FSR 0384 centrinės dalies stebėjimai.

Atlikus šios srities žvaigždžių klasifikaciją buvo nustatyti spiečiaus populiacijos parametrai, pateikiami lentelėje Nr. 1. Naudojant juos, spiečiaus aplinkoje buvo atrinktos žvaigždės, pagal savo dinamiką ir fotometrines savybes atitinkančios tai pačiai populiacijai, tokiu būdu aptinkant tikėtinus spiečiaus narius didesniame atstume nuo jo centro, galimai sudarančius spiečiaus halą.

1 lentelė. Principiniai FSR0384 parametrai, publikuoti Almeida et al. ([2]) ir nustatyti šiame darbe.

	Almeida et al. 2023	Šis darbas
d , pc	1.847 ± 0.024	2.03 ± 0.02
$\log t$	8.52 ± 0.116	8.5 ± 0.05
[Fe/H]	0.002 ± 0.023	0.01 ± 0.01
A_v	1.272 ± 0.054	1.2 ± 0.05



2 pav. FSR 0384 ryškio-paralakso (kairėje) ir ryškio-spalvos (dešinėje) diagramos

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, Galaktika

Literatūra

[1] T. Cantat-Gaudin et al., *A&A* **618A**, 93C (2018)

[2] A. Almeida, H. Monteiro and W. S. Dias, *MNRAS* **525**, 2315 (2023)

Padrikujų spiečių Berkeley 86 ir Berkeley 87 tyrimas

Investigations of open clusters Berkeley 86 and Berkeley 87

Justas Zdanavičius¹, Dmitrij Semionov¹, Marius Maskoliūnas¹, Saulius Raudeliūnas¹, Richard P. Boyle^{2,3}, Robert Janusz³, Kazimieras Černis¹, Algirdas Kazlauskas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

²Vatican Observatory Research Group, Steward Observatory, Tucson, AZ 85721, USA

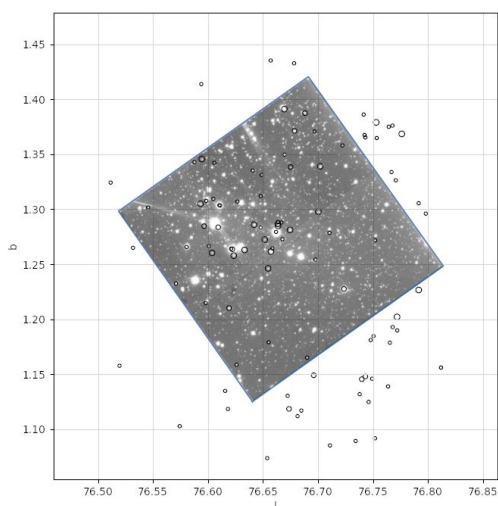
³Vatican Observatory, V-00120, Vatican City State

justas.zdanavicius@tfai.vu.lt

Šiame pranešime mes pristatome dviejų padrikujų spiečių, matomų Gulbės žvaigždyno kryptimi, tyrimus.

Šie spiečiai buvo nufotografuoti Vatikano pažangių technologijų teleskopu (VATT Vatican Advanced Technology Telescope), esančiu JAV, Arizonoje. Kaip imtuvus buvo naudota CCD kamera, žvaigždžių lauko dydis yra 13x13 kampinių minučių. Fotografavimo metu buvo naudoti septyni Vilniaus sistemos filtri. Priderinimas prie standartinių Vilniaus fotometrinių sistemos indeksų buvo atliktas naudojant Maksutovo sistemos teleskopą, esantį Molėtų astronomijos observatorijoje. Išmatuota ir suklasifikuota daugiau kaip tūkstantis tiriamose srityse esančių žvaigždžių, kurių V ryškis yra iki 19 mag. Atstumas iki žvaigždžių įvertintas iš Gaia DR3 paralaksų (Gaia Collaboration et al. 2022 [1]).

Tarpžvaigždinė ekstinkcija šiose srityse buvo nustatyta dviem metodais. Pirmiausiai buvo atrinktos raudonųjų milžinių sankaupos žvaigždės, ir naudojant 2MASS dangaus apžvalgą gavome šių žvaigždžių tarpžvaigždinę ekstinkciją (A_K) ryškyje K. Naudojami Vilniaus fotometrinių sistemą tarpžvaigždinę ekstinkciją (A_V) ryškyje V paskaičiavome visoms mūsų išmatuotoms ir suklasifikuotoms žvaigždėms. Gautas sąryšis $A_V=8.3A_K$ rodo, kad šia kryptimi turime standartinę ekstinkcijos dėsnį.

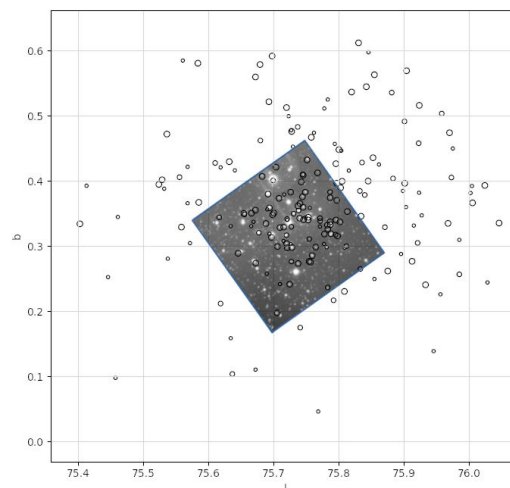


1 pav. Spiečiaus Berkeley 86 nuotrauka ir nariai.

Tarpžvaigždinės ekstinkcijos (A_V) kitimas spiečių nariams Berkeley 86 srityje gaunamas nuo 2 iki 4 mag, o Berkeley 87 nuo 3 iki 5 mag ryškyje V.

Spiečiaus nariams atrinkti buvo panaudota daugelio gausinių funkcijų priderinimo programa (Bovy et al. 2009 [2]). Su didesne nei 80% tikimybe mes gavome 61 galimą narį spiečiui Berkeley 86 ir 90 narių Berkeley 87. Iš šių tikėtiniausių narių gaunamas atstumas iki spiečių yra labai panašus. Spiečius Berkeley 86 nutolęs nuo mūsų 1690 ± 70 parsekų, o spiečius Berkeley 87 – 1680 ± 100 pc. Taigi, jie neabejotinai priklauso vienai, Cyg OB1, asociacijai.

Tyrimo metu panaudojus Padova izochronas (Bressan et al. 2012 [3]) įvertinti spiečių amžiai. Berkeley 86 spiečiaus amžius gautas 5-7 Myr, o spiečius Berkeley 87 atrodo truputį jaunesnis - 3-6 Myr.



2 pav. Spiečiaus Berkeley 87 nuotrauka ir nariai.

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, Galaktika

Literatūra

- [1] Gaia Collaboration, Vallenari, A., Brown, A. G. A., et al. 2022, arXiv e-prints, arXiv:2208.00211.
- [2] Bovy, J., Hogg, D. W., & Roweis, S. T. 2009, ApJ, 700, 1794, doi: 10.1088/0004-637X/700/2/1794
- [3] Bressan, A., Marigo, P., Girardi, L., et al. 2012, MNRAS, 427, 127, doi: 10.1111/j.1365-2966.2012.21948.x

Kvantinio taško ir fotosensibilizatoriaus-chlorino e6 komplekso stabilumo tyrimai ląstelių auginimo terpėse

Stability studies of a quantum dot and the photosensitizer chlorin e6 complex in cell culture media

Evelina Kazlauskė^{1,2}, Simona Steponkienė¹, Vitalijus Karabanovas^{1,2}, Ričardas Rotomskis^{1,3}

¹Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3B, LT-08406, Vilnius

²Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius

³Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, LT-10222, Vilnius

evelina.kazlauske@nvi.lt

Ankstyvoji vėžio diagnostika ir prastas vaistų selektyvumas navikiniams dariniams yra vieni pagrindinių onkologijos iššūkių. Sparti nanotechnologijos plėtra siūlo naujus novatoriškus sprendimus navikinių susirgimų diagnostikoje ir terapijoje. Siekiama pagaminti diagnostinėmis ir terapinėmis savybėmis pasižyminčius nanokompleksus, kurie sėkmingai ankstyvoje stadijoje diagnozuotų vėžį ir vykdytų gydymo funkciją [1]. Fotosensibilizatoriaus (FS) ir kvantinio taško (KT) kompleksas gali tapti teranostiniu metodu sprendžiančiu dabartines gydymo problemas.

Puslaidininkinės fotoluminescuojančios nanodalelės KT - tai mažo (1-6 nm) dydžio kristalai, kurie pasižymi smailiomis emisijos juostomis, dideliu kvantiniu našumu, atsparumu blyškimui bei KT paviršiaus modifikacijos galimybėmis lyginant juos su klasikiniiais diagnostikos optiniais žymenimis [2]. Tačiau KT yra prasti singuletinio deguonies generatoriai, kurie ir užtikrina naviko žūtį fotosensibilizuotos navikų terapijos (FNT) metu. FNT tai minimaliai invazinis vėžio gydymo būdas, kurio metu į žmogaus organizmą įvestas fotovaistas kaupiasi vėžinėse ląstelėse ir sužadintas šviesa (audinių skaidrumo lange) generuoja singuletinį deguonį, kuris sukelia naviko žūtį. KT jau dabar plačiai naudojami įvairiose biomedicinos srityse, tačiau norint juos sėkmingai panaudoti vėžio ankstyvoje diagnostikoje ir FNT reikia pagerinti KT singuletinio deguonies generacijos kvantinį našumą [3]. Tam buvo sukurtas KT (CdSe/ZnS) ir FS chlorino e6 (ce6) kompleksas [4], kuris pasižymėjo geromis diagnostikos ir terapijos savybėmis. Šiame komplekse KT ir klasikinis FS chlorinas e6 (Ce6) sujungti nekovalentiniu ryšiu tad būtina ištirti šio komplekso biosuderinamumą, koloidinį stabilumą ir jo optines savybes vandeninėje aplinkoje ir skirtingose ląstelių auginimo terpėse.

Šiame darbe tyrėme KT ir Ce6 kompleksą, kuris suformuotas iš komerciškai prieinamų neigiamomis karboksilo grupėmis funkcionalizuotų (CdSe/ZnS) KT, kurių emisijos smailė ties 625 nm (ThermoFischer Scientific, USA), bei Ce6 (Frontier Scientific, JAV), kurie suformuoja kompleksą energijos pernašos iš sužadinto KT į Ce6. Sugerties matavimai buvo atliekami su Varian Cary 50 UV-Vis spektrofotometru, o fluorescencijos spektrai registruojami Varian Cary

Eclipse fluorimetru. Pagaminus KT-Ce6 kompleksą buvo tiriama jo stabilumas laike (4 dienas) jį dispergavus skirtingose terpėse, tokiose kaip distiliuotas vanduo, bei ląstelių auginimo terpės - OptiMEM, DMEM ir RPMI, siekiant rasti optimaliausią terpę, kurioje KT-Ce6 kompleksas yra stabiliausias tolesniems tyrimams su sveikų ir navikinių ląstelių kultūromis. Tyrimai buvo atliekami terpėse (identiškos kaip kad dirbant su ląstelėmis) esant antibiotikų (penicilino/streptomicino mišinio, P/S) ir terpėse be P/S.

Atliktų tyrimų rezultatai terpėse be P/S parodė, kad tiek distiliuotame vandenyje, tiek OptiMEM terpėje QDs, ce6 atskirai, bei KT-Ce6 kompleksas yra stabiliausias. Tuo tarpu tyrimų rezultatai terpėse esant P/S šiek tiek skiriasi. Lyginant rezultatus su ir be P/S, matyti, kad P/S tarsi turi įtakos tiek KT-Ce6 komplekso, tiek jo sudedamųjų dalių stabilumui. Ypač stebimas KT ir komplekso stabilumo sumažėjimas bei nuosėdos praėjus 48 val. distiliuotame vandenyje ir OptiMEM terpėje, praturtintoje P/S. Gauti rezultatai leidžia daryti išvadą, kad tiek KT-Ce6 kompleksas, tiek jo sudedamosios dalys skirtingose biologinėse terpėse elgiasi skirtingai.

Padėka: šis tyrimas remiamas Lietuvos mokslo tarybos lėšomis, paraiškos Nr. Nr.S-MIP-22-31.

Reikšminiai žodžiai: chlorinas e6, kvantinis taškas, kvantinio taško ir chlorino e6 kompleksas, spektroskopija, stabilumas.

Literatūra

- [1] A. G. Arranja, V. Pathak, T. Lammers, Y. Shi. *Pharmacol Res*, 115, 87–95 (2017)
- [2] A. C. Samia, X. Chen and C. Burda. *J. Am. Chem. Soc.* 125, 15736 (2003)
- [3] J. H. Correia, J. A. Rodrigues, S. Pimenta, T. Dong, Z. Yang. *Pharmaceutics*, 13, 1332 (2021)
- [4] S. Steponkiene, J. Valanciunaite, A. Skripka, R. Rotomskis. *J Biomed Nanotech.* 10, 679-686 (2014)

Natūralios kilmės fotosensibilizatoriaus vario chlorofilino fotostabilumo tyrimai

Photostability studies of natural photosensitizer copper chlorophyllin

Laura Kaziūnaite¹, Irina Buchovec²

¹Biomokslų institutas, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius, Lietuva.

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

laura.kaziunaite@gmc.stud.vu.lt

Antimikrobinė fotodinaminė inaktyvacija (AFI) yra perspektyvi biofotoninė technologija, kuri gali būti taikoma gydant įvairias bakterines infekcijas ar vėžinius susirgimus. AFI veikimui yra reikalingi trys pagrindiniai komponentai: netoksiška, šviesai jautri medžiaga (fotosensibilizatorius), atitinkamo bangos ilgio šviesa ir molekulinis deguonis. AFI esmę sudaro fotosensibilizatoriaus ir šviesos sąveika, kurios dėka deguonies prisotintoje aplinkoje sukeliama fotooksidacinė reakcija. Šios reakcijos yra skirstomos į I ir II tipo, o jų metu susidaro reaktyvios deguonies formos, kurios sukelia mikroorganizmų arba vėžinių ląstelių veiklos sutrikimus ir žūtį [1]. Dėl tokio universalios veikimo mechanizmo AFI yra labai plačiai taikomas metodas.

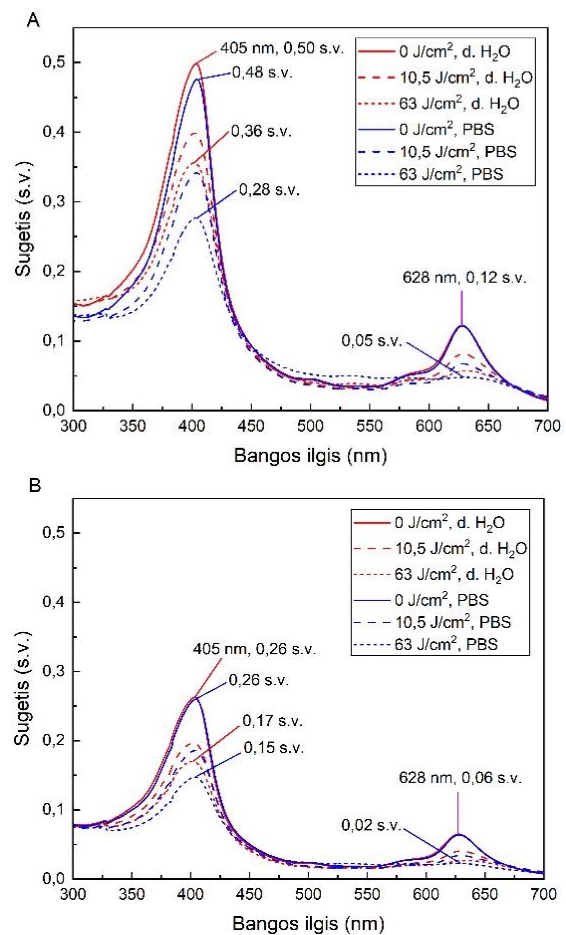
AFI efektyvumui įtakos turi įvairūs faktoriai, o ypač svarbu pasirinkti tinkamą fotosensibilizatorių. Toks fotosensibilizatorius turi būti tirpus vandenyje, fotostabilus bei turėti platų antimikrobinio veikimo spektrą esant santykinai mažai fotosensibilizatoriaus koncentracijai ir šviesos dozei. Pagrindinis šio darbo tikslas yra ištirti natūralios kilmės fotosensibilizatoriaus vario chlorofilino (Cu-Chl) fotostabilumo savybes, priklausomai nuo tirpalo tipo ir taikomos šviesos dozės.

Cu-Chl yra porfirinų klasei priklausantis, vandenyje tirpus junginys, kuris yra žinomas, kaip maisto dažiklis (E 141(ii)) ir gali būti sužadintas matomojo spektro šviesa, todėl yra saugus naudoti. Cu-Chl yra gaunamas iš chlorofilo a šarminės hidrolizės būdu, pakeičiant fitolio uodegas į Na^+ bei pakeičiant chlorofilo centre išsidėsčiusį Mg^{2+} joną Cu^{2+} [2].

Šio tyrimo metu pirmiausiai buvo atlikti šešių skirtingų Cu-Chl koncentracijų sugerties spektrų matavimai distiliuotame vandenyje (d. H_2O) ir 0,01 mol fosfatinio buferio druskos (PBS) tirpale. Spektrai ir du smailių maksimumai d. H_2O gauti ties 405 nm ir 627 nm. O PBS buferyje ties 405 nm ir 628 nm. Rezultatai buvo panašūs į literatūroje pateikiamus Cu-Chl sugerties spektrus.

Cu-Chl fotostabilumo tyrimams buvo pasirinktos $1,5 \times 10^{-5}$ mol/L ir $7,5 \times 10^{-6}$ mol/L koncentracijos. Tirpalai buvo apšvitinami Cu-Chl optimaliai sužadinančia 402 nm bangos ilgio šviesa, taikant 35 mW/cm² apšvietą ir švitinimo laiką nuo 1 min iki 30 min (šviesos dozės nuo 2,1 J/cm² iki 63 J/cm²). Fotostabilumo tyrimai taip pat buvo atliekami d. H_2O ir PBS buferyje. Atlikti matavimai parodė, kad abiejuose tirpaluose Cu-Chl išlieka pakankamai fotostabilus net taikant didžiausią 63 J/cm² šviesos dozę. Tačiau lyginant

Cu-Chl esantį d. H_2O ir PBS buferyje, buvo nustatytas didesnis junginio stabilumas d. H_2O , nepriklausomai nuo fotosensibilizatoriaus koncentracijos ir taikytos šviesos dozės (1 pav.).



1 pav. $1,5 \times 10^{-5}$ mol/L (A) ir $7,5 \times 10^{-6}$ mol/L (B) Cu-Chl fotostabilumo spektrai d. H_2O ir 0,01 M PBS tirpaluose

Reikšminiai žodžiai: antimikrobinė fotodinaminė inaktyvacija, vario chlorofilinas, fotostabilumas.

Literatūra

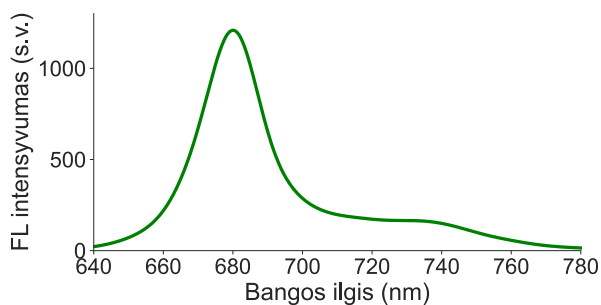
- [1] F. Cieplik, D. Deng, W. Crielaard, W. Buchalla, E. Hellwig, A. Al-Ahmad, and T. Maisch. Crit. Rev. Microbiol. **44**, 571-589 (2018).
- [2] I. Buchovec, A. Gricajeva, L. Kalėdienė, and P. Vitta. Int. J. Mol. Sci. **21**, 6932 (2020).

Nitellopsis obtusa* atsako į aplinkos veiksnius tyrimas fluorescencijos spektroskopijos metodu*Investigation of *Nitellopsis obtusa* response to environmental factors via fluorescence spectroscopy**Aušrinė Navickaitė¹, Vilmantas Pupkis¹, Saulius Bagdonas²¹Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
ausrine.navickaite@gmc.stud.vu.lt

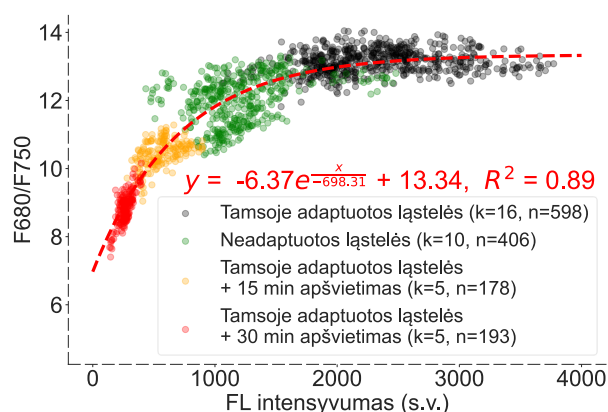
Pastaraisiais dešimtmečiais stebima vis spartesnė aplinkos sąlygų kaita, paveikianti augalų fotosintetinius procesus. Įvairių veiksnių sukeltam poveikiui detektuoti tinkami neinvaziniai spektroskopiniai metodai. Optiškai sužadintus augalines ląsteles stebima autofluorescencija, tiesiogiai konkuruojanti su fotocheminiais procesais dėl sužadavimo energijos, todėl leidžianti spręsti apie fotosintezę [1]. Nepaisant to, skirtingų aplinkos sąlygų pakitimai gali lemti panašų emisijos signalo atsaką. Norint pagerinti spektrometrinių metodų panaudojimą diagnostikai, būtinas tam tinkamų emisijos parametrų ir duomenų analizės metodų parinkimas.

Menturdumbliai – unikali modelinė sistema, paranki analizuoti išorinių veiksnių įtaką autofluorescencijai ląsteliniuose lygmeniu. Šiame darbe, kombinuojant optinę šviesolaidinę sistemą ir valdomą žingsninį variklį, autofluorescencija registruota 1 mm intervalais, išilgai menturdumblio *Nitellopsis obtusa* tarpubamblių ląstelių, žadinant mažo intensyvumo (< 1 mW) 405 nm šviesos diodu. Norint standartizuoti aplinkos veiksnių poveikį fotosintezei, ląstelės per naktį buvo laikomos 100 μM herbicido DCMU tirpale. Ši medžiaga slopina elektronų transportą fotosintezės metu [2], todėl turėtų paveikti registruojamus autofluorescencijos spektrus. Eksperimentuose naudoti bandiniai buvo laikomi skirtingame apšvietime: tamsoje, dienos apšvietime ($9,5 \pm 0,2 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), intensyviame ($829 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) 15 min arba 30 min trukmės baltos šviesos apšvietime.

Registruotiems *N. obtusa* autofluorescencijos spektrams (1 pav.) būdingi du maksimumai. Pagrindinis stebimas ties 680 nm, o antrasis artimas 739 nm. Ties šiais bangos ilgiais fiksuoti intensyvumai, kurių reikšmės kito išilgai ląstelės kartu su F680/F750 parametru, nurodančiu emisijos intensyvumą, registruotų ties 680 nm ir 750 nm, santykį.

1 pav. *N. obtusa* autofluorescencijos (FL) spektras

Išsamesnė maksimalios intensyvumo reikšmės (ties 680 nm) ir F680/F750 santykio sąsajos analizė atskleidė eksponentinį šių parametrų ryšį (2 pav.), leidžiantį prognozuoti skirtingo apšvietimo sąlygų nulemtus autofluorescencijos pakitimus. Bandinius paveikus 100 μM DCMU taip pat stebėtas eksponentinis sąryšis, tačiau šviesos nulemtas emisijos parametrų kitimas prognozuotas mažesniu tikslumu.



2 pav. *N. obtusa* autofluorescencijos (FL) intensyvumo ties 680 nm ir F680/F750 santykio sąryšis skirtingame apšvietime; k – ląstelių skaičius, n – registruotų spektrų skaičius, R^2 – determinacijos koeficientas

Pateikiami rezultatai patvirtina, kad pasirinktas optinis, neinvazinis metodas leidžia detektuoti tirtų aplinkos veiksnių lemiamus autofluorescencijos parametrų pakitimus ir juos prognozuoti. Išaiškinus, kad pateiktas modelis tinkamai apibūdina ir kitų išorinių veiksnių, paveikiančių fotosintetinius procesus, įtaką, taikomą metodą būtų galima naudoti diagnostikai.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, fluorescencijos spektroskopija, augalinės ląstelės

Literatūra

1. N. R. Baker, Annu Rev Plant Biol **59**, 89 (2008).
2. D. Kirilovsky, A. W. Rutherford, and A. L. Etienne, Biochemistry **33**, 3087 (1994).

Patogeninių bakterijų ir mielių identifikavimas FTIR ATR spektriniu metodu

Discrimination of pathogenic bacteria and yeast by means of FTIR ATR spectroscopy

Gerda Anužienė¹, Irmantas Arūnas Čiužas², Eglė Lastauskienė², Justinas Čeponkus¹

¹Vilniau universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius

gerda.anuziene@ff.vu.lt

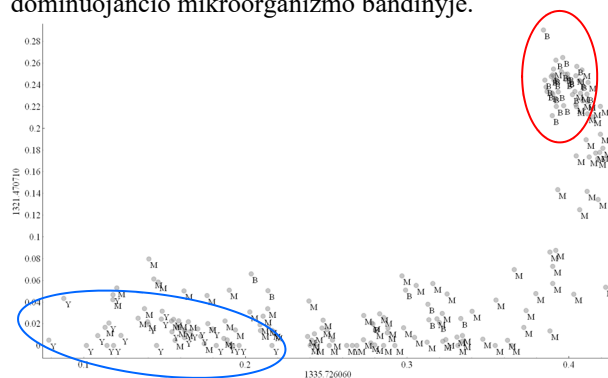
Mišrios infekcijos ant žmogaus odos yra dažniausiai susijusios su oportunistinių mikroorganizmų proliferacija, todėl bakterijų ir mielių sukeliančių infekcinių ligų atskyrimas yra labai svarbus medicinoje [1]. Bakterijų sukeliams infekcijoms gydyti yra skiriami antibiotikai, o mielių sukeliams infekcijoms gydyti – priešgrybeliniai vaistai. Mišrių infekcijų atveju paskirti medikamentai gali paveikti tik vieną patogeninių mikroorganizmų rūšį (eukariotus ar prokariotus), taip leidžiant plisti likusiai mikroorganizmų rūšiai, todėl ankstyvoje susirgimo stadijoje yra svarbu tiksliai identifikuoti mikroorganizmo rūšį ir paskirti tikslią gydymą. Taikant FTIR ATR spektrinį metodą nėra reikalingas specialus bandinių paruošimas, ATR IR sugerties spektro registravimas trunka kelias minutes todėl identifikavimas gali būti atliekamas greičiau.

Tyrimo metu buvo registruojami dviejų rūšių mielių (*Candida guilliermondii*, *Candida parapsilosis*) ir trijų rūšių bakterijų (*Staphylococcus aureus*, *Streptococcus pyogenes*, *Escherichia coli*) bei jų mišinių ATR IR sugerties spektrai. Iš viso užregistruoti ir analizėje naudoti 177 ATR IR sugerties spektrai.

Pagrindiniai skirtumai tarp bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektrų yra stebimi 1360 cm⁻¹ – 1280 cm⁻¹ ir 1183 cm⁻¹ – 930 cm⁻¹ spektriniuose intervaluose. Juostos stebimos minėtuose intervaluose yra daugiausia susijusios su ląstelės sienelėse esančiais angliavandeniais. Bakterijų ląstelės sienelė daugiausia yra sudaryta iš peptidoglikano susieto trumpais kryžminiais peptido tilteliais, o mielių ląstelė sudaryta iš chitino, gliukanų, chitozano ir glikozilintų baltymų.

Siekiant nustatyti kaip tiksliai gali būti identifikuojami mielių ir bakterijų ATR IR sugerties spektrai atlikta k-means statistinė analizė. Nustatyta, kad mielių ir bakterijų ATR IR sugerties spektrai gali būti identifikuojami 100 % tikslumu. Skirtingų mielių rūšių (*C. guilliermondii* ir *C. parapsilosis*) ATR IR sugerties spektrai taip pat gali būti identifikuojami 100 % tikslumu. Atlikus skirtingų bakterijų rūšių (*S. aureus*, *S. pyogenes*, *E. coli*) k-means statistinę analizę nustatyta, kad metodas yra tinkamas siekiant atkirti gram-neigiamų ir gram-teigiamų bakterijų ATR IR sugerties spektrus, tačiau sunku išskirti skirtingų gram-teigiamų bakterijų rūšių ATR IR sugerties spektrus, kadangi *S. aureus* ir *S. pyogenes* bakterijų ATR IR sugerties spektrai yra panašūs ir turi vienodas spektrines juostas. Šių bakterijų ląstelės sienelės struktūra, ląstelės forma ir dydis yra panašūs. Abiejų bakterijų ląstelės sienelė sudaryta iš storo peptidoglikano sluoksnio kuris sudaro kryžminius ryšius su baltymais.

Tyrimo metu registruoti bakterijų-mielių mišinių ATR IR sugerties spektrai siekiant nustatyti ar metodas yra tinkamas, patogeninių mikroorganizmų rūšių, iš kurių sudaryti mišiniai, identifikavimui. Registruoti *C. guilliermondii*-*S. aureus*, *C. parapsilosis*-*E. coli* ir *C. parapsilosis*-*S. pyogenes* mišinių ATR IR sugerties spektrai, kurie sumaišyti santykiais 1:1, 1:2, 1:3, 2:1, 3:1, 2:3, 3:2. Pagrindiniai skirtumai stebimi 1360 cm⁻¹ – 1280 cm⁻¹ ir 1183 cm⁻¹ – 930 cm⁻¹ spektriniuose intervaluose. Bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektruose intervale nuo 1360 cm⁻¹ iki 1280 cm⁻¹ yra stebimos dvi spektrinės juostos. Polisacharidų δ(CH) spektrinė juosta stebima 1343 cm⁻¹ – 1336 cm⁻¹ spektrinėje srityje ir Amidas III spektrinė juosta, kuri stebima 1318 cm⁻¹ – 1306 cm⁻¹. Kintant mišinio santykiui kinta ir minėtų spektrinių juostų padėtis, todėl pagal polisacharidams ir Amidas III priskiriamų spektrinių juostų poslinkį galima identifikuoti bandinio tipą. Siekiant įvertinti FTIR ATR spektrinio metodo pritaikymą klinikinėje diagnostikoje grynų bakterijų ir mielių bei jų mišinių ATR IR sugerties spektrams atlikta k-means statistinė analizė (1 pav.). Galima pastebėti, kad didelė dalis grynų bakterijų spektrų yra išsidėstę diagramos dalyje, kuri pažymėta raudona elipse, o didelė dalis grynų mielių spektrų išsidėstę diagramos dalyje, kuri pažymėta mėlyna elipse. Tarp minėtų diagramos dalių išsidėstę mišinių spektrai priklausomai nuo dominuojančio mikroorganizmo bandinyje.



1 pav. Bakterijų, mielių ir jų mišinių ATR IR sugerties spektrų k-means diagrama

Reikšminiai žodžiai: FTIR ATR, patogeniniai mikroorganizmai, k-means

Literatūra

- [1] A.Y. Peleg, D.A. Hogan, E. Mylonakis, *Nat. Rev. Microbiol.*, **8**, 340–349 (2010)

Antros harmonikos generavimo mikroskopija ir dviguba Stokso poliarimetrija kolageno vaizdinimui

Second Harmonic Generation Microscopy and Double Stokes Polarimetry for Collagen Imaging

Viktoras Mažeika¹, Mykolas Mačiulis², Lukas Kontenis³, Edvardas Žurauskas⁴, Martynas Riauka², Mehdi Alizadeh^{5,6}, Leonardo Uribe Castano^{5,6}, Kamdin Mirsanaye^{5,6}, Virginijus Barzda^{2,5,6}

¹Biomokslų institutas, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT- 10257, Vilnius, Lietuva

²Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 10, LT- 10222, Vilnius, Lietuva

³Light Conversion, Keramikų g. 2B, LT-10233, Vilnius, Lietuva

⁴Patologijos, teismo medicinos ir farmakologijos katedra, Medicinos fakultetas, Vilniaus universitetas, M.K. Čiurlionio g. 21/27, LT-03101, Vilnius, Lietuva

⁵Department of Physics, University of Toronto, 60 St. George St, Toronto, M5S 1A7, Canada

⁶Department of Chemical and Physical Sciences, University of Toronto, 3359 Mississauga Rd North, Mississauga, L5L 1C6, Canada

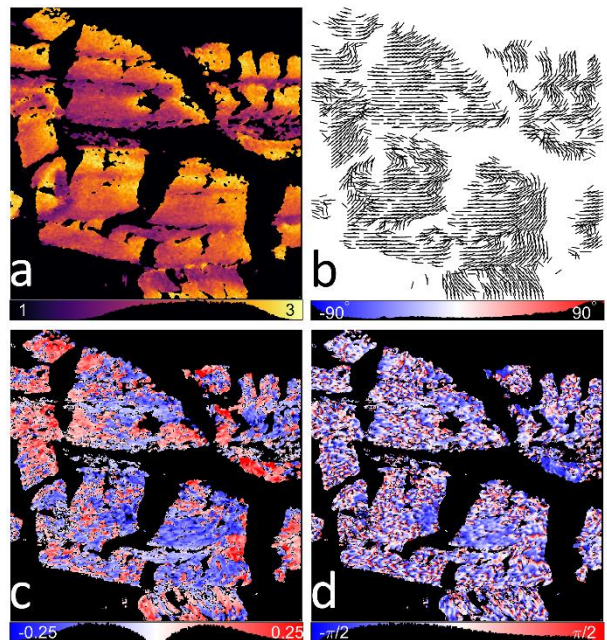
viktoras.mazeika@ff.stud.vu.lt

Antros harmonikos generavimo (SHG) mikroskopija yra metodas, leidžiantis vaizdinti necentrosimetrinės struktūros medžiagas. Ši jos savybė leidžia selektyviai vaizdinti tam tikras biologines struktūras, pvz., kolageną ar mioziną, todėl SHG mikroskopija yra tinkama įvairiems biologiniams tyrimams [1]. Kadangi SHG procesas priklauso nuo žadinančios šviesos poliarizacijos, atliekant poliarimetrinius matavimus galima gauti ultrastruktūrinę informaciją apie vaizdinamus objektus kiekviename vokselėje. SHG poliarimetrinei analizei yra naudojami įvairūs metodai, kaip *polarization in – polarization out* (PIPO) ar netiesinė Stokso-Miulerio poliarimetrija (NSMP) [2]. Šiame darbe bus pristatomas naujas analizės metodas, vadinamas dviguba Stokso poliarimetrija (DSP). Pagrindinis DSP privalumas, lyginant su prieš tai minėtais metodais – trumpa skaičiavimų trukmė, leidžianti greitai analizuoti didelės raiškos ir didelio ploto vaizdus.

SHG poliarimetriniai matavimai buvo atlikti naudojant skenuojantį netiesinį mikroskopą. Žadinimui buvo naudotas 1030 nm femtosekundinis Yb:KGW lazeris. Lazero spindulys ant bandinio buvo sufokusuotas su 20× 0,75 NA objektyvu, o skenavimui buvo naudojami galvanometrinių veidrodžių. SHG šviesa buvo išskiriama su 515 nm juostos praleidimo filtru ir detektuojama su fotodaugintuvu. Žadinančios ir surenkamos spinduliuotės poliarizacija buvo keičiama su pusės ir ketvirčio bangos ilgio plokštelėmis.

Darbo metu buvo vaizdinti žiurkės uodegos sausgyslės histologiniai pjūviai. Naudojant DSP buvo apskaičiuoti keliolika poliarimetrinių parametrų, iš kurių pagrindiniai – netiesinio jautrio tenzorius komponentų santykiai R ir C, fazių skirtumas tarp achiralinių ir chiralinių tenzorius komponentų Δ , susijęs su kolageno skaidulų poliškumu, ir kolageno skaidulos orientacija vaizdo plokštumoje δ . Buvo palyginti rezultatai, gauti su skirtingu kampu atpjautais sausgyslės pjūviais. DSP analizės rezultatai taip pat buvo palyginti su PIPO metodu gautais rezultatais. DSP poliarimetrinė netiesinė mikroskopija leidžia greitai apskaičiuoti poliarimetrinius parametrus dideliame bandinio plote, kas suteikia

informacijos apie audinio ultrastruktūrą ir gali būti panaudota histologinių pjūvių analizei vėžio diagnostikoje.



1 pav. Skersinio žiurkės uodegos sausgyslės pjūvio DSP parametrų vaizdai: a) R santykis, b) skaidulų orientacija δ , c) C santykis, d) fazės skirtumas Δ .

Reikšminiai žodžiai: SHG, mikroskopija, poliarimetrija, kolagenas.

Literatūra

- [1] A. Aghigh, S. Bancelin, M. Rivard, M. Pinsard, H. Ibrahim ir F. Legare, *Biophys. Rev.*, **15**, 43-70 (2023).
- [2] R. Cisek, A. Joseph, M. Harvey ir D. Tokarz, *Polarization-Sensitive Second Harmonic Generation Microscopy for Investigations of Diseased Collagenous Tissues*, *Front. Phys.* **9** (2021).

Magnio ir vario chlorofilinų-chitozono kompleksų fotostabilumo tyrimai

Photostability investigation of copper and magnesium-chitosan complexes

Gabrielė Vasiliauskaitė¹, Irina Buchovec²

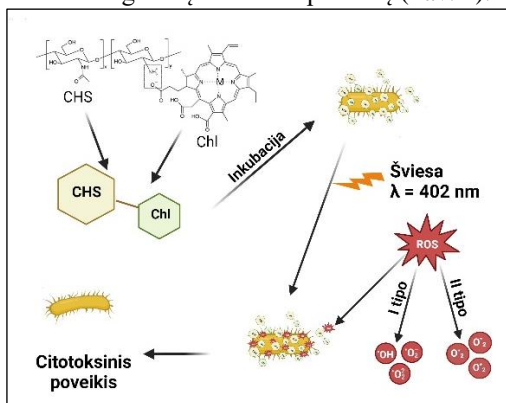
¹Vilniaus universitetas, Neurobiologijos ir biofizikos katedra, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

gabriele.vasiliauskaite@stud.vu.lt

Maisto sauga vis labiau kelia didelį susirūpinimą visame pasaulyje. Per užterštą maistą gali būti platinamos ligos, kurios kasmet daro daug žalos vartotojų sveikatai ir kelia ekonominių nuostolių maisto pramonei. Kita svarbi problema yra vis labiau augantis mikroorganizmų atsparumas antibiotikams bei antimikrobinėms technologijoms. Viena iš daug žadančių ir demonstruojančių efektyvius rezultatus technologijų yra antimikrobinė fotodinaminė inaktyvacija (AFI) [1]. AFI yra reikalingi fotosensibilizatoriai (FS), molekulinis deguonis ir šviesa, kurios pagalba FS yra sužadinas. FS sugėrus šviesos kvantą ir panaudojant molekulinį deguonį esantį aplinkoje yra generuojamos reaktyvios deguonies formos (angl. reactive oxygen species – ROS), kurios sukelia mikroorganizmų žūtį [2].

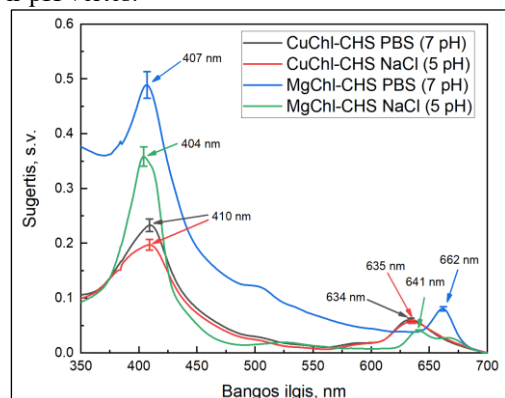
Kalbant apie maisto saugą svarbu užtikrinti žmogui nekenksmingų, aplinkai nepavojingų bei vandenyje tirpių FS panaudojimą. Tokiems junginiams priklauso natūralios kilmės FS magnio chlorofilinas (MgChl) ir vario chlorofilinas (CuChl), žinomi, kaip vandenyje tirpūs maistiniai dažikliai, sugeriantys šviesą regimajame spektre ir pasižymintys geromis fotocheminėmis savybėmis [3]. AFI poveikis mikroorganizmams yra plataus spektro, pažeidžiamos apvalkalo struktūros, DNR/RNR bei viduląsteliniai komponentai. Chl yra anijoniniai junginiai, kas apsunkina jų patekimą į ląstelių vidų. Po jų sužadavimo ROS generuojamos ląstelės išorėje, o tai sumažina AFI efektyvumą. Prie Chl prijungus kationinį chitozaną (CHS), yra suformuojamas chlorofilino-chitozono (Chl-CHS) kompleksas, kuris dėka ardančio CHS poveikio ląstelių išorinei membranai bei FS krūvio pakeitimo padeda po komplekso fotoaktyvavimo suformuoti ROS ne tik ląstelės išorėje, bet ir tarpląstelinėje erdvėje ar net ląstelės viduje, taip pažeidžiant daugiau ląstelės komponentų (Pav. 1).



1 pav. Chl-CHS kompleksu indukuotos AFI veikimo mechanizmo schema.

Pradinių tyrimų metu buvo atliktas sėkmingas abiejų kompleksų gaminimas ir išanalizuota jų spektrinių savybių priklausomybė nuo taikomo tirpalo tipo ir pH vertės. Pagrindinis šio tyrimo tikslas yra ištirti ir palyginti MgChl-CHS ir CuChl-CHS kompleksų fotostabilumo savybes, priklausomai nuo tirpalo tipo, pH reikšmės ir apšvitos dozės.

Pirmaisia, pagaminami pirminiai darbiniai 0,01% MgChl-1% CHS ir 0,01% MgChl-1% CHS kompleksų tirpalai dejonizuotame vandenyje, kurie yra praskiedžiami iki galutinės darbinės 0,001%-0,1% koncentracijos naudojant 0,9% NaCl ir 0,01M PBS tirpalus. Buvo pamatuoti Chl-CHS kompleksų sugerties spektrai abiejuose tirpaluose, kai pH vertė siekė 5 ir 7 (Pav 2). Gauti spektrai bei jų smailių maksimumai ir pozicijos variavo priklausomai nuo naudojamo tirpalo tipo ir pH vertės.



2 pav. 0,001% Chl-0,1% CHS kompleksu sugerties intensyvumo spektrai 0,9% NaCl ir 0,01M PBS tirpaluose.

Atliekant Chl-CHS kompleksų fotostabilumo tyrimus tirpalai buvo apšvitinami optimaliai Chl sužadinančia 402 nm bangos ilgio šviesa, taikant 35 mW/cm² apšvietą ir švitinimo laiką nuo 1 min iki 30 min (šviesos dozės nuo 2,1 J/cm² iki 63 J/cm²). Atlikti matavimai parodė, kad abiejų kompleksų fotostabilumo savybės labiausiai priklauso ne nuo tirpalo tipo, bet nuo tirpalo pH vertės ir taikomos šviesos dozės.

Reikšminiai žodžiai: fotosensibilizatorius, chlorofilino-chitozono kompleksas, spektroskopiniai matavimai, fotostabilumas.

Literatūra

- [1] Shengyu Z. Food Chemistry: X. 2021, 12: 100150.
- [2] Luksiene Z. IFSET. 2019, 463-472.
- [3] Buchovec I. Int. J. Mol Sci. 2020, 21, 6932.

Inkaruotų lipidų membranų struktūriniai tyrimai neutronų refleksometrijos metodu.

Structural Investigation of Tethered Bilayer Lipid Membranes by Neutron Reflectometry

Martynas Gavutis¹, Luke Clifton², Nico Paracini³, Ramūnas Valiokas¹

¹VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanoinžinerijos skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²ISIS Pulsed Neutron and Muon Source, Science and Technology Facilities Council, Rutherford Appleton Laboratory, Harwell Science and Innovation Campus, Didcot, Oxfordshire OX11 0QX, U.K.

³Institute for Cell and Molecular Biosciences, Newcastle University, Framlington Place, Newcastle upon Tyne, NE2 4HH, United Kingdom.

martynas.gavutis@ftmc.lt

Mes pristatome inkaruotų lipidų membranų eksperimentinę sistemą skirtą tirti lipidų ir lipidų dvisluoksnyje lokalizuotų membraninių baltymų sąveikas.

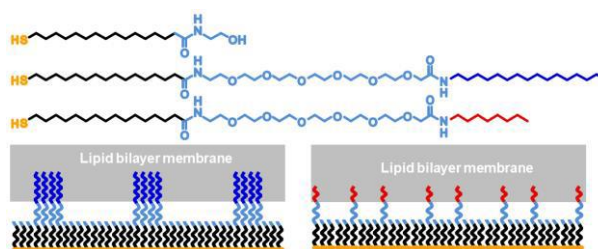
Paausotą substratą funkcionalizavome dviejų rūšių savaime susirenkančiais monosluoksniais (angl. self-assembled monolayers, SAMs). SAMus sudarė ilgos hidrofobines inkaruojančias grupes turinčios molekulės ir trumpos paviršių pasyvuojančios molekulės. Priklausomai nuo hidrofobinio inkaro ilgio inkaruojančios molekulės buvo atsitiktinai pasklidusios SAMo paviršiuje arba segreguodavo į inkaruojančių molekulių nanoklasterius [1] sudarytus ir >40 molekulių [2].

Skysčio celėje įleidus lipidų vezikulių tirpalą ant abiejų rūšių SAMų susiformavo inkaruotos lipidų membranos. Inkaruojančių grupių vaidmuo skleidžiantis vezikulėms buvo ištirtas naudojant kvarco kristalo mikrogravimetrijos su disipacijos stebėjimu (angl. Quartz Crystal Microbalance with Dissipation Monitoring, QCM-D) ir molekulinės dinamikos (angl. Molecular Dynamics, MD) metodus [3]. Paaiškėjo, kad hidrofobiniai inkarai ar jų nanoklasteriai įsiskverbia į adsorbavusias vezikules, jas destabilizuoja ir skatina plyšimą vedantį link plokščio inkaruoto lipidų dvisluoksniu susiformavimo. Taip pat nustatėme, kad užtenka labai mažo paviršinio hidrofobinių inkarų tankio (kelių mol%) norint suformuoti lipidų dvisluoksnį, todėl mūsų pristatoma eksperimentinė sistema gali būti vadinama minimaliai inkaruojančia (angl. minimum tethering system).

Šiame darbe mes nustatėme pusiausvyrinės inkaruotos membranos struktūrą naudodami neutronų refleksometrijos metodą. Neutronų refleksometrija yra ypač tinkama tirti hidratuotus paviršinius sluoksnius ir ko gero yra vienintelis metodas leidžiantis tiesiogiai tirti paslėptus vandens sluoksnius (angl. hidden aqueous interphase). Tyrimo metu mes nustatėme inkaruotų lipidų dvisluoksnių vertikaliąją struktūrą ant abiejų tipų SAMų. Įtikinamai pademonstravome, kad lipidų dvisluoksnis nuo SAMo paviršiaus yra atskirtas vandens tarpine (angl. water interlayer), kurios storis <1nm (pav.1). Tikėtina, kad keičiant inkaruojančios molekulės struktūrą galima būtų vandens tarpinės storį didinti arba mažinti.

Galiausiai mes pademonstravome mūsų sistemos tinkamumą tirti sudėtingas biologines sistemas. Mums pavyko suformuoti inkaruotą lipidų membraną su į ją įterptu porinu OmpF (angl. outer membrane protein F).

Apibendrinant, mūsų ląstelių membranas imituojanti eksperimentinė sistema yra tinkama kiekybiniam ląstelių membranose vykstančių sąveikų tyrimams.



1 pav. SAMų formavimui naudotų molekulių cheminės struktūros (viršuje). Inkaruotų lipidų membranų struktūrų piešiniai (apačioje viduryje).

Literatūra

- [1] H. H. Lee, M. Gavutis, Ž. Ruželė, R. Valiokas, B. Liedberg, J. Phys. Chem. B **122**, 8201 (2018).
- [2] E. Schulze and M. Stein, J. Phys. Chem. B **122**, 7699 (2018).
- [3] M. Gavutis, E. Schulze-Niemand, H. H. Lee, B. Liedberg, M. Stein, R. Valioka, Nanoscale **15**, 9759 (2023).

Reikšminiai žodžiai: Savaime susiorganizuojantys monosluoksniai, inkaruotos lipidų membranos, neutronų refleksometrija, paviršinė architektūra.

CuInZnS/ZnS kvantinių taškų poveikis vienlaščių dumblių autofluorescencijai Effect of CuInZnS/ZnS Quantum Dots on Autofluorescence of Microalgae

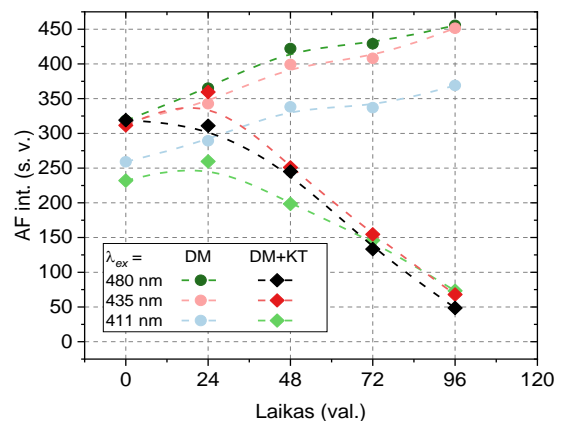
Rasa Miliukaitė, Agnė Kalnaitytė-Vengeliienė

Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centro Biofotonikos grupė, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
rasa.miliukaite@ff.stud.vu.lt, agne.kalnaityte@ff.vu.lt

Kvantinių taškų (KT) pritaikymo dėl jų nedidelio dydžio, plataus sugerties ir siauro bei intensyvaus fotoluminescencijos spektro tyrimai vis plačiau vykdomi tiek technologijų, tiek medicinos srityse [1]. Tačiau tuo pačiu, plėtojantis nanodalelių panaudojimo sritims, kyla taršos nanodariniams bei jų irimo metu išsiskyrusiais sunkiaisiais metalais grėsmė, o patekę į aplinką šie dariniai gali tiesiogiai paveikti ekosistemas. Plačiausiai naudojami kvantiniai taškai aplinkai gali būti pavojingi ne tik dėl nanodydžio, bet ir dėl šerdyje esančių toksiškų kadmio jonų, taigi šiems KT ieškoma mažiau kenksmingų alternatyvų. Tačiau, kaip naujo tipo kvantiniai taškai paveiktų dumblius, kurie yra mitybinės grandinės gamintojai ir maisto šaltinis pirminiams vartotojams, nėra daug duomenų. Pasitelkiant neinvazinius fluorimetrijos metodus, galima stebėti gyvų ląstelių autofluorescencinius (AF) atsakus, suteikiančius daug informacijos apie pokyčius fotosistemose [2], o tuo pačiu šie metodai tinka vertinti ir KT optinių savybių stabilumą eksperimentinėmis sąlygomis. Todėl šiame tyrime spektroskopiniais ir mikroskopiniais metodais, pasitelkiant žaliuosius vienlaščius dumblius *Desmodesmus communis*, siekiama iširti, kokią poveikį autotrofų autofluorescencijai turi CuInZnS/ZnS kvantiniai taškai (560 nm, Nanooptical materials, JAV).

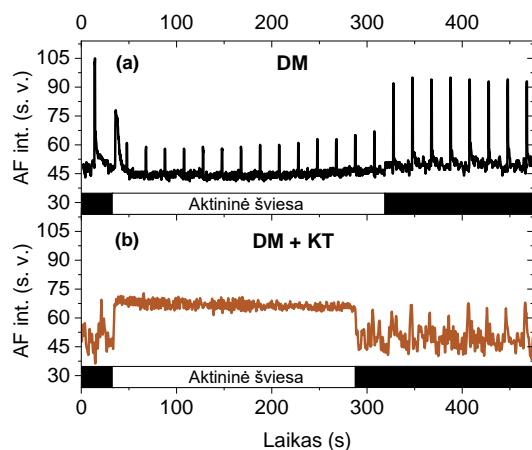
Šio tyrimo metu dumbliai (DM) buvo auginami specialioje dumblių auginimo terpėje MWC (pH 7,6), nuolatinėje baltoje šviesoje ($34 \mu\text{mol fotonų m}^{-2}\text{s}^{-1}$), $20 \pm 1^\circ\text{C}$ temperatūroje. Dumblių bandinių tripletai buvo paruošti su CuInZnS/ZnS-COOH KT (DM+KT), kurių galutinė koncentracija bandinyje $4 \mu\text{M}$. Nuostoviosios fluorescencijos ir Kautsky kreivių (išmatuotų moduluotų impulsų amplitudės fluorimetru (PAM)) matavimai atlikti kas parą 96 valandas po KT užnešimo.

Per pirmąją parą po DM paveikimo KT, AF intensyvumas reikšmingai nesiskyrė nuo kontrolinių bandinių, tačiau po 48 val. jis pradėjo mažėti žadinant visais pasirinktais bangos ilgiais ir po 96 val., žadinant ties 480 nm, buvo net 9 kartus mažesnis nei KT nepaveiktų dumblių (1 pav.). Po 24 val. PAM fluorimetru registruojamose DM AF kinetikoje per 20 s po aktyvios šviesos įjungimo registruojamas staigus AF intensyvumo sumažėjimas iki pastovaus F lygio (2a pav.) dėl fotosistemų prisitaikymo prie pakitusių apšvietimo sąlygų. Tačiau dumblių paveiktų KT AF intensyvumo sumažėjimas aktyvioje šviesoje neberegistruojamas, o AF intensyvumas nukrenta iki pradinės vertės tik išjungus šviesą (2b pav.). PSII fotocheminis kvantinis našumas (Y(II)) po 24 val. KT poveikio sumažėjo, kaip ir nefotocheminio fluorescencijos gesinimo kvantinis našumas (Y(NPQ)), kuris aprašo, kokia dalis sugertos šviesos energijos išsklaidoma šilumos pavidalu. Tuo



1 pav. Dumblių (DM) be ir su kvantiniais taškais (DM+KT) AF intensyvumo kitimas ties 683 nm.

tarpu kvantinis našumas $Y(\text{NO})$, aprašantis nereguliuojamus energijos nuostolius tiek šilumos, tiek fluorescencijos keliais, padidėja, taigi, tyrimo metu nustatyta, kad CuInZnS/ZnS-COOH KT *Desmodesmus communis* dumbliuose sutrikdo fotoadaptacijos procesą.



2 pav. DM (a) ir DM+KT (b) bandinių AF gesimo kinetikos (Kautsky kreivės) registruotos po 24 val.

Reikšminiai žodžiai: kvantiniai taškai, dumbliai, autofluorescencija, moduluotų impulsų amplitudės fluorimetrija (PAM).

Literatūra

- [1] M. A. Cotta, Quantum Dots and Their Applications: What Lies Ahead?, ACS Appl Nano Mater, 3, 6, 4920-4924, (2020).
- [2] K. Maxwell, G. N. Johnson, Chlorophyll fluorescence—a practical guide, J Exp Bot, 51, 345, 659–668, (2000).

Danties struktūrinio vientisumo atskleidimas mikroįtrūkimo vietoje jungiant rentgeno spindulių kompiuterinę mikrotomografiją su fotoluminescencine spektroskopija ir mašiniu mokymusi

Revelation of tooth structural integrity at the microcrack site by combining X-ray tomography with photoluminescence and machine learning

Irma Dumbryte¹, Maria Androulidaki², Donatas Narbutis³, Elena Jasiuniene⁴, Arturas Vailionis⁵, Saulius Juodkazis⁶, and Mangirdas Malinauskas⁷

¹Vilnius University, Institute of Odontology, Zalgirio str. 117, 08217 Vilnius, Lithuania

²Foundation for Research and Technology FORTH-Hellas, Institute of Electronic Structure & Laser, Microelectronics Research Group, N. Plastira 100, 70013 Voutes, Heraklion, Crete, Greece

³Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Sauletekio Ave. 9, 10222 Vilnius, Lithuania

⁴Kaunas University of Technology, Ultrasound Research Institute, Barsausko str. 59-A423, 51423 Kaunas, Lithuania

⁵Stanford University, Stanford Nano Shared Facilities, 616 Serra Mall 200, CA 94305 Stanford, USA

⁶Swinburne University of Technology, School of Science, Optical Sciences Centre and ARC Training Centre in Surface Engineering for Advanced Materials (SEAM), VIC 3122, Hawthorn, Australia

⁷Vilnius University, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, 10223 Vilnius, Lithuania

irma.dumbryte@mf.vu.lt

Although teeth microcracks (MCs) were recently characterized in three-dimensions (3D), it is still unknown whether there are changes in the tooth material within the MC compared to the enamel areas that are without cracks^{1,2}. **The aim of the study** was to combine an X-ray micro-computed tomography (μ CT) with photoluminescence (PL) and convolutional neural network (CNN) assisted voxel classification and volume segmentation for tooth structural integrity assessment at the MC site and verify this approach with extracted human teeth.

The samples were first examined using an X-ray μ CT and segmented with CNN to identify enamel, dentin, and cracks (Fig. 1). A new CNN image segmentation model was trained based on “*Multiclass semantic segmentation using DeepLabV3+*” example and was implemented with “*TensorFlow*”. Secondly, buccal and palatal teeth surfaces with MCs and sound areas were used to obtain fluorescence spectra illuminated with laser exposure wavelengths: 325 nm (CW) and 266 nm (0.5 ns pulsed).

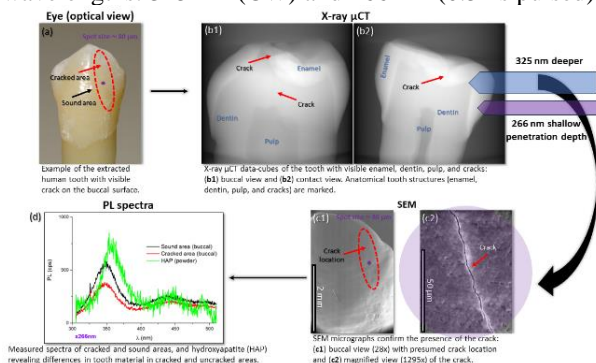


Fig. 1. Graphical abstract of the study.

X-ray μ CT technique enhanced with CNN was employed allowed the recognition, detection, and 3D characterization of all tooth MCs, precisely identifying those cracks that were analyzed using PL (Fig. 2).

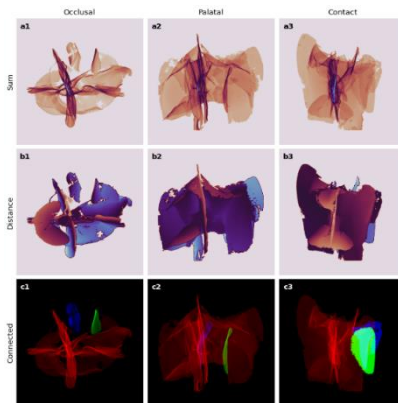


Fig. 2. Arrangement of microcracks inside the tooth.

With both excitation wavelengths, the fluorescence signal intensity associated with the crack was significantly reduced (by a factor of 1.5 for distinct wavelength peaks), while it was higher in the region of the sound tooth spectrum around the MC. The ability to assess the spectral changes in the tooth MC and compare them with the spectrum of the sound enamel revealed differences in the material elemental composition along the crack line, with a variation in the hydroxyapatite crystals at the cracked versus sound area. This suggests a possible loss of structural integrity at the MC site.

The proposed approach – using X-ray μ CT in combination with PL and CNN assisted segmentation – reveals the possibilities for tooth structural integrity assessment at the crack area. It offers distinct precision and versatility and can be applied for all the teeth microstructure and surface mapping analysis.

Keywords: 3D imaging, artificial intelligence, enamel damage, spectroscopy.

Literature

- [1] I. Dumbryte et al. Sci. Rep., **11**, 14810 (2021).
- [2] I. Dumbryte et al. Sci. Rep., **12**, 22489 (2022).
- [3] I. Dumbryte et al. Opto-Electron. Sci., submitted (2023).

Netiesinė multimodalinė poliarimetrinė mikroskopija melanomos diagnostikai ir prognostikai, naudojant mašininį mokymąsi

Machine learning-aided nonlinear multimodal polarimetric microscopy for human melanoma diagnostics and prognostics

Martynas Riauka¹, Viktoras Mažeika¹, Vincas Urbonas^{2,3}, Edvardas Žurauskas^{4,5}, Lukas Kontenis⁶, Kamdin Mirsanaye⁷, Leonardo Uribe Castano⁷, Mykolas Mačiulis¹, Mehdi Alizadeh⁷, Vitalijus Karabanovas⁸, Ričardas Rotomskis⁸, Virginijus Barzda^{7,9}

¹Laser Research Centre, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio Av. 3, Vilnius LT-10222, Lithuania

²Laboratory of Clinical Oncology, National Cancer Institute, Santariškių St. 1, 08406 Vilnius, Lithuania

³Department of Medical Oncology, National Cancer Institute, Santariškių St. 1, 08406 Vilnius, Lithuania

⁴National Centre of Pathology, P. Baublio St. 5, LT-08406, Vilnius, Lithuania

⁵Department of Pathology, Forensic Medicine and Pharmacology, Faculty of Medicine, Vilnius University, M. K. Čiurlionio St. 21/27, LT-03101, Vilnius, Lithuania

⁶Light Conversion, Keramikų St. 2B, LT-10234, Vilnius, Lithuania

⁷Department of Chemical and Physical Sciences, University of Toronto Mississauga, 3359 Mississauga Rd. North, Mississauga, L5L 1C6, Canada

⁸Biomedical Physics Laboratory, National Cancer Institute, P. Baublio St. 3b, LT-08406 Vilnius, Lithuania

⁹Department of Physics, University of Toronto, 60 St. George St., Toronto, M5S 1A7, Canada
martynas.riauka@ff.vu.lt

Nonlinear multimodal polarimetric microscopy (NMPM) is a technique allowing extensive analysis of cellular and extracellular components in hematoxylin and eosin-stained (H&E) as well as unstained histological sections of biopsy tissue.

The processes of carcinogenesis and metastasis affect both the extracellular matrix (ECM) and the cellular components of the tissue. The ECM is comprised mostly of collagen, which is a non-centrosymmetric material and is known to generate second harmonic (SHG) signals, dependent on the polarization of the incoming laser light [1]. SHG signal analysis is performed in the framework of the double Stokes-Mueller polarimetry (DSMP) formalism. It has been shown that such analysis coupled with machine learning is suitable for breast [2] and lung [3] cancer diagnostics.

In this work, H&E-stained histological sections of melanoma were investigated. The samples corresponded to different types and stages of melanoma and analysis included two more modalities, i.e. multiphoton excitation fluorescence (MPEF) as well as third-harmonic generation (THG). In the MPEF channel, eosin-stained ECM is observed whereas hematoxylin-stained cell nuclei are highlighted in the THG channel [4].

Data from all three channels was investigated by means of texture analysis, statistical testing and the combination of both supervised and unsupervised machine learning. Additionally, for the analysis of nuclear morphology a segmentation algorithm was developed and the morphological features were examined using deep learning.

It was shown that the analysis can be applied for tasks, such as tumor margin delineation, differentiation of tumorous and inflammatory regions, identification of type and staging of melanoma and also has a potential of recognizing the cases of rapidly spreading melanoma.

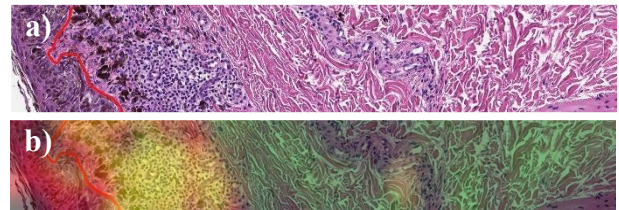


Figure 1. Human melanoma histological section. Brightfield image (a) and machine learning-classified three channel map superimposed on the brightfield image (b). Green color corresponds to normal tissue, whereas yellow and red highlights the inflammatory and tumorous regions. Red line corresponds to the tumor margin, as identified by a pathologist.

Key words: Stokes-Mueller polarimetry, nonlinear multimodal microscopy, texture analysis, nuclei segmentation, machine learning, neural networks, melanoma, digital histopathology.

Literature

1. Samim M, Krouglov S, Barzda V. Double Stokes Mueller Polarimetry of Second-Harmonic Generation in Ordered Molecular Structures. *J Opt Soc Am B* (2015) 32:451–60.
2. Mirsanaye, K.; Uribe Castano, L.; Kamaliddin, Y.; Golaraei, A.; Augulis, R.; Kontenis, L.; Done, S.J.; Žurauskas, E.; Stambolic, V.; Wilson, B.C.; et al. Machine Learning-Enabled Cancer Diagnostics with Widefield Polarimetric Second-Harmonic Generation Microscopy. *Sci. Rep.* 2022, 12, 10290.
3. Mirsanaye, K., Uribe Castano, L., Kamaliddin, Y., Golaraei, A., Kontenis, L., Zurauskas, E., R. Navab, K. Yasufuku, M.-S. Tsao, B. C. Wilson, V. Barzda (2022). Unsupervised determination of lung tumor margin with widefield polarimetric second-harmonic generation microscopy. *Sci. Rep.* 12, 20713.
4. A. Tuer, D. Tokarz, N. Prent, R. Cisek, J. Alami, D. J. Dumont, L. Bakueva, J. Rowlands, and V. Barzda, “Nonlinear multicontrast microscopy of hematoxylin-and-eosin-stained histological sections,” *J. Biomed. Opt.* 15(2), 026018 (2010)

Baltymų struktūriniai tyrimai naudojant DEER spektroskopiją

DEER spectroscopy for investigation of protein structures

Aistė Peštenytė¹, Gediminas Usevičius¹, Ieva Baronaitė², Darius Šulskis², Jūras Banys¹, Mantas Šimėnas¹

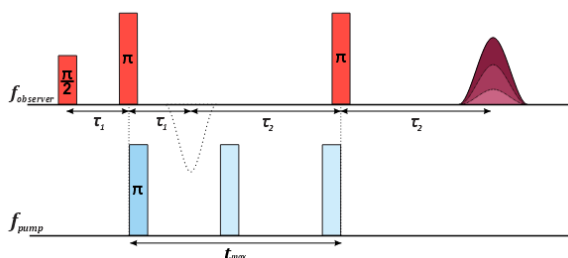
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius

²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 7, Vilnius

aiste.pestenyte@ff.stud.vu.lt

Dvigubo elektrono – elektrono rezonanso (DEER) spektroskopija yra plačiai paplitusi struktūrinės biologijos srityje, suteikianti vertingos struktūrinės ir dinaminės informacijos apie įvairias biologines sistemas, kaip baltymai, RNR ir DNR [1].

DEER yra impulsinis elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) eksperimentas, kurio pagalba galima nustatyti atstumų pasiskirstymą tarp dviejų nesuporuotų elektronų sukinių nanometrinėje skalėje. DEER remiasi dviejų skirtingų dažnių mikrobangų impulsais, kurių metu vienas elektrono sukiny yra detektuojamas impulsiniu EPR metodu, o kitas – žadinamas, sukant jo įmagnetėjimo vektorių (1 pav.) [2]. Eksperimento metu stebimas dipolinės sąveikos kitimas tarp sąveikaujančių nesuporuotų elektronų, o tai leidžia nustatyti atstumą tarp jų.



1 pav. DEER eksperimento mikrobangų impulsų seka.

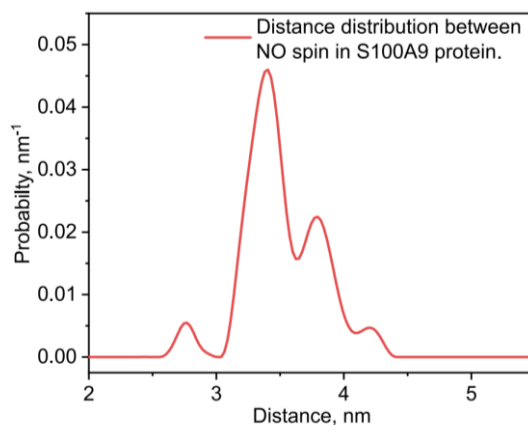
DEER tyrinėjamos sistemos dažniausiai sudaro biologinės sistemos, kurių didžioji dalis neturi nesuporuotų elektronų, t.y. negali būti studijuojamos EPR spektroskopijos būdu. Todėl į pasirinkamą molekulės vietą įtraukiamas nesuporuotas elektronas sukinių žymeklio pavidalu, naudojant *site-directed spin-labeling* (SDSL) metodą [2].

Greta DEER metodikos, siekiant nustatyti molekulės struktūrą, taip pat naudojama Rentgeno spindulių kristalografija, tačiau ji neleidžia nustatyti baltymų struktūrų tirpale. Kitas paplitęs metodas – branduolių magnetinis rezonansas (BMR), tačiau jis nėra tinkamas itin didelių baltymų tyrimams dėl itin sudėtingos BMR spektro interpretacijos bei gana žemo matavimų jautrumo [1]. Krioelektroninė mikroskopija (cryo-EM) taip pat suteikia vertingos informacijos apie molekulių struktūrą, tačiau ji gali būti naudojama tik dideliems baltymams (150-300 kDa). DEER šių apribojimų neturi ir gali būti naudojamas įvairios morfologijos bei dydžio baltymų tyrimams. [2].

Šiuo metu DEER yra laikomas galingu įrankiu tirti molekulių struktūrą [1], kadangi galima stebėti lokalias

struktūros pokyčius, sąveikas su kitomis molekulėmis, atstumo pokyčius tarp elektronų sukinių, vizualizuoti konformacinį nevienalytiškumą ir dinamiką.

Siekiant praktiškai nustatyti DEER spektroskopijos galimybes ir apribojimus, mes tyrėme S100A9 baltymą, turintį kalcį rišančius domenus, ir nustatėme atstumo pasiskirstymą tarp dviejų cisteino grupių (2 pav.). Šiame bandinyje kaip sukinių žymeklis buvo panaudotas nitroksido radikalas.



2 pav. Atstumo pasiskirstymas tarp elektronų sukinių S100A9 baltyme.

Reikšminiai žodžiai: DEER, EPR, ESR, spin labels.

Literatūra

- [1] Indra D. et al., *Use of electron paramagnetic resonance to solve biochemical problems*, Biochemistry 2013, 52, 35, 5967–5984
- [2] Jeschke G. *DEER distance measurements on proteins*. Annual review of physical chemistry. 2012 May 5;63:419-46.

Sulfonatofenil porfirinų agregatų formavimosi ir savybių priklausomybė nuo pH ir koncentracijos

The formation and properties of sulfonatophenyl porphine aggregates depending on pH and concentration

Agnė Kalnaitytė-Vengeliene¹, Parveen Akhtar², Ricardas Rotomskis^{1,3}, Győző Garab^{2,4,5}, Virginijus Barzda^{1,6,7} and Saulius Bagdonas¹

¹ Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centro Biofotonikos grupė, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lietuva

² Eötvös Loránd Research Network, Biological Research Centre, Institute of Plant Biology, Temesvári körút 62, Szeged 6726, Hungary

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

⁴ Biofotonika Research and Development Ltd., Dózsa u. 7, Szeged 6720, Hungary

⁵ University of Ostrava, Faculty of Science, Department of Physics, Chittussiho 10, Ostrava CZ-710 00, Czech Republic

⁶ University of Toronto Mississauga, Department of Chemical and Physical Sciences, 3359 Mississauga Rd, Mississauga L5L 1C6, Canada

⁷ University of Toronto, Department of Physics, 60 St. George St. Toronto, Toronto M5S 1A7, Canada

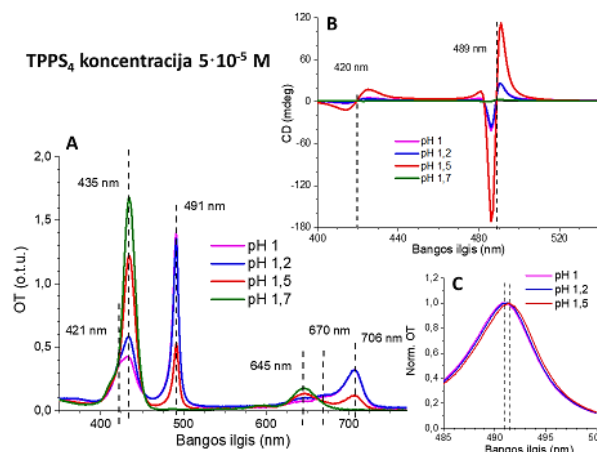
agne.kalnaityte@ff.vu.lt

Meso-tetra(4-sulfonatofenil)porfinas (TPPS₄) plačiai ištirtas dėl savo gebėjimo sudaryti nekovalentiškai surištas supramolekulinės struktūras. Nors dauguma tyrimų atliekami su homogeniškais šimtų nanometrų dydžio agregatais, skirtingai išdėstyti agregatai gali toliau sąveikauti ir susiburti į gyviems organizmams būdingas sudėtingas hierarchines struktūras [1]. TPPS₄ molekulių savaiminis susirinkimas ir chiralinių agregatų susidarymas labai priklauso nuo tirpalo sudėties, koncentracijos, pH ir net įvairių išorinių veiksnių, tokių kaip sukūrinis maišymas ar sukimasis. TPPS₄ ir kitų porfirinų agregatai jau pritaikomi keliose srityse, pvz., drėgmės biojutikliuose, dirbtinės šviesos energijos surinkimo ir perdavimo sistemose bei kaip fotodinaminės terapijos priemonės. Kokios terpės ar palinkos savybės paskatina TPPS₄ molekules savaime organizuotis į aukštesnio sudėtingumo hierarchines mikrostruktūras, nėra gerai suprantama, todėl ir buvo šio tyrimo motyvacija.

Tyrimė optiniais metodais tirtos skirtingos TPPS₄ koncentracijos nuo 10⁻⁴ iki 10⁻⁶ M, kai pH1, taip pat ir skirtingo pH (nuo 0,5 iki 4) terpės su trimis TPPS₄ koncentracijomis (5x10⁻⁵, 2x10⁻⁵ ir 10⁻⁵ M). Bandiniai buvo paruošti iš raudonų miltelių tirpinant TPPS₄ distiliuotame vandenyje. Siekiant gauti žalius agregatus, pridedamas atitinkamas kiekis HCl rūgšties (1 M), kad pH būtų sumažintas (C_{TPPS4} ≈ 10⁻⁵ M), o kai kuriuose bandiniuose TPPS₄ koncentracija didinta, pridedant monomerinio vandeninio tirpalo (C_{TPPS4} ≈ 10⁻⁴ M).

Optinio tankio (OT) spektrai TPPS₄ pH1 bandiniuose turi monomerų juostas ties 435 nm, 645 nm ir 706 nm, o agregatų juostos yra ties 421 nm, 491 nm ir 706 nm (1A pav.). Normuoti spektrai ties 491 nm agregatų juosta (1C pav.) parodė jos praplatėjimo ilgabangėje spektro pusėje sąsają su apskritiminių dichroizmo (CD) signalo dydžiu (1B pav.). Buvo nustatyta, kad didžiausias CD signalas gautas bandiniuose su juostos ties 491 nm didžiausiu išplitimu (poslinkiu) į raudonąją spektro pusę. Taip pat buvo pastebėtas šios juostos (491 nm) ir juostos ties 421 nm pokyčių susietumas, kas nurodytų jų kilmę iš tapačių

porfirininių struktūrų. Nustatyta, kad didinama porfirino koncentracija ar mažinamas pH bei didėjantis OT ties agregatų juosta dar nereiškia, kad bus gaunamas didžiausias CD signalas, kuris atspindi molekulių chiralumą. Didžiausias CD signalas buvo nustatytas pH 1,5 tirpaluose, o TPPS₄ koncentracija buvo 5 · 10⁻⁵ M.



1 pav. TPPS₄ (C_{TPPS4} = 5 · 10⁻⁵ M) skirtingo pH (1; 1,2; 1,5 ir 1,7) vandeniniame tirpale optinio tankio (A), apskritiminių dichroizmo (B) ir normuoto optinio tankio ties 490 nm TPPS₄ agregatų smailės juosta (C) spektrai.

Reikšminiai žodžiai: meso-tetra(4-sulfonatofenil)porfinas (TPPS₄), apskritiminių dichroizmas, agregacija, pH.

Literatūra

- [1] M. Pleckaitis, F. Habach, L. Kontenis, G. Steinbach, G. Jarockyte, A. Kalnaityte, I. Domonkos, P. Akhtar, M. Alizadeh, S. Bagdonas, V. Karabanovas, G. Garab, R. Rotomskis, V. Barzda, Structure and principles of self-assembly of giant “sea urchin” type sulfonatophenyl porphine aggregates, Nano Research, (2021), ISSN 1998-0124, doi.org/10.1007/s12274-021-4048-x.

Apkonvertuojančių nanodalelių paviršiaus modifikavimas ir teranostinio komplekso su chlorinu e6 formavimas

Surface Modification of Upconverting Nanoparticles and Formation of Theranostic Complex

Emilė Pečiukaiytė^{1,2}, Simona Steponkienė¹, Eglė Ežerskytė^{1,3}, Vaidas Klimkevičius^{1,3}, Vitalijus Karabanovas^{1,4}

¹Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, Baublio 3B, LT-08406, Vilnius, Lietuva

²Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius, Lietuva

³Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko 24, LT-03225, Vilnius, Lietuva

⁴Chemijos ir Bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino Technikos Universitetas, Sauletekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

emile.peciukaiyte@nvi.lt

Vėžys vis dar išlieka viena labiausiai žmoniją paveikusių ligų, kuri kasmet nusineša šimtus tūkstančių gyvybių. Šiuo metu onkologinių ligų diagnostikai ir/ar terapijai taikomi metodai negali užtikrinti ilgalaikių efektyvių ligos gydymo rezultatų. Dėl to, reikalingas naujų technologijų kūrimas kovai su vėžiu [1].

Nanodalelių (ND) panaudojimas vėžio teranostikoje, taip apjungiant diagnostiką ir terapiją, yra sparčiai vystoma šiuolaikinių biomedicininės mokslų sritis. Tyrimuose naudojamos įvairios ND, kaip kvantiniai taškai, aukso, silicio ar retųjų žemės metalų ND, kurių paviršių modifikuojant įvairiais funkciniais ligandais, galima išplėsti jų funkcionalumą. Pavyzdžiui, koreguoti optines savybes, suformuoti ND/vaistų kompleksus ir t.t. [2].

Iš visų teranostikoje naudojamų ND, išsiskiria apkonvertuojančios nanodalelės (AKND), kurios turi siauras emisijos juostas, mažą foninę šviesos liuminescenciją, pasižymi geru biosuderinamumu. AKND dalelių pagrindinis privalumas – gebėjimas konvertuoti mažos energijos spinduliuotę (infraraudonąją (NIR)) į didelės energijos šviesą (regimąją ar net UV). Dėl biologiniams audiniams būdingo optinio skaidrumo „lango“ (600 nm – 1200 nm) NIR spinduliuotė gali pasiekti gilesnius biologinius audinius, o apkonversijos procesų metu sugeneruota didesnė energijos spinduliuotė gali aktyvuoti prie AKND prijungtą fotosensibilizatorių (FS). Tokios sistemos yra tinkamos, ir gali būti panaudotos, daugiafunkcės teranostinės nanoplatformos kūrimui ir vystymui [3].

AKND sintezės metu naudojami hidrofobiniai ligandai, todėl šios dalelės tiesiogiai negali būti disperguotos vandeninėse terpėse. Siekiant pakeisti AKND terpę iš organinės į vandeninę, yra būtinas papildomas paviršiaus modifikavimas. Fosfolipidai, amfifilinės medžiagos, kurių sudėtyje yra hidrofobinių-hidrofilinių grupių, gali efektyviai adsorbuotis ant AKND paviršiaus [3]. Tačiau yra mažai žinoma apie fosfolipidų įtaką AKND fizikinėms savybėms, todėl šių tyrimų metu siekta išsiaiškinti, kokie fosfolipidai ar jų mišiniai optimaliausi teranostinio AKND ir FS komplekso kūrimui.

Tyrimo tikslas - atlikti $\text{NaGdF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}$ / $\text{NaGdF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Nd}^{3+}$ AKND paviršiaus modifikavimą fosfolipidais ir atrinkti AKND ir fotosensibilizatoriaus

(chlorino-e6 (Ce6)) kompleksą, pasižymintį efektyviausiu singuletinio deguonies generavimu.

AKND paviršiaus modifikavimas buvo atliktas naudojant nesočiuosius ir sočiuosius fosfolipidus, turinčius polietilenglikolio pakaitus. AKND optinės savybės buvo išmatuotos spektrometru FLS920 (Edinburgh Instruments Ltd), žadinant 980 nm bangos ilgio lazeriu. Teranostinio komplekso AKND-Ce6 fotosensibilizacinės savybės įvertintos naudojant singuletinio deguonies sensorių (SOSG angl. *singlet oxygen sensor green*). AKND-Ce6 kompleksai, įpylus SOSG reagento, buvo švitinami 980 nm lazeriu (1.55 W) nuo 2 min iki 60 min, ir matuojami SOSG fluorescencijos spektrai.

Nustatyta, kad po AKND modifikavimo fosfolipidų mišiniu, vandenyje homogeniškai pasiskirstė ir nebuvo matyti nuosėdų tik lecitinu (1), hidrintu sojų fosfatidilcholinu su fosfatidiletanolaminu-polietilenglikoliu (2) ir papildomai su cholesteroliu (3) modifikuotose AKND dispersijose. Išmatavus emisijos spektrus, nustatyta, kad AKND smailių padėtys dėl modifikacijos proceso nepakito, o emisijos intensyvumas, praėjus 21 dienai po modifikacijos, sumažėjo nežymiai.

AKND, modifikuotos (2) fosfolipidų mišiniu ir kompleksuotos su Ce6, efektyviausiai generavo singuletinį deguonį, apšvietus 980 nm lazeriu. Ce6 tiesiogiai nesugeria 980 nm spinduliuotės, todėl SOSG sensoriaus fluorescencijos signalo didėjimas yra siejamas su Ce6 sužadinimu per energijos pernašą iš AKND į Ce6.

Apibendrinant, fosfolipidais modifikuotos AKND išlaiko savo optines savybes, yra stabilios vandeninėse terpėse, o suformuotos AKND-Ce6 daugiafunkcės nanoplatformos yra potencialus įrankis vėžio teranostikai.

Padėka: šis tyrimas remiamas Lietuvos mokslo tarybos lėšomis, paraiškos Nr. Nr.S-MIP-22-31.

Literatūra

- [1] Arranja, A. G., Pathak, V., Lammers, T., Shi, Y. (2017). Tumor-targeted nanomedicines for cancer theranostics, *Pharmacological Research* (Vol. 115, pp. 87–95).
- [2] Liang, G., Wang, H., Shi, H. et al. Recent progress in the development of upconversion nanomaterials in bioimaging and disease treatment. *J Nanobiotechnol* 18, 154 (2020).
- [3] Skripka, A., Karabanovas, V., Jarockyte, G., Marin, R., Tam, V., Cerruti, M., Rotomskis, R., & Vetrone, F. (2019). Decoupling Theranostics with Rare Earth Doped Nanoparticles. In *Advanced Functional Materials* (Vol. 29, Issue 12, p. 1807105).

Chemoterapinių vaistų poveikio žmogaus krūties vėžio ląstelių lipidinių pūslelių poliškumui tyrimas taikant raudonai fluorescuojantį BODIPY fluoroforą

Exploring the effect of chemotherapy drugs on the polarity of lipid droplets in human breast cancer cells using a red-emitting BODIPY fluorophore

Džiugas Jurgutis^{1,2}, Rokas Žvirblis^{3,4}, Karolina Maleckaitė³, Jelena Dodonova-Vaitkūnienė⁴, Rugilė Žilėnaitė³, Sigitas Tumkevičius⁴, Aurimas Vyšniauskas³, Vitalijus Karabanovas^{1,5}

¹Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406, Vilnius

²Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius

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

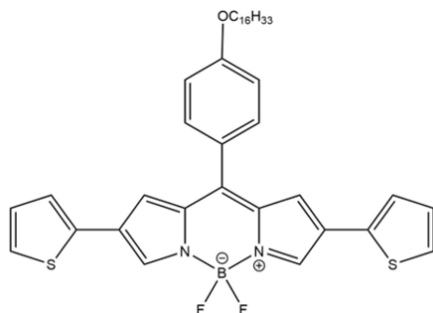
⁴Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius

⁵Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
dziugas.jurgutis@nvi.lt

Lipidinės pūslelės – organelės, kurios svarbios ląstelių metabolizmui, lipidų sintezei bei atlieka apsaugos nuo lipotoksiškumo funkciją. Vėžinėse ląstelėse padidėjęs lipidinių pūslelių skaičius siejamas su padidėjusiu atsparumu chemoterapinių vaistų poveikiui [1]. Tačiau chemoterapinių vaistų poveikis lipidinėms pūslelėms nėra pakankamai ištirtas.

Siekiant nustatyti, ar tam tikri chemoterapiniai vaistai veikia lipidines pūsleles, kaip indikatorius gali būti pasitelkiamas poliškumas. Nustatyta, kad lipidinių pūslelių poliškumo pokyčiai atsiranda dėl oksidacinio streso arba tokių procesų, kaip apoptozė, ar ferroptozė metu [2]. Lipidinių pūslelių poliškumo pokyčių nustatymas chemoterapijos metu leis geriau suprasti chemoterapinių vaistų, pavyzdžiui, cisplatinos ir paklitakselio, farmakodinamines savybes. Šie chemoterapiniai vaistai yra vieni iš pagrindinių gydant krūties vėžį, tačiau tiek cisplatinos, tiek paklitakselio citotoksinis poveikis yra nepakankamai ištirtas ląstelių lygmenyje.

Vienas patogiausių būdų poliškumo matavimui yra poliškumui jautrių fluoroforų taikymas. Šiame tyrime naudojamas raudonai fluorescuojantis boro dipirometeno (BODIPY) pagrindą turintis poliškumo jutiklis BP-OC₁₆ TP2 (1 pav.) [3]. Šios molekulės fluorescencijos gyvavimo trukmės pokyčiai ląstelėse išmatuojami taikant fluorescencijos gyvavimo trukmės vaizdinimo mikroskopiją (FLIM), kas leidžia gauti viduląstelinį poliškumo „žemėlapią“.



1 pav. Tyrime taikomo poliškumui jautraus fluoroforo BP-OC₁₆ TP2 struktūra [3].

Šio tyrimo tikslas – nustatyti cisplatinos ir paklitakselio poveikį MCF-7 žmogaus krūties vėžio ląstelių lipidinių pūslelių poliškumui.

Prieš BP-OC₁₆ TP2 taikymą poliškumo matavimui, nustatyta, kad fluoroforas nėra citotoksiškas. Naudojant skenuojantį lazerinį konfokalinį mikroskopą ir komercinį lipidinių pūslelių dažą BODIPY 493/503 patvirtinta, kad BP-OC₁₆ TP2 susikaupia MCF-7 ląstelių lipidinėse pūslelėse. Taip pat, taikant konfokalinę mikroskopiją ir FLIM su laike koreliuota pavienių fotonų skaičiavimo įranga nustatyta, kad ląstelių viduje dažas neagreguoja ir pasižymi monoeksponentiniu fluorescencijos gesimu [3].

Rezultatai parodė, kad 93 μM cisplatinos poveikis beveik nepakeitė lipidinių pūslelių poliškumo, kadangi vidutinė fluorescencijos gyvavimo trukmė (τ_{vid}) ląstelėse paveiktose su cisplatiną ($\tau_{\text{vid}} = 1483$ ps) išliko panaši į išmatuotą nepaveiktose ląstelėse ($\tau_{\text{vid}} = 1487$ ps). Tuo tarpu, 7,2 nM paklitakselio poveikis lėmė vėžinių ląstelių lipidinių pūslelių poliškumo sumažėjimą ($\tau_{\text{vid}} = 1608$ ps). Taip pat, išbandyta didesnė paklitakselio koncentracija: po 6 val. poveikio su 5 μM paklitakselio buvo stebimas ženklus lipidinių pūslelių poliškumo padidėjimas (τ_{vid} sutrumpėjo iki 1310 ps) [3]. Lipidinių pūslelių poliškumo pokyčiai rodo, kad palyginti mažos paklitakselio koncentracijos ne tik stabilizuoja mikrovamzdelius, tačiau paveikia ir lipidines pūsleles. Vadinasi, poliškumui jautrūs fluoroforai, kaip BP-OC₁₆ TP2, gali padėti geriau suprasti chemoterapinių vaistų citotoksiškumo principus ir vėžinių ląstelių atsaką į šių vaistų poveikį.

Reikšminiai žodžiai: chemoterapija, vėžinės ląstelės, lipidinės pūslelės, poliškumas, BODIPY, FLIM.

Literatūra

- [1] A. K. Cotte et al., Nat Commun, **9**, 322 (2018).
- [2] K.-N. Wang et al., Angewandte Chemie International Edition, **60**, 15095–15100 (2021).
- [3] R. Žvirblis et al., J. Mater. Chem. B, **11**, 3919–3928 (2023).

Antros harmonikos generacijos mikroskopijos skydliukės mazgų vaizdų svarbiausių statistinių parametru įvertinimas

Evaluation of key statistical parameters of second harmonic generation microscopy images of thyroid nodules

Yaraslau Padrez¹, Lena Golubewa¹, Igor Timoshchenko¹, Danielis Rutkauskas¹

¹State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Department of Molecular Compound Physics, Savanorių Ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania
yaraslau.padrez@ftmc.lt

Cancer is one of the leading causes of death worldwide. Its progression is often associated with the extracellular matrix (ECM) remodeling. The main protein component of ECM is collagen. As cancer develops, collagen structure, texture and content change significantly. These specific changes can serve as indicators of the disease severity and tumor metastatic potential and allow prediction of patient survival. Collagen, being a non-centrosymmetric molecule with high hyperpolarizability and, thus, effectively producing second-order non-linear signal in response to femto-second laser irradiation, represents a unique target for a label-free analysis based on second harmonic generation (SHG) microscopy.

To identify statistically significant patterns of changes in collagen structure, large amounts of microscopic data are to be analyzed. This task is often complicated by the huge number of image parameters being considered and the space of features becomes multidimensional. One way to simplify the task is to apply principal component analysis (PCA). PCA is a method which allows reducing the dimensionality of large data sets by transforming a large set of variables into a smaller one that contains most of the information in the large set.

The purpose of the present study was (i) to apply PCA for the reduction of the dimensionality of the space of features extracted from the SHG images of collagen capsules of the papillary thyroid carcinoma (PTC) nodules and (ii) to reveal the key texture features of SHG images of collagen specifically characterizing PTC.

In this study a data set of 20736 SHG images of PTC nodules were obtained by means of wide-field SHG microscopy [1]. To provide an objective analysis of a large data set, the following statistical approaches were used:

- First Order Statistics (FOS), based on the gray level intensities of the SHG images;
- Second Order Statistics (SOS), based on the analysis of the spatial relationship between gray levels of neighboring pixels reflected in Gray Level Co-occurrence Matrix (GLCM) [2];
- Higher Order Statistics (HOS), based on the analysis of the spatial distribution of gray levels of pixels with the emphasis on the groups of pixels with the same intensity reflected in a Gray Level Run Length Matrix (GLRLM) [3].

Calculated parameters included: FOS – mean, standard deviation, skewness and kurtosis; SOS – energy,

contrast, correlation, homogeneity and entropy (GLCM calculation was performed for five distances between adjacent pixels: 1, 3, 6, 9, 12); HOS – short runs emphasis, long runs emphasis, gray level nonuniformity, run length nonuniformity and run percentage. Thus, 34 statistical parameters (features) were obtained for each SHG image from the experimental dataset. All features were standardized, and PCA based on covariance matrix was performed. Principal components (PCs) containing most information (variance) of initial features were calculated. To choose optimal number of PCs, a Kaiser's Rule was applied. According to it, the first four PCs describing 93% of data variance remained, thus, providing the reduction of the dimensionality of the initial space of features from 34 to 4. Being linear combinations of initial features, PCs make it possible both to reduce the dimension of features (down to those containing most of data variance), and to extract impact of initial features to maximal data variance. As a result, the most of variance in SHG images of PTC nodules is enclosed in energy, homogeneity, and correlation (SOS), short run emphasis and run percentage (HOS), (mentioned in descending order of their impact to PC1-PC4). Such data set reduction significantly simplifies any further analysis of patterns of collagen capsule changes if using these new PCs as new variables. Application of PCs as input features for K-means clustering of SHG images of PTC nodules will simplify calculations, reduce calculation time, and support estimation of characteristic parameters of capsular invasion. These estimations may be applied for explanation how each specific feature coheres with observed pathological changes and provide understanding of K-means-based reasoning.

Key words: collagen, second harmonic generation microscopy, principal component analysis.

Literature

- [1] A. Dementjev, R. Rudys, R. Karpicz, D. Rutkauskas, *Lith. J. Phys.* **60**, 145–153 (2020).
 [2] R. M. Haralick, K. Shanmugam, I. Dinstein, *6*, 610–621 (1973).
 [3] M. M. Galloway, *Computer Graphics and Image Processing*, **4**, 2, 172–179 (1975).

Darbo vietos ir personalo apšvitos stebėjimas ir vertinimas radioembolizacijos su Ho-166 metu

Workplace and personnel exposure monitoring and evaluation during radioembolization with Ho-166

Kirill Skovorodko^{1,2}; Inga Andriulevičiūtė¹; Arūnas Gudelis²; Christian Bernhardsson³

¹Vilnius University Hospital Santaros Klinikos, Santariskiu st. 2, Vilnius Lithuania; ²State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Savanorių Ave. 231, Vilnius, Lithuania; ³Lund University, Department of Translational Medicine, Medical Radiation Physics, Malmö, Sweden
kirill.skov@gmail.com

The recent developments in radionuclide treatment have created a need to achieve the highest quality standards in the field of radiation protection. New radionuclides are currently being introduced in diagnostic and therapeutic procedures. Radioembolization with holmium-166 microspheres is a new treatment method used for clinical purposes. It's a minimally invasive procedure in which radioactive microspheres are delivered directly to liver tumors via an interventional radiological procedure. This study investigated occupational exposure levels under working conditions with Ho-166.

Ho-166 microspheres are made of poly-L-lactic acid (PLLA), which contain the isotope Ho-166. During the microspheres production process, Ho-165 is incorporated in the PLLA matrix and during nuclear activation in a nuclear reactor part of the Ho-165 is activated to Ho-166. Ho-166 emits high-energy beta particles (1773.9 keV; yield 50.5% and 1854.5 keV; yield 48.2%) and gamma rays (80.57 keV; yield 6.6% and 1379.4 keV; yield 0.9%), and have a half-life of 26.8 h. The diameter of the microspheres are in the range of 15-60 μm , with a density of 1.4 g/cm^3 . These are administered through a catheter to a hepatic artery. The paramagnetic properties of holmium allow to localize it using MRI scan, however, SPECT/CT is mostly used to acquire clinical images [1]. The standard treatment procedure consists in different steps: peri-procedural imaging performed by high-speed multislice CT or angiography, activity calculation and treatment planning with a scout dose (about 150 MBq), treatment procedure (about 10 GBq) and treatment evaluation process (post-treatment imaging) [2].

To measure radiation exposure, dose rate and patient dose rate, i.e. measurements ensuring that the patient could be discharged from the hospital, the ATOMTEX AT1121 ambient dosimeter was used. To determine the contamination, NuviaTech Healthcare CoMo 170 contamination monitor was used. The radiation exposure data for medical staff was measured with the Thermo Scientific EPD TruDose dosimeters. The readings of the activity meter Veenstra VDC-405, used for checking of activity (<5% deviation), were verified by the secondary standard chamber Capintec CRC-15R, No. 158488 (Center for Physical Sciences and Technology). To evaluate the doses in different locations (Fig. 1) for monitoring the working area exposure during one procedure, NaCl pellets read by optically stimulated luminescence, OSL, (made at Skane University Hospital, Malmö, Sweden) were used. The linear detection range is

from about 10 μGy to >1 Gy. For readout procedure, the Risø TL/OSL reader (DTU Nutech, Denmark) was used. NaCl pellets were positioned at different locations (Fig. 1) for monitoring the exposure in the working area during one procedure.

Table 1. Working area monitoring results.

No.	Dosimeter position	Estimated doses (mGy)
1	Ho-166 transportation table (No. 1)	0.05
2	Ho-166 transportation table (No. 2)	0.07
3	Ho-166 transportation table (No. 3)	0.07
4	Ho-166 transportation table (No. 4)	0.05
5	Ho-166 transportation table (No. 5)	0.06
6	Waist level under the lead vest/skirt (interventional radiologist)	0.06
7	TV stand, 50-70 cm from the patient (No. 7)	0.08
8	Near the patient's, 1.5 meters (No. 8)	0.05
9	Right side, next to the patient, 5-10 cm (No. 9)	0.18
10	Left side, next to the patient, 5-10 cm (No. 10)	0.88

Immediately after the administration of the therapeutic dose, the dose rate at one meter from the right side of the patient was up to 80 $\mu\text{Sv}/\text{h}$, during the discharge process was up to 32 $\mu\text{Sv}/\text{h}$ at 1 meter after 18 hours.

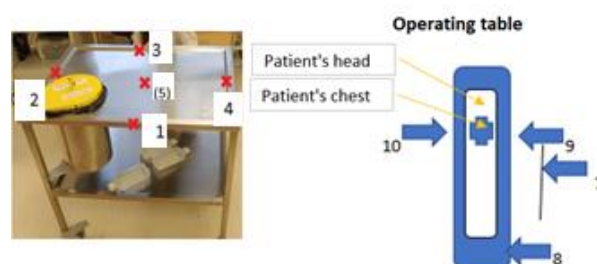


Fig. 1. Positions of NaCl pellets on the transportation table (right side) and on the operating table (left side).

Keywords: nuclear medicine, radioembolization, occupational exposure, radiation protection.

References

- [1] Stella, M., et al. G. Holmium-166 radioembolization: Current status and future prospective. *CardioVascular and Interventional Radiology*, 2022, 45(11), p. 1634-1645.
- [2] Weber M., et al. Herrmann K. EANM procedure guideline for the treatment of liver cancer and liver metastases with intra-arterial radioactive compounds. *Eur J Nucl Med Mol Imaging*. 2022 Apr;49(5):1682-1699. doi: 10.1007/s00259-021-05600-z. Epub 2022 Feb 11. PMID: 35146577; PMCID: PMC8940802.

Lyčių skirtumai stuburo disko fluorescenciniuose spektruose

Sex differences in vertebral disc fluorescence spectra

Aurelija Vaitkuvienė¹, Darius Varanius¹, Gunaras Terbetas², Juozas Vaitkus¹

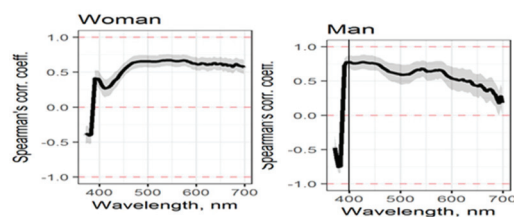
¹ Vilniaus universitetas, Fotonikos ir Nanotechnologijų institutas, Saulėtekio g. 3, LT-10257 Vilnius

² Vilniaus universitetas Medicinos fakultetas, Čiurlionio g. 21, LT-03101 Vilnius

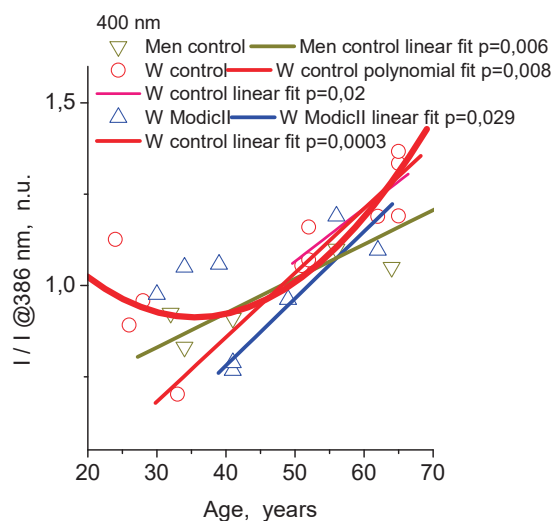
aurelija.vaitkuviene@tmi.vu.lt

Precizinė medicina vertina žmogaus organizmo būklę molekuliniam lygįje užtikrindama ir nukrypimų korekciją šiuo lygmeniu. Visi asmenys turi tik jiems būdingų paveldėtų ir įgytų biocheminių normos variacijų, kurios kinta gyvenimo eigoje ir yra skirtingos kiekvienai lyčiai. Medikamentinės ir fizinės gydymo priemonės precizinės medicinos požiūriu privalo būti pritaikytos asmeniui, t.y. personalizuotos. Medicininė fotonika suteikia galimybę parinkti žmogui nekenksmingą, neardantį, giluminę molekulinę informaciją išgaunantį šviesos šaltinį ir skaitmeninį atsako detektorių. Lazerinė chirurgija panaikina patologiškus audinius, lazerinės terapijos poveikis yra jo biomoduliacija. Tiek chirurginis tiek terapinis lazerinis gydymas gali būti monitoruojamas lazerinės diagnostikos prietaisais. Išvaržos yra disko degeneracijos pasekmė, diagnozuojama magnetinio rezonanso tomografija (MRT). Chirurginis disko išvaržos gydymas būna sėkmingas, jeigu nėra MRT nustatytų MODIC pakitimų gretimuose slanksteliuose [1]. Prieš intervenciją būtina įvertinti operuojamo disko audinį tikslinant degeneracijos ir Modic požymius. Disko spektroskopijos tyrimui gautas Bioetikos komiteto leidimas. Pranešime pateikiame portatyviu spektrografu gautus spektrus stuburo slankstelių 37 išvaržų nuopjovose. Vertindami išvaržų spektrų normuoto intensyvumo koreliaciją su paciento amžiumi pastebėjome skirtumus vyrų ir moterų grupėse (1 pav.). Vidutinio stiprumo (0.65) koreliacija su amžiumi stebima 470-580 nm intervale moterims o vyrams - stipresnė koreliacija (0.78) 395-460 nm intervale. Modic II tipo pakitimus radome tik moterims. Vertindami gretimų slankstelių Modic II patologijos poveikį disko išvaržos audiniui palyginome spektro amplitudžių santykio priklausomybę nuo amžiaus. 278 nm, 290 nm bangose visų grupių priklausomybė – tiesinė. Ties 400 nm banga moterų degeneracijos grupėje bendra priklausomybė nuo amžiaus - polinominė, >30 metų atkarpoje - tiesinė, kaip ir Modic II >40 metų ir vyrų >30 metų amžiuje. Tagi po reprodukcinio laikotarpio moterų ir vyrų spektrų priklausomybės nuo amžiaus skirtumas išnyksta. Priklausomybės skirtumas tarp moterų degeneracijos ir Modic II grupių stebimas <40 metų amžiuje, bet atvejų yra per mažai statistiniam įvertinimui (2 pav.). Ilgesnių bangų diapazone žymiausias moterų spektrų santykių priklausomybės skirtumas nuo vyrų rastas ties 470 nm, mažesnis - ties 499 nm, 530nm bangos ilgiais, vyrams degeneracijos atveju spektro priklausomybė nuo amžiaus yra tiesinė, o moterims ir degeneracijos ir Modic II grupėse – polinominė.

Šis pilotinis tyrimas atskleidė, kad fluorescentinis metodas gali būti taikomas tiesioginei stuburo išvaržų diagnostikai skirstant pacientus į lyčių ir amžiaus grupes.



1 pav. Stuburo disko fluorescencijos spektrų normuoto intensyvumo ir amžiaus koreliacijos analizė vyrų ir moterų grupėse.



2 pav. Vyrų ir moterų stuburo disko degeneracijos bei moterų Modic II grupių spektrų intensyvumo ties 400 nm ir 386 nm santykio priklausomybė nuo amžiaus.

Reikšminiai žodžiai: stuburo disko išvarža, bio fotonika, fluorescencija,

Literatūra

[1] Modic MT, Steinberg PM, Ross JS, Masaryk TJ, Carter JR. Radiology 166, 193-199, (1988).

Fotosensibilizatorių TPPS₄ ir TPPS₃ palyginamieji spektrinių savybių ir agregacijos tyrimai kintant vandeninės aplinkos pH

Comparative study of photosensitizers TPPS₄ and TPPS₃ spectral properties and aggregation, changing the aqueous solution pH

Greta Tamoliūnaitė^{1,2}, Skaistė Talanovaitė^{1,3}, Vilius Poderys¹, Ričardas Rotomskis^{1,3}

¹Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis Vėžio institutas, Vilnius, Lietuva

²Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius, Lietuva

³Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Vilnius, Lietuva

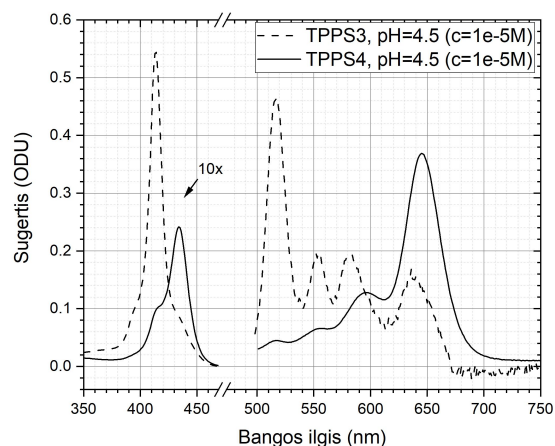
ricardas.rotomskis@nvi.lt

Plačiai žinoma, kad tradiciniai vėžio gydymo būdai turi daug juos ribojančių veiksnių. Chemoterapija pasižymi sisteminiiais šalutiniais poveikiais, chirurginis vėžinių navikų šalinimo būdas yra rizikingas vėžinio susirgimo atsikartojamumu, o radioterapijos taikymą riboja sukaupiamos švitinimo dozės. Kaip galimas progresyvus vėžinių susirgimų gydymo būdas buvo pasiūlyta fotodinaminė terapija [1]. Porfirinai bei jų dariniai yra didelė aromatinių pigmentų grupė, galinti būti panaudojama diagnostikoje ir fotodinaminėje terapijoje. Yra žinoma, kad kai kurie porfirinai pasižymi saviorganizacija į skirtingus agregatų tipus, kai aplinkos sąlygos yra palankios jų agregacijai. Porfirinų agregacija yra priklausoma nuo terpės pH ir fotosensibilizatoriaus koncentracijos, jo struktūros terpėje esančių molekulių. Žmogaus organizmas pasižymi skirtingo pH terpėmis - kraujo pH yra neutralus, o vėžinėse ląstelėse pH yra rūgštesnis. Fotosensibilizatorių, tokių kaip 5,10,15,20-Tetrakis (4-sulfonatofenil) porfirino (TPPS₄) ir 5-fenil-10,15,20-tris (4-sulfonatofenil) porfirino (TPPS₃), agregacija yra įdomi, nes ji aktuali ne tik tiriant jų galimą taikymą fotodinaminėje terapijoje, bet ir tiriant molekulių saviorganizaciją, nanostruktūrų susidarymą saviorganizacijos ("bottom-up") principu bei jų galimus taikymus nanotechnologijų srityje.

Neutralaus pH vandeninėje terpėje ir TPPS₄, ir TPPS₃ monomerinės molekulės sugerties spektrai atitinka D_{2h} simetriją, būdingą laisvajam porfirinui. D_{2h} simetrija pasižymi intensyvia Soret sugerties juosta mėlynoje spektrinėje srityje bei keturiomis mažiau intensyviomis Q juostomis regimosios šviesos srityje. Žeminant pH iki 4,5, TPPS₄ porfirino centras yra protonuojamas (protonavimo pK_a=4.9), ko pasekoje molekulės simetrija ir sugerties spektras pasikeičia iš D_{2h} į D_{4h}, o TPPS₃ molekulės sugerties spektras lieka būdingas D_{2h} simetrijai (1 pav.). pH toliau rūgštinėjant ir TPPS₃, ir TPPS₄ sugerties spektrai sutampa.

Žemo pH aplinkoje (~1) TPPS₄ ir TPPS₃ molekulės gali formuoti J-tipo agregatus esant palyginus mažoms šių molekulių koncentracijoms [2], tačiau neutralaus, arba aukštesnio, pH aplinkoje J-tipo agregatų formavimasis nėra stebimas. Kai pigmento koncentracija yra didelė, ir neutralioje vandeninėje terpėje yra stebimas agregatų formavimasis. Pokyčiai, stebimi sugerties spektre atitinka spektrinius pokyčius būdingus agregatų formavimuisi. Neutralaus pH vandeninėje aplinkoje, kai fotosensibilizatoriaus koncentracija yra pakankamai

aukšta, TPPS₄ molekulės gali formuoti H-tipo agregatus. TPPS₃ molekulės į J-tipo agregatus susirenka efektyviau ir mažesnėse koncentracijose, ko priežastimi gali būti sulfo grupių skaičiaus sumažėjimas, lemiantis sumažėjusią šoninių sulfo grupių neigiamo krūvio elektrostatinę stūmą.



1 pav. TPPS₄ ir TPPS₃ molekulių sugerties spektrai, matuoti 1 cm optiniame kelyje, dejonizuoto vandens, 4.5pH aplinkoje.

Jeigu pakankamai didelis fotosensibilizatoriaus kiekis patenka į žmogaus organizmą neutraliame pH, yra galima TPPS₄ molekulių H-tipo agregacija, kas potencialiai galėtų įtakoti fotodinaminę terapiją. Tačiau norint suprasti porfirinų saviorganizaciją į skirtingus agregatų tipus, agregacijos įtaką porfirinų spektrinėms savybėms bei pritaikomumui fotodinaminėje terapijoje yra būtini tolimesni tyrimai.

Literatūra:

- [1] Hou, B., Zhang, W., Li, C., Sun, X., Feng, X., Liu, J., Synthesis and in vitro biological evaluation of novel water-soluble porphyrin complexes for cancer photodynamic therapy, *Appl Organomet Chem* 2022, 36(4), e6598. <https://doi.org/10.1002/aoc.6598>
- [2] Rotomskis R., Augulis R., Snička V., Valiokas R., Liedberg B., Hierarchical Structure of TPPS₄ J-Aggregates on Substrate Revealed by Atomic Force Microscopy, *J. Phys. Chem. B* 2004 108(9), 2833-2838. <https://doi.org/10.1021/jp036128v>

CP29 fotosintetinis kompleksas: chlorofilų geometrija ir elektroninės būsenos

Photosynthetic complex CP29: geometry and electronic states of chlorophylls

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

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

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

sandra.barysaite@ff.stud.vu.lt

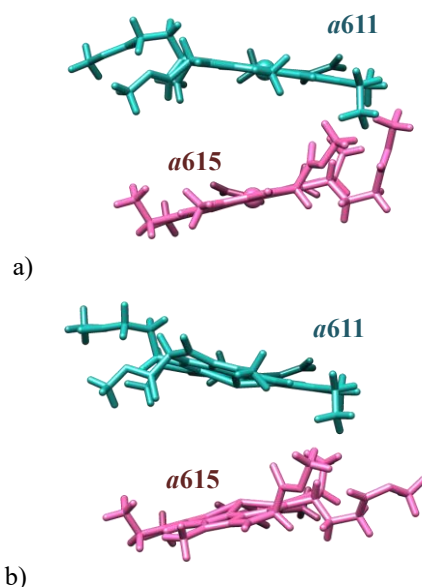
Šviesos surinkimas yra pirmasis fotosintezės proceso žingsnis ir jis yra vykdomas pirmojoje ir antrojoje fotosistemoje (PSI ir PSII, angl. *photosystems I and II*), esančiose chloroplastų tilakoidų membranose. PSII taip pat vykdo vandens oksidaciją, kurios metu susidaro deguonies molekulės, galinčios reaguoti su sužadintos tripletinės būsenos chlorofilais, o tokios reakcijos rezultatas yra fotosistamai itin žalingas singuletinis deguonis [1]. Dėl šios priežasties augalai yra išvystę savisaugos mechanizmus, tokius kaip nefotocheminis gesinimas (NPQ, angl. *non-photochemical quenching*), kurio metu yra gesinami pertekliniai chlorofilų sužadinimai [2]. Nors ir tikslus NPQ veikimo mechanizmas iki šiol nėra aiškus, yra manoma, kad LHCII komplekse NPQ gali būti susijęs su krūvio pernašos (CT, angl. *charge-transfer*) būsenomis tarp chlorofilų [3]. Tokį reiškinį yra verta tyrinėti ir CP29 komplekso atveju, kadangi jis yra išsidėstęs tarp išorinių PSII anteninių kompleksų ir reakcijų centro.

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

Visų pirma buvo optimizuotos chlorofilų monomerų geometrijos tankio funkcionalo teorijos (DFT, angl. *density functional theory*) metodu vakuume fitilo uodegą pakeitus metilo grupe. Optimalios geometrijos chlorofilų monomerams ir dimerams buvo atliekami sužadintų būsenų savybių skaičiavimai nuo laiko priklausančiu DFT (TD-DFT) metodu ir pagal tam tikrus kriterijus dimeruose buvo identifikuotos CT būsenos. Skaičiavimai vakuume buvo pakartoti naudojant tankio funkcionalu paremtą stipriojo ryšio artinį (DFTB, angl. *density functional based tight binding*) ir nuo laiko priklausančių DFTB (TD-DFTB). Analogiški skaičiavimai DFTB ir TD-DFTB metodais atlikti chlorofilams įskaitant aplinkines molekules bei nepašalinant fitilo uodegos. Lygintos abiem metodais gautos optimalios chlorofilų geometrijos ir jų sužadintų bei CT būsenų energijos.

Rezultatai parodė, kad vakuume optimizuotos geometrijos chlorofilams abiem metodais gaunamos sužadintų būsenų energijų vertės yra artimos ir dažniausiai galima identifikuoti analogiškas CT būsenas, tačiau DFTB ir TD-DFTB metodais atlikti skaičiavimai užtruko trumpiau negu DFT ir TD-DFT metodų atvejais. Ir monomerų, ir dimerų atveju, įskaitant aplinkos įtaką

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



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

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, šviesorankos kompleksai, nefotocheminis gesinimas, krūvio pernašos būsenos.

Literatūra

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

Baltyminės aplinkos elektrostatinė įtaka šviesorankos kompleksų pigmentų sužadintosioms būsenoms

The Electrostatic Impact on the Excited States of Pigments in Light-harvesting Complexes

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

¹Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius

²Molekuliųjų darinių fizikos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
gabriele.rankelyte@ff.stud.vu.lt

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

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

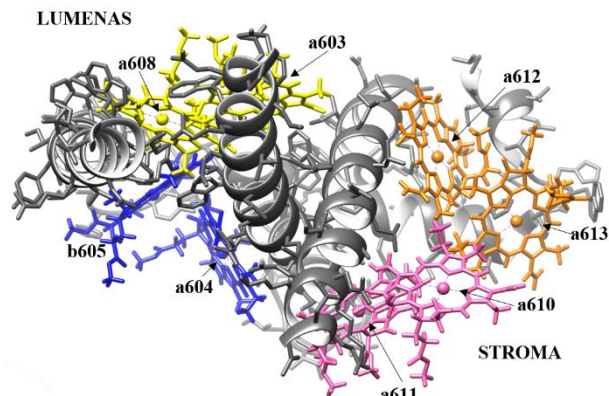
Pigmentai šviesorankos antenoje yra apsupti kitų pigmentų bei baltymo. Norint nuodugniai išanalizuoti tiek eksitoninę, tiek ir krūvio pernašos būsenas lemiančią sąveiką tarp chlorofilo molekulių, yra būtina įskaityti aplinkos molekulių daromą įtaką pigmentų sužadintosioms būsenoms. Panašių tyrimų, kurie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

Lhca4 erdvinė struktūra (1 pav.) buvo gauta kaip PSI superkomplekso ketvirtoji grandinė, kuri yra laisvai prieinama baltymų duomenų bazėje PDB [6]. Atsižvelgiant į sužadintųjų būsenų savybes vakuume, buvo nustatytos pasirinktų chlorofilo dimerų krūvio pernašos būsenos. Siekiant įskaityti aplinkos molekulių įtaką šioms būsenoms, baltymas bei pigmentai buvo aprašyti daliniais atominiais krūviais. Energijos poslinkis dėl aplinkos elektrostatinės įtakos buvo apskaičiuotas

CDC metodu [7] pagal (1) formulę:

$$\Delta E_m = \frac{1}{\epsilon_{\text{eff}}} \sum_I \sum_{\eta, J} \frac{(q_I^{(m)}(s,s) - q_I^{(m)}(0,0)) q_J^{(\eta)}(0,0)}{|R_I^{(m)} - R_J^{(\eta)}|}. \quad (1)$$

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



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

Reikšminiai žodžiai: Pirmoji fotosistema, krūvio pernašos būsenos, fotosintezė.

Literatūra

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

Glibenklamido vandeniniuose joninių skysčių mišiniuose modeliavimas

Modelling Glibenclamide In Aqueous Mixtures Of Bioactive Ionic Liquids

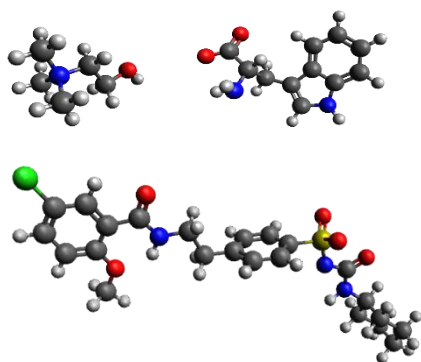
Žygynta Einorytė¹, Vytautas Klimavičius¹, Francesca Mocci², Aatto Laaksonen³, Kęstutis Aidis¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Vilnius, Lietuva

²Kaljario universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Monserrato, Italija

³Stokholmo universitetas, Medžiagų ir aplinkos chemijos fakultetas, Stokholmas, Švedija
zygynta.einoryte@ff.stud.vu.lt

Glibenklamidas, dar vadinamas gliburidu, yra sulfonilkarbamidų klasės vaistinis preparatas, naudojamas II tipo cukriniam diabetui gydyti. Šis junginys veikia kepenų ląstelių adenozintrifosfatui (ATP) jautrius kalio kanalus (K_{ATP}), taip padėdamas valdyti gliukozės kiekį kraujyje, veikiant insulino sekreciją. Taip pat randami ir nauji potencialūs jo farmacinio panaudojimo būdai, galvos skausmui, uždegimams slopinti [1]. Tačiau, glibenklamidas pasižymi prastu tirpumu vandenyje (15-24 $\mu\text{g/mL}$) [2], o tai apsunkina jo farmacinio panaudojimo plėtojimą. Norint padidinti glibenklamido tirpumą vandenyje, mokslininkai panaudojo biologinį joninį skystį iš biomolekulių – cholino katijonų ir triptofano anijonų. Jo ir vandens mišiniuose glibenklamido tirpumas padidėjo iki 27 mg/mL – net 130-600 kartų palyginus su tirpumu gryname vandenyje [3].



1 pav. Optimizuotos cholino, triptofano ir glibenklamido jonų struktūros

Šio darbo tikslas – įvardinti padidėjusio glibenklamido tirpumo vandens ir cholino-triptofano joninio skysčio mišiniuose priežastis molekuliniam lygmenyje, taikant molekulinės dinamikos (MD) simuliacijas ir jungtinius kvantinės mechanikos/molekulinės mechanikos (QM/MM) metodus. Vienas pagrindinių metodų, leidžiančių tirti įvairias tarp molekulinės sąveikas, yra branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopija, nes ^1H BMR cheminiai poslinkiai kinta, keičiantis tiriamos molekulės artimai molekulinei aplinkai. Šiame darbe pasirinkta tirti glibenklamido ^1H BMR parametrus dviejose sistemose: vandeninėje aplinkoje (Glb_{aq}) ir joninio skysčio mišinyje su vandeniu ($\text{Glb}_{\text{IL/aq}}$). Taip pat buvo eksperimentiškai

išmatuoti glibenklamido atomų cheminiai poslinkiai skirtinguose tirpaluose.

Analizuojant dvisienius kampus tarp glibenklamido atomų ir tarpatominius atstumus rasta, kad glibenklamidas egzistuoja trijose labiausiai palankiose konformacijose: U-formos, S-formos ir ištiestoje (E). Skirtingose sistemose šių formų stabilumas skiriasi, labiau mobilus glibenklamidas yra $\text{Glb}_{\text{IL/aq}}$ sistemoje. Apskaičiuoti koordinacijos skaičiai tarp glibenklamido ir tirpiklio atomų bei eksperimentiniai ir teoriškai apskaičiuoti glibenklamido atomų cheminių poslinkių skirtumai leidžia spręsti, kad glibenklamido tirpumo padidėjimas joninio skysčio ir vandens mišiniuose priklauso nuo tarp molekulinės sąveikų tarp cholino ir triptofano jonų ir glibenklamido aromatinių ir cikloheksano žiedų.

Reikšminiai žodžiai: MD simuliacijos, QM/MM, BMR, glibenklamidas, joniniai skysčiai.

Padėka: Darbe aprašyti skaičiavimai vykdyti atviros prieigos skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ aukšto našumo superkompiuteriu Vilniaus universiteto Fizikos fakultete, bei Umeå technologijos instituto aukšto našumo skaičiavimo centro HPC2N (angl. *High Performance Computing Center North*) superkompiuteriu.

Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, grantu nr. S-MIP-22-74.

Literatūra

- [1] M. Al, M. Al-Karagholi, M. Sode, A. Gozalov, and M. Ashina, The vascular effect of glibenclamide: A systematic review, <https://doi.org/10.1177/2515816319884937>, 2019, 2, 1–13.
- [2] A. A. Elkordy, A. Jatto, and E. Essa, In situ controlled crystallization as a tool to improve the dissolution of glibenclamide, *International Journal of Pharmaceutics*, 2012, 428, 118–120.
- [3] M. A. Alawi, I. I. Hamdan, A. A. Sallam, and N. A. Heshmeh, Solubility enhancement of glibenclamide in choline-tryptophan ionic liquid: Preparation, characterization and mechanism of solubilization, *Journal of Molecular Liquids*, 2015, 212, 629–634.

[C₄mim][NO₃] joninio skysčio ir jo mišinių su vandeniu tarpmolekulinės struktūros ir BMR parametrų modeliavimas

Modelling intermolecular structure and NMR parameters of the [C₄mim][NO₃] ionic liquid and of its mixtures with water

Einaras Sipavičius¹, Vytautas Klimavičius¹, Francesca Mocci², Aatto Laaksonen³, Kęstutis Aidas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

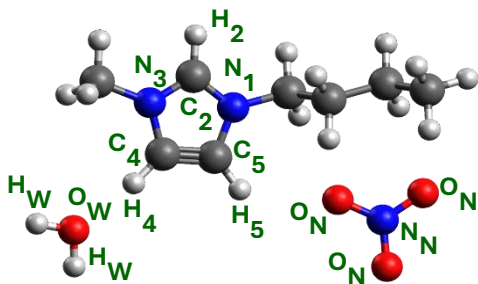
²Kaljario universitetas, Chemijos ir geologijos mokslų fakultetas, S.S. 554 bivio per Sestu, I-09042 Monseratas, Italija

³Stokholmo universitetas, Medžiagų ir aplinkos chemijos fakultetas, Svante Arrhenius väg 16C, SE-10691 Stokholmas, Švedija

einaras.sipavicius@ff.vu.lt

Joniniai skysčiai yra plačiai tyrinėjamos medžiagos, kurios pasižymi unikaliomis savybėmis, tokiomis kaip nykstamai mažas lakumas, katijono amfifiliškumas, cheminis ir elektrocheminis stabilumas [1]. Vieni iš labiausiai tyrinėjamų yra 1-alkil-3-metilimidazolio katijono (C_nmim⁺, čia *n* – anglies atomų skaičius alkilo pakaitė) joniniai skysčiai. Svarbus jų privalumas – galima nesunkiai modifikuoti šių skysčių fizikines ir chemines savybes keičiant alkilo pakaitą ir anijoną [2].

Šio tyrimo objektas yra [C₄mim][NO₃] (1-butil-3-metilimidazolio nitratas, struktūra pateikta 1 pav.) ir jo mišiniai su vandeniu. Šios sistemos pasižymi gana sudėtinga nanoheterogeniška tarpmolekuline struktūra. Ne vienoje mokslinėje publikacijoje yra keliami hipotezė, kad [C₄mim][NO₃]:H₂O mišiniuose susidaro vandens kišenės – kelių nanometrų skersmens agregatai, sudaryti tik iš vandens molekulių [3, 4]. Tačiau yra atlikta ir spektroskopinių bei molekulinio modeliavimo tyrimų, kurie šią hipotezę kvestionuoja [5, 6]. Šiuo tyrimu siekiama gauti išsamią informaciją apie [C₄mim][NO₃] ir H₂O mišinių tarpmolekulinę struktūrą naudojant molekulinės dinamikos (MD) ir kvantinės mechanikos / molekulinės mechanikos (QM/MM) simuliacijas.



1 pav. [C₄mim][NO₃]:H₂O mišiniuose esančios dalelės: C₄mim⁺, NO₃⁻ ir H₂O, ir jų svarbiausių atomų žymenys.

Buvo sudarytos keturios skirtingos sudėties [C₄mim][NO₃]:H₂O sistemos (vandens molinė dalis lygi 0 %, 20 %, 50 % ir 80 %) ir atliktos MD simuliacijos 343 K temperatūroje: rezultatų analizei naudotos 20 ns kanoninio ansamblio (NVT) simuliacijos, gautos prieš tai atlikus 20 ns pusiausvyros nusistovėjimo simuliacijas. Sudarytos radialinio pasiskirstymo funkcijos ir kampinio pasiskirstymo diagramos bei apskaičiuoti koordinacijos skaičiai, iš kurių padarytos išvados apie NO₃⁻ ir H₂O

koordinaciją ir orientaciją aplink C₄mim⁺ katijono imidazolio žiedą. Nustatyta, kad NO₃⁻ ir H₂O koordinuojasi prie visų trijų imidazolio žiedo vandenilio atomų (H₂, H₄, H₅), bet prie H₂ – stipriausiai. Abi dalelės dažniausiai randamos virš arba žemiau imidazolio žiedo plokštumos. Taip pat abiejų dalelių koordinacija prie katijono silpnėja didėjant vandens molinei daliai.

Taip pat gautoms MD simuliacijų konfigūracijoms buvo apskaičiuotos tikimybės, kad vandens molekulės priklausys iš *n* molekulių sudarytam vandens klasteriui. Nustatyta, jog kai vandens molinė dalis yra iki 50 %, susidaro maži vandens klasteriai iš kelių molekulių. Kai vandens molinė dalis yra 80 %, susidaro visą sistemą apimantis vandens molekulių tinklas. Padaryta išvada, jog vandens nanokišenės šiose sistemose nesiformuoja.

Galiausiai, buvo atlikti QM/MM skaičiavimai C₄mim⁺ katijonui ir H₂O molekulei: pasirinkus 100-200 konfigūracijų iš MD simuliacijų ir gautus rezultatus suvidurkinant, buvo apskaičiuoti C₄mim⁺ ¹H BMR cheminiai poslinkiai ir H₂O ¹H BMR ekranavimo konstantos. Šie rezultatai buvo lyginami su eksperimentiškai gautais BMR spektrais. Nustatyta, jog kai kuriems protonams (H₄, H₅) apskaičiuoti BMR poslinkiai kiekybiškai ir kokybiškai atitinka eksperimentinius duomenis. Tačiau H₂ ir H_w protonų apskaičiuotų parametrų atitikimas buvo prastas. Padaryta išvada, kad QM/MM skaičiavimų metodika gali būti tobulinama keičiant MD jėgų lauką arba nesustabdant C–H ir O–H cheminių ryšių virpesių MD simuliacijose.

Reikšminiai žodžiai: joniniai skysčiai, tarpmolekulinė struktūra, molekulinė dinamika, kvantinė mechanika / molekulinė mechnika, branduolių magnetinis rezonansas.

Literatūra

- [1] F. U. Shah, O. I. Gnezdilov, A. Filippov, Phys. Chem. Chem. Phys., **19**, 16721 (2017).
- [2] N. V. Plechkova, K. R. Seddon, Chem. Soc. Rev., **37**, 123 (2008).
- [3] H. Abe, T. Takekiyo, M. Shigemi, Y. Yoshimura, S. Tsuge, T. Hanasaki, K. Ohishi, S. Takata, J. Suzuki., J. Phys. Chem., **5**, 1175 (2014).
- [4] J. Kausteklis, M. Talaikis, V. Aleksa, V. Balevičius, J. Mol. Liq., **271**, 747 (2018).
- [5] S. S. Bystrov, V. V. Matveev, A. V. Egorov, Y. S. Chernyshev, V. A. Kononov, V. Balevičius, V. I. Chizhik, J. Phys. Chem. B., **123**, 9187 (2019).
- [6] C. E. S. Bernardes, K. Shimizu, J. N. Canongia Lopes, J. Phys.: Condens. Matter, **27**, 194116 (2015).

Bioaktyviųjų joninių skysčių BMR tyrimas

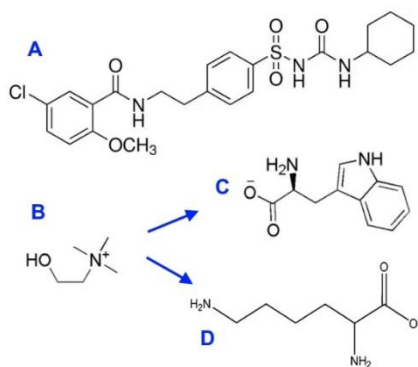
NMR study of bioactive ionic liquids

Lukas Mikalauskas¹, Vytautas Klimavičius¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
lukas.mikalauskas@ff.stud.vu.lt

Kambario temperatūros joniniai skysčiai (Room Temperature Ionic Liquids – RTIL) yra vadinamos organinės druskos, kurių lydymosi temperatūra yra < 100 °C. Keičiant įvairias anijono ir katijono posistemų kombinacijas galima derinti jų fizikines ir chemines savybes. Tokių kombinacijų yra labai daug, todėl RTIL yra vadinami „programuojamomis“ medžiagomis. Dėl mažo garų slėgio yra laikomi žaliaisiais tirpikliais. Visa tai lemia labai plačias RTIL pritaikymo galimybes – nuo maisto, chemijos pramonės iki energetikos ar kitų technologinių taikymų. [1]. Viena iš įdomesnių RTIL klasių yra bioaktyvieji RTIL (b-RTIL). [2] B-RTIL yra suderinami su gyvaisiais organizmais arba gali su jais sąveikauti, gali būti pritaikyti vaistų sintezėje, kaip vaistų nešikliai (*drug delivery systems*), kaip vaistų komponentai ir kita. Taip pat net nedideli kiekiai b-RTIL gali smarkiai padidinti netirpių ar menkai tirpių medžiagų tirpumą vandenyje. Daug cheminių junginių, kurie yra aktyviosios vaistų medžiagos, pasižymi žemu tirpumu vandenyje, tačiau tai yra būtina medicininiams taikymams. [2] Viena iš tokių medžiagų yra glibenklamidas (Gli, C₂₃H₂₈ClN₃O₅S) (1 pav.), kuri yra aktyvioji medžiaga naudojama vaistuose, skirtuose gydyti II-tipo diabetą.

Cholino Triptofanatas ([Ch][Try]) ir Cholino Lizinatas ([Ch][Lys]) yra b-RTIL (1 pav.), kurie yra sudaryti iš cholino katijono ir atitinkamai iš triptofano ir lizino anijonų.

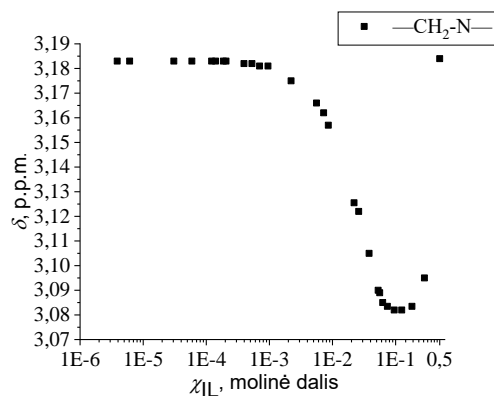


1 pav. Tirtosios medžiagos: A – Glibenklamidas (Gli), B – Cholino katijonas ([Ch]), C – Triptofano anijonas ([Try]), D – Lizinato anijonas ([Lys]).

Šie b-RTIL sudarytas iš tik bioaktyviųjų sudedamųjų dalių – cholinas yra ląstelių membranos komponentas ir dalyvauja gyvųjų organizmų metabolizmo procesuose. Triptofanas ir lizinas yra amino rūgštys, svarbios baltymų

biosintezėje. Norint tokias b-RTIL savybes panaudoti medicininiams taikymams, svarbu suprasti ten vykstančius procesus molekuliniam lygmenyje. Vienas iš eksperimentinių metodų tai padaryti yra Branduolių Magnetinio Rezonanso (BMR) spektroskopija.

Taikant ¹H, ¹³C 1D ir 2D aukštosios skyros BMR metodus buvo atliktas spektrinis priskyrimas tirtiesiems b-RTIL. ¹H BMR parametrų kitimas buvo įvertintas plačiame koncentracijų intervale ($\chi_{IL} = 1 \cdot 10^{-6}$ ir $\chi_{IL} \approx 1$ molinės dalies, mol. d.) [Ch][Lys] ir [Ch][Try] vandeniniuose tirpaluose. Nustatyta, kad cholino katijono protonų cheminio poslinkio vertės [Ch][Lys] tirpale pasiekia sotį ties $\chi_{IL} = 2 \cdot 10^{-4}$ mol. d., o [Ch][Try] tirpale ties $\chi_{IL} = 2,5 \cdot 10^{-4}$ mol. d. Triptofano anijono protonų cheminis poslinkis nekinta žemesnėse nei $\chi_{IL} = 5 \cdot 10^{-5}$ mol. d. koncentracijose. Tuo tarpu lizinato anijono cheminio poslinkio vertės nepasiekia įsisotinimo tirtosiose koncentracijose. Buvo registruotas cholino katijono protonų cheminio poslinkio vertės minimumas ties $\chi_{IL} = 0,1$ mol. d. (2 pav.).



2 pav. Cholino katijono CH₂-N— protono cheminio poslinkio kitimas [Ch][Try/Lys] vandeniniame mišinyje.

Galiausiai buvo įvertintas Gli tirpumas [Ch][Lys] ir [Ch][Trp] vandeniniuose tirpaluose – nustatyta, kad abu b-RTIL padidina Gli tirpumą vandenyje.

Tyrimams finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-22-74.

Reikšminiai žodžiai: BMR, bioaktyvus joninis skystis, b-RTIL, glibenklamidas, tirpumas, cheminis poslinkis.

Literatūra

- [1] *Chem. Rev.* 2017, 117, 10, 6633-6635.
[2] *Chem. Rev.* 2017, 117, 10, 7132-7189.

Valerijono rūgšties struktūrinė analizė molekulių virpesinės spektroskopijos teoriniais ir eksperimentiniais metodais

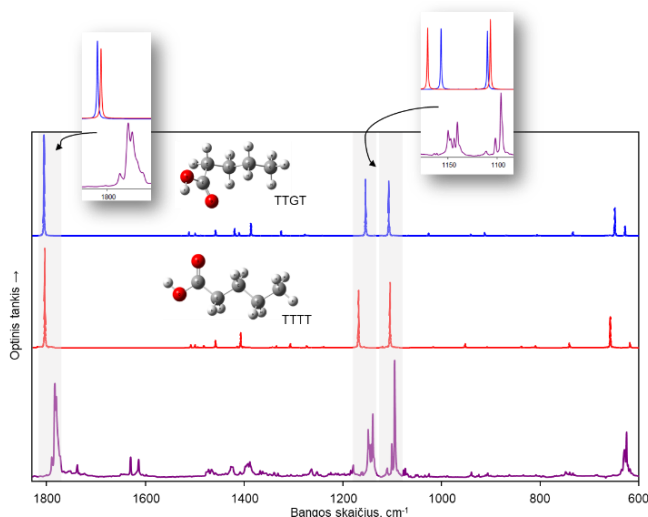
Structural analysis of valeric acid by means of theoretical and experimental methods of vibrational spectroscopy

Jogilė Mačytė¹, Rasa Platakytė¹, Joanna Stocka¹, Justinas Čeponkus¹, Valdas Šablinskas¹
¹Vilniau universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
jogile.macyte@ff.stud.vu.lt

Valerijono rūgštis (pentano rūgštis $C_5H_{10}O_2$) yra alifatinė karboksirūgštis¹. Valerijono rūgštis gamtoje randama daugiamečiame žydinčiame augale *Valeriana officinalis*¹, nuo kurio ir kilo valerijono rūgšties pavadinimas. Kvepaluose ir kosmetikoje naudojami valerijono rūgšties dariniai, kurie yra panašūs į lakiuosius esterius. Medicinoje naudojama kaip vaistas nuo streso ir nemigos.

Karboksirūgštys dažnai tiriamos virpesinės spektroskopijos metodu, nes jos gali būti naudojamos kaip modelinės sistemos padedančios suprasti procesus, vykstančius sudėtingesnėse molekulinėse sistemose². Paskutiniiais dešimtmečiais tokiuose tyrimuose plačiai naudojamas matricinės izoliacijos FTIR metodas ir tyrimai yra orientuoti į vandenilinių ryšių trumpagrاندėse karboksirūgštyse, pradedant skruzdžių ir baigiant propiono. Ilgagrاندės rūgštys virpesinės spektroskopijos metodu yra tiriamos daug rečiau dėl to, kad atsiranda papildomų komplikacijų³ dėl jų gausios konformacinės įvairovės. Tokių rūgščių virpesiniai spektrai yra labai sudėtingi, o spektrinių juostų priskyrimas vidiniams molekuliniams virpesiams yra problematiškas.

Pagrindinis šio darbo tikslas - nustatyti galimas valerijono rūgšties konformacijas (žr. pav.1), naudojant matricinės izoliacijos FTIR spektroskopiją kartu su teoriniais skaičiavimais.



1 pav. Neono 3 K matricioje izoliuotos valerijono rūgšties FTIR sugerties spektras (apatinė kreivė). Paveikslėlyje taip pat pateikti teoriniai TTTT ir TTGT konformerų IR sugerties spektrai. Skaičiavimai atlikti naudojant B3LYP/aug-cc-pVTZ.

Teoriniai skaičiavimai buvo atlikti dviem skirtingais metodais. Pirmiausia buvo atlikti DFT skaičiavimai naudojant B3LYP funkcionalą ir papildyta Dunningo koreliacijos baziniu rinkiniu (triguba zeta). Toliau skaičiavimai buvo tęsiami naudojant MP2 - Møller-Plesset metodą, kuris buvo papildytas taip pat Dunningo koreliacijos baziniu rinkiniu (triguba zeta). DFT metodu suskaičiuotas konformerų energijų skirtumas yra $\Delta E = 1,5$ kJ/mol (įskaitant nulinio virpesinio lygmens energiją). TTTT yra stabilesnis konformeras, tačiau MP2 skaičiavimai prognozuoja kad TTGT konformeras yra stabilesnis ir $\Delta E = -0,3$ kJ/mol (įskaitant nulinio virpesinio lygmens energiją) nei TTTT.

Neono matricioje izoliuotos valerijono rūgšties eksperimentinis FTIR sugerties spektras kartu su teoriniais dviejų stabiliausių konformerų spektrais yra pateikti 1 pav. Eksperimentiniai spektrai lyginami su suskaičiuotais DFT metodu, nes DFT metodu suskaičiuoti virpesiniai dažniai geriau koreliuoja su eksperimentinėmis juostomis. Teorinių ir eksperimentinių spektrų palyginimas leido nustatyti abiem konformerams priskiriamas eksperimentines spektrines juostas. C=O valentinius virpesius atitinkanti spektrinė juosta stebima ties 1802 cm^{-1} (TTGT konformeras) ir ties 1803 cm^{-1} (TTTT konformeras). $1160-1140$ cm^{-1} spektrinėje srityje yra juostos, atitinkančios TTGT konformero $\delta CH_2/\nu C-O$ virpesius (apskaičiuota 1169 cm^{-1}) ir TTTT konformero CH_2 valentinius virpesius (1154 cm^{-1}). Šie rezultatai įrodo, kad žemos temperatūros matriciose egzistuoja du valerijono rūgšties konformeri, kurių skirtingos koncentracijos yra nulemtos konformerų skirtingu stabilumu.

Skaičiavimai atlikti Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto superkompiuterio "VU HPC" resursais.

Reikšminiai žodžiai: valerijono rūgštis, matricinė izoliacija, FTIR, konformacijos.

Literatūra

- [1] Schaechter M. *Encyclopedia of Microbiology*. 3rd ed. Amsterdam: Elsevier/Academic Press; (2009)
- [2] J. Ceponkus et al. *Lithuanian Journal of Physics*, Vol. 49, No. 1, pp. 53–62 (2009)
- [3] V. Šablinskas et al. *Journal of Molecular Structure* 976 (2010) 263–269

Spektrinių savybių pokyčiai indukuoti *trans*-stilbena agregatų susidarymu polistireno matricoje

Trans-stilbene spectral properties changes induced by aggregates formation in a polystyrene matrix

Ivan Halimski¹, Gabrielė Kareivaitė¹, Renata Karpicz¹, Andrej Dementjev¹, Mindaugas Mačernis²,
Darius Abramavičius², Leonas Valkūnas^{1,2}

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

²Institute of Chemical Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

ivan.halimski@ftmc.lt

1,2-diphenylethylene, so-called Stilbene, has two aromatic groups bonded to the carbon – carbon double bond. The main property of stilbene compounds is reversible *cis* – *trans* isomerization. During the isomerization two phenyl rings twist around single carbon – carbon bond. This property makes stilbene molecules potentially applicable to molecular switches [1]. Another perspective application of stilbene molecules is ionizing radiation detectors [2]. However, recently it was noticed that stilbenes exhibit unusual fluorescence dependence on temperature, which draws an attention to the aggregation impact on spectral properties [3]. For these reasons it is important to investigate the features of stilbene (*trans*-stilbene in particular) excitation dynamics. In this work *trans*-stilbene thin films (prepared via spin-coating technique in polystyrene (PS) matrix with different *trans*-stilbene mass ratios) are under investigation. To analyze changes (depending on temperature (from 15K to room temperature), mass of host and film thickness) in spectroscopical properties of *trans*-stilbene thin films stationary absorption, fluorescence and fluorescence decay were measured. Coherent anti-Stokes Raman spectroscopy (CARS) was performed to investigate the structure of thin films.

Absorption spectra shows the increased background intensity of higher concentrations films due to the light scattering induced by aggregates. The observed red shift from the fluorescence emission spectra confirms the aggregation processes observed with CARS. Moreover, the formation of molecular clusters results in fluorescence lifetimes variation. Nevertheless, the samples with higher concentrations experience the fluorescence enhancement due to the presence of aggregates of nano crystallites. The small nano crystallites subsequently form aggregates of 40-100 nm *trans*-stilbene nanocrystals.

Fluorescence quenching dynamics of different samples at different temperatures indicate aggregation-induced exciton diffusion in the solid forms of stilbene, which is precisely what is reflected in the fluorescence spectra. More details about the samples as well as their excitation dynamics features will be presented at the conference.

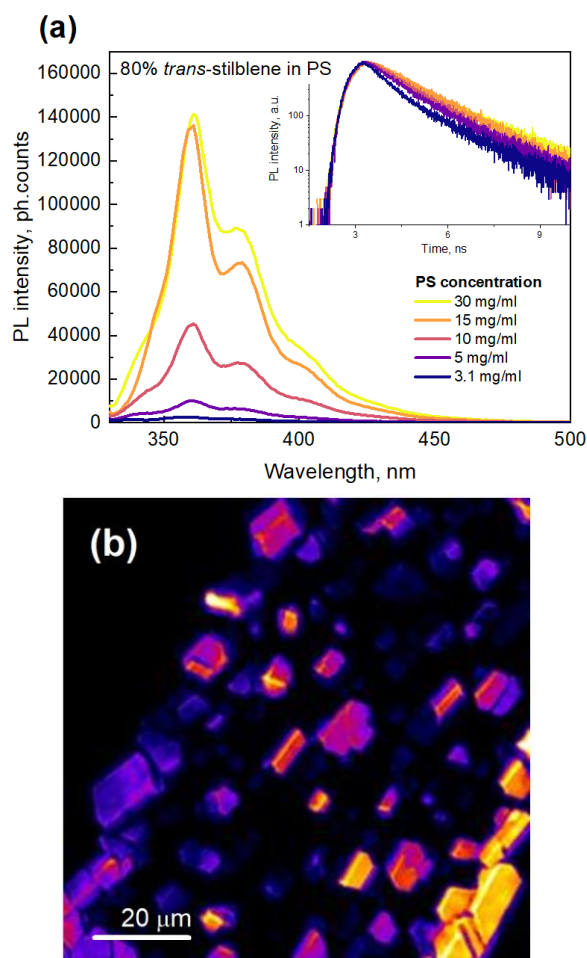


Fig. 1. (a) Fluorescence spectra and fluorescence kinetics ($\lambda_{\text{ex}} = 300 \text{ nm}$) of 80% *trans*-Stilbene in PS. (b) CARS image ($100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$) of 80%-*trans*-Stilbene in 30 mg/ml PS.

Keywords: *trans-stilbene*; *nanoagregates*; *fluorescence*; *fluorescence decay*; *CARS*.

Literature

- [1] V. Nagarajan et al., *Condens. Matter Phys.* 21, 43010–43012, 2018.
- [2] S. K. Lee et al., *Prog. Nuclear Sci. Techn.*, 2011, 292–295.
- [3] R. Karpicz, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 3447–3454, 2021.

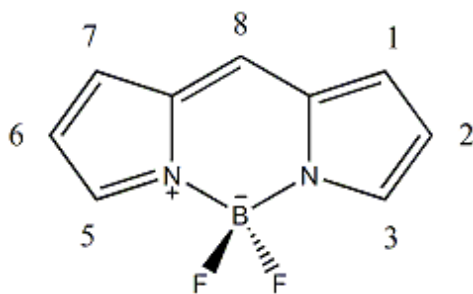
BODIPY molekulių su *meso*-formilo pakaitais fluorescencijos gyvavimo trukmės priklausomybės nuo tirpiklio sudėties teorinis tyrimas

Theoretical Insights into Solvent Dependent Fluorescence Lifetimes in *Meso*-formyl BODIPY Derivatives

Delianas Palinauskas¹, Stepas Toliautas¹

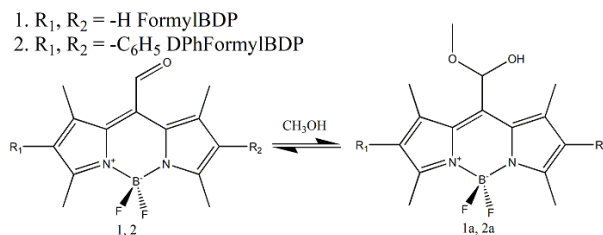
¹Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9-III, 10222 Vilnius
delianas.palinauskas@ff.stud.lt

BODIPY (Boro dipirometenai) yra fluorescuojančių dažiklių klasė, kuri yra naudojama kaip žymenys įvairių analičių koncentracijos nustatymui bei ląstelių struktūros vaizdinimui. BODIPY (1 pav.) ir jo dariniai pasižymi aukštu spinduliavimo kvantiniu našumu, intensyvia fluorescencija bei aukštu fotostabilumu. Viena iš BODIPY dažiklių pritaikymo sričių yra klamos matavimas. Priklausomai nuo 8 (*meso*) padėtyje esančio pakaito ir šoninių pakaitų prigimties šios molekulės fluorescencijos savybės kinta keičiantis aplinkinės terpės klampai [1].



1 Pav. BODIPY molekulės struktūra

Situacijose, kai tirpinys tiesiogiai reaguoja su tirpikliu, gali pasikeisti optiškai aktyvios molekulės cheminė sudėtis ir elektroninė struktūra, dėl ko atsiranda optinių parametrų pokyčiai. Šiame darbe nagrinėjamos dvi molekulės FormylBDP (2 pav. 1) ir DPhFormylBDP (2 pav. 2) turi formilo pakaitą 8 BODIPY fragmento padėtyje. Dėl šio pakaito 1 ir 2 molekulės gali reaguoti su metanoliu, sudarant hemiacetalus (1a, 2a). Neseniai atliktų eksperimentų rezultatai rodo [2], kad matuojant 1 molekulės fluorescencijos gesimo kreives glicerolio ir metanolio mišiniuose su vis didėjančia metanolio koncentracija, mažėja sužadintos būsenos gyvavimo trukmė. Padidėjus metanolio koncentracijai nuo 0 iki 100 % 1 molekulės sužadintos būsenos gyvavimo trukmė sumažėja 2 kartus. Tačiau 2 molekulės sužadintos būsenos gyvavimo trukmė beveik nepriklauso nuo metanolio koncentracijos.



2 pav. FormylBDP ir DPhFormylBDP molekulių reakcijos su metanoliu schema

Šiame darbe remiantis kvantinės chemijos skaičiavimais nagrinėjama, kaip galima reakcija su metanoliu daro įtaką sužadintos būsenos gyvavimo trukmei ir kodėl kinta tik 1 molekulės sužadintos būsenos gyvavimo trukmė didėjant metanolio koncentracijai. Pradinės ir reakcijos produktų geometrinės struktūros buvo optimizuotos tankio funkcionalo teorija naudojant PBE0 metodą ir cc-pVDZ funkcijų bazę. Reakcijos mechanizmai nagrinėjami apskaičiuojant mažiausios energijos kelią, jungiantį pradinę ir produktų konfigūracijas. Sužadintos būsenos spindulinės relaksacijos konstantos buvo apskaičiuotos remiantis adiabatine hesiano aproksimacija (angl. Adiabatic hessian). Visi skaičiavimai buvo atlikti su Orca 5.0.3 programiniu paketu. Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Fizikos fakulteto dalyje.

Apskaičiuotas 1a ir 1 sužadintos būsenos gyvavimo trukmių santykis yra lygus 2,41. Šis santykis yra artimas eksperimentiškai nustatytam rezultatui, kas rodo, kad susidaręs 1a hemiacetalis lemia sužadintos būsenos gyvavimo trukmės pokytį.

Reikšminiai žodžiai: BODIPY, sužadintos būsenos gyvavimo trukmė, fluorescencija, tankio funkcionalo teorija, adiabatinis hesianas, reakcijos mechanizmas.

Literatūra

- [1] A. Loudet, K. Burgess, BODIPY Dyes and Their Derivatives: Syntheses and Spectroscopic Properties, Chem. Rev. 107 (2007) 4891–4932.
- [2] R. Žvirblis, A. Vyšniauskas, J. Dodonova-Vaitkūnienė. (2022, kovo 15–18). Synthesis and investigation of meso-formyl BODIPY modified with phenyl rings at 2,6-positions [Stendinis pranešimas]. Open Readings 2022, Saulėtekio al. 3, Vilnius.

Kavitanduose inkapsuliuotų alkanų struktūros bei dinamikos modeliavimas MD simuliacijomis

Exploring structure and dynamics of alkane-cavitand complexes by MD simulations

Benjaminas Malmiga¹, Edvinas Orentas¹, Kęstutis Aidas²

¹Vilniaus Universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

²Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
benjaminas.malmiga@chgf.stud.vu.lt

Kavitandai – tai molekuliniai konteineriai, kuriuose gali būti patalpintos tinkamo dydžio ir formos molekulės. Kavitandai vaidina svarbų vaidmenį supramolekulių chemijoje. Čia suformuojami vadinamieji „šeimininko-svečio“ kompleksai, kuriuose svečias ir šeimininkas (kavitandas) sąveikauja nekovalentinėmis sąveikomis. Tokiu būdu šie kompleksai primena biologines struktūras, kaip, pavyzdžiui, fermentai, kurių aktyvieji centrai geba talpinti bei orientuoti molekules netipinių reakcijų katalizavimui [1]. Šeimininko molekulės geba atskirti „svečio“ molekules nuo supančio tirpiklio, pavyzdžiui, rezorcinaro kavitandai formuoja dimerines struktūras, primenančias kapsulę. Suformuotos kapsulės vidinė aplinka atlieka savotišką tirpiklio vaidmenį ir taip daro įtaką reagento tirpumui [2,3]. Dėl šių sąveikų kavitandai aktualūs vystant naujas vaistų transporto sistemas, cheminėje sintezėje ir kitose srityse.

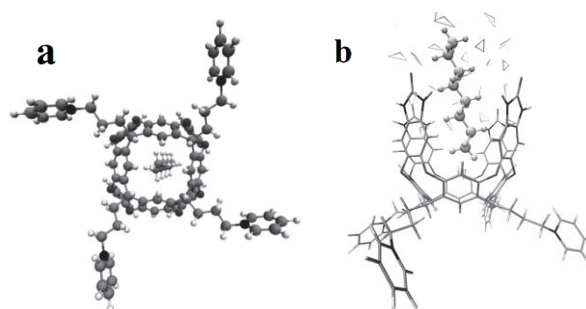
Šiame darbe nagrinėjamas kavitandas yra „puodelio“ formos molekulė, sudaryta iš keturių 2-benzimidazolono (ciklinio karbamido) tiltelių, kurie leidžia kavitandai formuoti dimerus vandenilinių ryšių pagalba [4]. „Puodelio“ pagrindas sudarytas iš keturių benzeno žiedų, sujungtų alkaniniais tilteliais, prie kurių prijungiamos šoninės piridino grupės [5]. Šios grupės užtikrina gerą kavitando tirpumą vandenyje. Kadangi kavitando ertmė yra hidrofobinė, todėl joje gali būti inkapsuliuojamos nepolinės vandenyje netirpios molekulės, tokios kaip alkanai, ar mažai tirpios vaistų molekulės, pavyzdžiui, ibuprofenas [5]. Kaip rodo branduolių magnetinio rezonanso matavimai, kavitando ertmėje esantys alkanai gali įgyti ilgai gyvuojančias egzotines „U“ ar „J“ formos konformacijas, kurios mažai tikėtinos įprastinėse izotropinėse aplinkose [5].

Šiame darbe buvo atliktos oktano molekulės, inkapsuliuotos rezorcinaro tipo kavitando ertmėje, klasikinės molekulinės dinamikos (MD) simuliacijos, siekiant įvertinti komplekso tarpmolekulinę struktūrą vandens tirpale. Pradinės C_s simetrijos oktano ir C_4 simetrijos kavitando geometrijos buvo optimizuotos HF/6-31+G* metodu, naudojant programą Gaussian (1a pav.). MD simuliacijose oktano ir kavitando molekulės buvo aprašytos GAFF jėgų lauko parametrais, o vandens molekulėms buvo taikytas TIP3P potencialas. Oktano ir kavitando taškiniai krūviai buvo apskaičiuoti RESP

metodu. MD simuliacijos buvo atliktos naudojant programą AMBER.

Dešimčių nanosekundžių trukmės simuliacijos parodė, kad vandens molekulės iš tiesų nepatenka į kavitando ertmę (1b pav.). Komplexas tarp oktano ir kavitando išliko susiformavęs visos simuliacijos metu. Nors buvo stebimi oktano molekulės konformaciniai virsmai, visgi dominuojanti buvo tiesinė, vadinamoji visitrans konformacija.

Skaičiavimai buvo atlikti Vilniaus universiteto aukšto našumo skaičiavimo centro „HPC Saulėtekis“ superkompiuteriu.



1 pav. (a) Komplexas iš apačios, matoma C_{4v} simetrija, (b) kompleksas vandens dėžėje, vandens molekulės komplekso išorėje.

Reikšminiai žodžiai: supramolekulių chemija, modeliavimas, MD simuliacijos.

Literatūra

- [1] J. R. Moran, S. Karbach, D.J. Cram, Am. Chem. S., **104** (21), 5826-5828 (1982).
- [2] D. Ajami, G. Theodorakopoulos, I. D. Petsalakis, J. Rebek, Chem. Eur. J., **19** (50), 17092-17096 (2013).
- [3] D. Tzeli, G. Theodorakopoulos, I. D. Petsalakis, D. Ajami, J. Rebek, Am. Chem. S. **133** (42), 16977-16985 (2011).
- [4] M. H. K. Ebbing, M.-J. Villa, J.-M. Valpuesta, P. Prados, J. de Mendoza, P. Natl. Acad. Sci. USA, **99** (8), 4962-4966 (2002).
- [5] K.-D. Zhang, D. Ajami, J. V. Gavette, J. Rebek, Chem. Commun., **50**, 4895-4897 (2014).

Selagibenzofenonų ir jų kompleksų su grafeno kvantiniais taškais optinių savybių tyrimas

Investigation of optical properties of selagibenzophenones and its complexes with graphene quantum dots

Vilius Čirgelis^{1,2}, Karolina Maleckaitė¹, Ringailė Lapinskaitė¹, Linas Labanauskas¹, Andrej Dementjev¹, Renata Karpič¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 1022 Vilnius

vilius.cirgelis@ff.stud.vu.lt

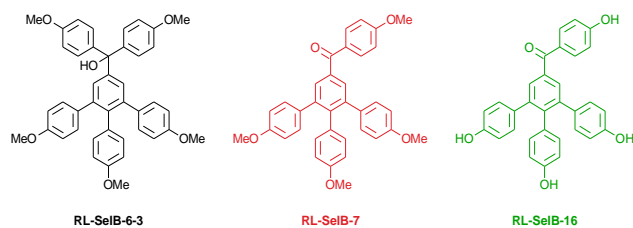
Selagibenzofenonai (SelB) yra medžiagų grupė, išgaunama iš *Selaginella* genties augalų. Šios genties augalai yra naudojami tradicinėje Kinijos, Indijos medicinoje, gydant astmą ar lokalias traumas. Tyrimai parodė, kad šios medžiagos pasižymi įvairiomis biologinėmis savybėmis, pavyzdžiui, antibiotinėmis, antibakterinėmis ar turinčiomis priešvėžinį poveikį [1].

Grafeno kvantiniai taškai (GQD) yra nanodalelės su unikaliomis ir naudingomis savybėmis: cheminis stabilumas, nežymus toksiškumas, mažas dydis, lemiantis gerą įsiskverbimą, bei gebėjimas fluoresuoti (QY ≈ 40%). GQD gali būti panaudoti kaip vaistų nanonešikliai, reikalingi pernešti veikliąją medžiagą į reikiamą ląstelę, taip apsaugant kitas ląsteles [2].

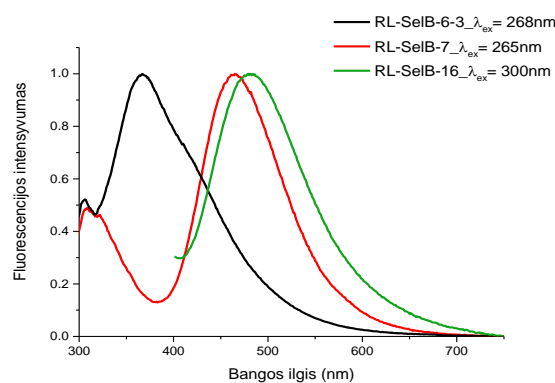
Tyrimo tikslas buvo ištirti SelB medžiagų (1 pav.) fluorescencijos spektrų pokyčius laike ir įvertinti kompleksų su GQD susidarymą. SelB ir jų kompleksų su GQD optinės savybės buvo tiriamos optiniais metodais. Tyrimo metu buvo matuojami SelB ir GQD mišinio, sumaišytų 1:1 santykiu, bei grynų SelB ir GQD sugerties ir fluorescencijos, fluorescencijos žadinimo spektrai bei fluorescencijos gesimo kinetikos. SelB spektrai ir kinetikos buvo matuojamos skirtingo poliškumo tirpikliuose: tetrahidrofurane (THF), dimetilsulfokside (DMSO), metanolyje (MeOH) ir metanolio su pH6 buferinio tirpalo mišiniu (MeOH+pH6). SelB su GQD kompleksų susidarymas buvo įvertintas naudojant CARS spektroskopiją.

Priklausomai nuo prijungtų prie SelB molekulių šoninių grupių (1 pav.) keičiasi jų spektrinės savybės: RL-SelB-6-3 sugeria ir fluoresuoja UV spektro srityje, tuo tarpu junginių su keto grupe fluorescencijos spektras pasistūmė į VIS sritį su juostos maksimumu ties 480 nm (2 pav.). Taip pat SelB junginių sugerties bei fluorescencijos spektrai priklauso nuo terpės poliškumo. Sumaišius SelB junginį su GQD susiformuoja stabilus kompleksas, kurio fluorescencijos spektre dominuoja GQD fluorescencija. Buvo išmatuotos SelB ir GQD bei jų agregatų fluorescencijos gesimo kinetikos, kurios patvirtino kompleksų susidarymą. SelB junginiai su metilo grupe (1 pav.) sudaro su GQD kompleksų

agregatus, kurie iškreinta kaip nuosėdos. Kompleksų agregatai duoda CARS signalą, būdingą grafenui.



1 pav. Selagibenzofenonų struktūrinės formulės ir jų pavadinimai.



2 pav. Tirtų selagibenzofenonų normuoti fluorescencijos spektrai DMSO tirpiklyje. Legendoje pažymėtas žadinimo bangos ilgis.

Reikšminiai žodžiai: grafeno kvantiniai taškai, selagibenzofenonai, fluorescencija, fluorescencijos gesimo kinetikos, CARS spektroskopija.

Literatūra

- [1] Ringailė Lapinskaitė, Štefan Malatinec, Miguel Mateus, Lukas Rycek, „Cross-Coupling as a Key Step in the Synthesis and Structure Revision of the Natural Products Selagibenzophenones A and B“. *Catalysis* (2021) 11(6), p. 708.
- [2] G. Rajender, P.K. Giri „Formation mechanism of graphene quantum dots and their edge state conversion probed by photoluminescence and Raman spectroscopy“ *J. Mater. Chem. C* (2016) 4, p. 10852-10865.

Valentiškai nesurištos P-P sistemos BMR netiesioginės branduolių sąveikos J kitimo tyrimas su tankio funkcionalų teorija ir Car-Parrinello molekulių dinamika

Exploring NMR Value Variations for Nonbonded P-P Interactions via DFT and Car-Parrinello Study of Indirect Spin-Spin J Couplings

Jonas Franukevičius¹, Mindaugas Mačernis¹

¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės Fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

jonas.franukevicius@ff.vu.lt

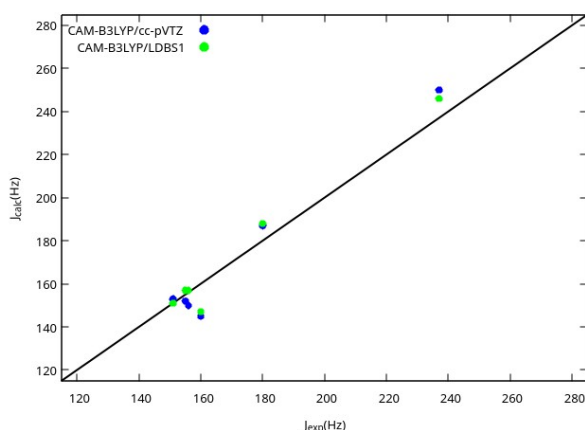
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Branduolių magnetinio rezonanso tipo kvantiniai kompiuteriai buvo kvantinės kompiuterijos pradininkai, tačiau ši sritis nebevystoma, dėl tam tikrų limitų [1], bet išnaudojant tarp erdvinę J sukinių sąveiką (angl. TSJ), atsiranda perspektyvų šiuos limitus įveikti [2]. Deja, eksperimentiškai ieškoti ir nustatinėti bandinius, turinčius TSJ ir galinčius apdoroti kv. informaciją yra brangu, todėl reikia pasitelkti teorinius skaičiavimus, žinoti metodus, kaip apskaičiuoti BMR kv. kompiuteriui reikalingus [1] parametrus: cheminį ekranavimą ir netiesioginę branduolių sąveiką J.

Skystos būsenos, branduolių magnetinio rezonanso tipo, n kubitų kvantinio kompiuterio Hamiltonianas [1]:

$$\hat{H} = \sum_i^n -\gamma_i \hat{S}_i (1 - \sigma_i) \vec{B} + \sum_{i < j}^n 2 \pi J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j \quad (1)$$

Atliktas tankio funkcionalo teorijos metodikos tikslumo tyrimas su valentiškai nesurištomis P-P sistemomis. Buvo vertinami tarp erdvinės, netiesioginės branduolių sukinių sąveikos J skaičiavimų rezultatai su eksperimentiniais duomenimis [2, 3, 4]. Gauti rezultatai rodo (žr. 1 pav.), kad CAM-B3LYP tankio funkcionalas ir cc-pVTZ bazinių funkcijų paketas kartu su LDBS1 schema gali apskaičiuoti J sąveiką su vidutine 4.3% arba atitinkamai su vidutine 3.1% paklaida.



1 pav. Dviejų tiksliausių J sąveikos skaičiavimo metodikų rezultatų palyginimas su eksperimentiniais duomenimis [3, 4, 5].

Bis(difenilfosfino)metano molekulės, modeliuotos kambario temperatūros uždaroje aplinkoje, Car-Parrinello molekulių dinamikos duomenų statistinis tyrimas, naudojant tiesinę gaussianų modelių kombinaciją, parodė, kad egzistuoja trys konf. **1**, **2** ir **3**.

Konformerų geometrijos optimizacija ir BMR skaičiavimai atlikti su CAM-B3LYP/cc-pVTZ metodika. Suskaičiuotos konf. **1**, **2** ir **3** J sąveikos vertės yra atitinkamai 102 Hz, -10 Hz ir 170 Hz.

Iš šių optimalių **1**, **2**, **3** struktūrų buvo sudaryti šeši dimerai **11**, **12**, **13**, **22**, **23**, **33**, kurių geometrijos buvo optimizuotos ir atlikti BMR skaičiavimai naudojant tą patį teorinį lygmenį. Iš rezultatų išplaukia (žr. 1 lent.), kad intermolekulinė J sąveika, lyginant su intramolekuline, yra nykstamai maža. Taip pat, J sąveika tarp fosforo branduolių pavieniuose konformeruose yra skirtinga lyginant su dimeruose esančių analogiškų konformerų intramolekuline branduolių sukinių sąveika.

1 lentelė. Suskaičiuotos, bis(difenilfosfino)metano molekulės dimerų, netiesioginės fosforo branduolių sąveikos J vertės Hz, naudojant CAM-B3LYP/cc-pVTZ.

Dim.	J _{P1P2}	J _{P1P3}	J _{P1P4}	J _{P2P3}	J _{P2P4}	J _{P3P4}
11	102	0.03	-0.7	-0.006	0.02	143
12	98	0.15	-0.008	-0.1	0.08	-11
13	131	0.09	-0.02	-0.004	0.03	170
22	-2	-0.2	0.04	-0.006	-0.005	-2
23	-9	-1	-0.03	0.2	9	187
33	174	-1.9	6.8	0.6	0.9	154

Reikšminiai žodžiai: branduolių magnetinis rezonansas, kvantinis kompiuteris, J sąveika, tankio funkcionalų teorija, Car-Parrinello molekulių dinamika, konformerai, dimerai.

Literatūra

- [1] J. A. Jones, Prog Nucl. Magn. Reson. Spectrosc., vol. 59, pp. 91–120, 2011.
- [2] J. B. dos Reis Lino and T. C. Ramalho, J. Phys. Chem., vol. 123, pp. 1372–1379, 2019.
- [3] B. A. Chalmers, K. S. A. Arachchige, J. K. D. Prentis, F. R. Knight, P. Kilian, A. M. Z. Slawin, and J. D. Woollins, Inorg. Chem., vol. 53, no. 16, 2014.
- [4] G. A. Bowmaker and J. P. Williams, A. J. Chem., vol. 47, pp. 451–460, 1994.
- [5] J. Heinicke, M. He, and R. Kadyrov, Het. Chem., vol. 9, no. 3, 1998.

Skirtingo riebalų rūgščių kristališkumo įtaka HOMO ir LUMO lygmenims

Influence of fatty acid crystallinity to HOMO-LUMO levels

Rokas Dobužinskas, Elzė Saldžiūnaitė, Egidijus Kamarauskas, Vygintas Jankauskas, Valentas Gaidelis, Justinas Čeponkus, Kęstutis Arlauskas

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt

Riebalų rūgštys – rūgštys su kuriomis nuolat susiduriame vartodami maisto produktus, naudojame kosmetikoje ir, galų gale, mes, mūsų ląstelės ir visa gyvoji gamta esame sudaryti iš šių riebalinių-lipidinių membranų, be kurių gyvybė būtų neįmanoma [1].

Fizikiniu požiūriu, kietojo kūno teorijoje vienas įdomiausių reiškinių yra medžiagų gebėjimas sudaryti tvarkias struktūras - kristalus. Šis įdomus reiškinys būdingas įvairių tipų organinėms biomolekulėms: gliukozei, baltymams ir minėtoms riebalų rūgštims. Tokio tipo medžiagos įprastai gali būti skirtingų kristalinių būvių – polimorfinių struktūrų. Skirtingi polimorfai skiriasi skirtingomis fizikinėmis: kietumu, spalva, optinėmis ir elektrinėmis savybėmis.



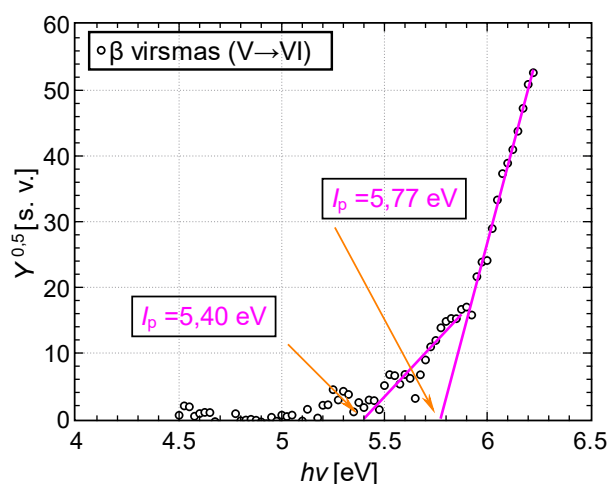
1 pav. Kakavos sviestą (šviesus) supa kakavos pupelės

Kakavos sviestas yra plačiai taikomas maisto pramonėje ir išsiskiria savo struktūrinėmis savybėmis [2]. Įprastai kambario temperatūroje kakavos sviestas yra kietas, tačiau šokolado pramonė reikalauja, jį temperuoti – paruošti stabiliausia forma, kad sviestas būtų kietas kambario temperatūroje bei netirptų salytyje su rankomis. Kakavos sviestą sudaro palmitino, stearino ir oleino rūgštys, tarpusavyje besijungiančios į trigubas molekules – trigliceridus. Kakavmedžio pupelė natūraliai aptinkami trigliceridai pakuodamiesi tarpusavyje gali sudaryti 6 skirtingas fazes ir priklauso polimorfinių medžiagų klasei.

Kietojo kūno elektronikos mokslinė grupė daugelį metų matuoja įvairių naujai susintetintų organinių medžiagų jonizacijos potencialą. Tai labai svarbus medžiagų parametras aprašant jų funkcines ir fundamentines savybes. Su naujausia mūsų sukurta aparatūros modifikacija galima detektuoti pavienius elektronus ir matuoti praktiškai nejautrių šviesai medžiagų jonizacijos potencialą, būtent tokiai medžiagų klasei priklauso riebalų rūgštys.

Nors konditerijos pramonėje labai svarbu kiečiausia V-oji kietumo fazė, kitos mažiau stabilios formos taip pat yra įdomios [3]. Žinant kristalinę struktūrą, skirtingoms

polimorfų formoms galima išmatuoti jų optinę sugertį, elektronų jonizacijos potencialą ir įvertinti organinių orbitalių energinę diagramą – HOMO ir LUMO lygmenis (atitinkamai angl. *Highest occupied molecular orbital* ir *Lowest unoccupied molecular orbital*).



2 pav. Šakninė intensyvumo priklausomė nuo fotonų energijos. Stebima elektronų jonizacija iš skirtingų LUMO lygmenų

Šie tyrimai svarbūs ne tik taikymams, bet ir fundamentaliajai biologijai, biochemijos mokslams ir šokolado entuziastams, kurie nuolat užduota klausimą, iš kur atsiranda ši ypatinga skonio tekstūra, kuria mėgaujasi pasaulio gurmanai.

Reikšminiai žodžiai: riebalų rūgštys, jonizacijos potencialas, HOMO-LUMO.

Literatūra

- [1] A. G. Marangoni S. S. Narine, *Organic Physical Properties of Lipids* (New York, Besel, 2002).
- [2] R. L. Wille & E. S. Lutton, *J. Am. Oil Chem. Soc.* **43**, 491–496 (1966)
- [3] K. Taguchi, A. Toda, H. Hondoh, S. Ueno, and K. Sato, *Molecules* **26**, 220 (2021)

SERS spektrinio metodo taikymas šlapimo pūslės vėžio diagnostikai iš šlapimo pūslės nuoplovų

Application of SERS spectroscopy for bladder cancer detection from bladder washouts

Dominyka Grašytė¹, Justinas Čeponkus¹, Gediminas Platkevičius², Sonata Adomavičiūtė-Gabrusovė¹, Arūnas Želvyss²,
Valdas Šablinskas¹

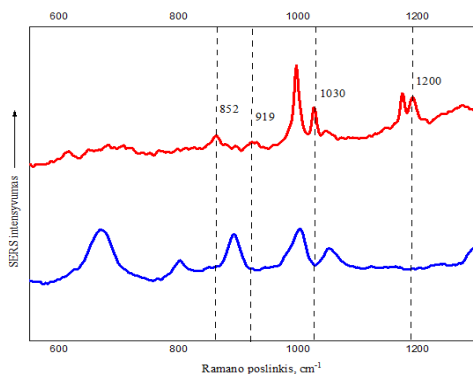
¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

²Vilniaus Universitetas, Medicinos fakultetas, Klinikinės medicinos fakultetas, Santariškių g. 5, 08406 Vilnius
dominyka.grasyte@ff.stud.vu.lt

Šlapimo pūslės vėžio diagnozavimui yra sukurta daugybė tyrimų įskaitant hematauriją, kompiuterinės tomografijos urografiją, intraveninę urografiją, multiparametrinį magnetinį rezonansą bei citoskopiją [1]. Visiems šiems išvardintiems diagnostikos metodams reikalinga brangi ir profesionali įranga, o galutinis rezultatas ne visada gaunamas teisingas.

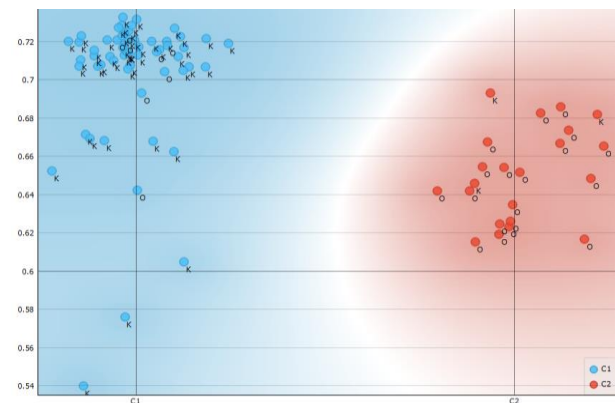
Sveikų ir vėžinių audinių ląstelių biologiniai skirtumai nedideli, tačiau gali nulėmti labai skirtingus ląstelių metabolizmus [2]. Vėžio diagnozavimas būtent ir yra paremtas vėžinių ląstelių metabolizmo pokyčiu. Šlapimo pūslės nuoplovų cheminė sudėtis vėžiniuose ir sveikuose audiniuose yra skirtinga, todėl atlikus fizikinę, cheminę ir biologinę šlapimo pūslės nuoplovų analizę galima nustatyti ar pacientas, kurio šlapimo pūslės nuoplovos tiriamos, serga vėžiu ar ne. Bandinių, kuriuose tiriamos medžiagos koncentracija maža, Ramano sklaidos spektrą galima užregistruoti panaudojant paviršiaus sustiprintą Ramano sklaidos (SERS) spektroskopiją. SERS metodas yra realizuojamas, naudojant koloidinius nanodalelių tirpalus.

Nustatyta, kad atlikus šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrų statistinę analizę, duomenis tinkamai suskirsčius į klases, galima pastebėti aiškius skirtumus tarp vėžinių ir nevėžinių šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrų. Tačiau tikslesnei analizei reikalinga didesnė duomenų imtis. Eksperimento metu atlikus skirtingų pacientų vėžinių ir nevėžinių šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrų analizę pastebėta, kad su tirozinu susijusi SERS spektrinė juosta, esanti ties 852 cm^{-1} , su baltymais ir sacharidais - ties 919 cm^{-1} , su fenilalaninu, ties 1030 cm^{-1} bei 1200 cm^{-1} , yra tinkamos šlapimo pūslės vėžio identifikacijai (žr. 1 pav.).



1 pav. Skirtingų pacientų vėžinių (raudona) ir nevėžinių (mėlyna) šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrai

Šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrų statistinei analizei tinkamiausias metodas, kuris padėjo sugrupuoti duomenis, yra K-vidurkių analizė (2 pav.). Atlikus eksperimentą ir išanalizavus duomenis nustatyta, kad SERS metodas yra efektyvus ir perspektyvus navikinių darinių šlapimo pūslės nuoplovose diagnostikai.



2 pav. K-vidurkių analizės rezultatai, intervale $900 - 1200\text{ cm}^{-1}$ (Trumpiniu „O“ – žymimi vėžinių, o „K“ – nevėžinių šlapimo pūslės nuoplovų SERS spektrai)

Galima daryti išvadą, kad kuo didesnė duomenų imtis, tuo tikslesnė ir pačių spektrų analizė, nes padidinus imtį spektrų klasifikavimas į abi klases pagerėjo. Išnagrinėjus neteisingai klasifikuotus šlapimo pūslės nuoplovų spektrus, galima teigti, kad toks netinkamas klasifikavimas nėra atsitiktinis. Spektrų klasifikavimo problemas lemia tiek netiksli ligos diagnozė, tiek ir genetinės ligos, kuriomis serga kai kurie pacientai.

Reikšminiai žodžiai: SERS, šlapimo pūslės nuoplovos, vėžio žymenys

Literatūra

- [1] C. Goessl, H.H. Knispel, K. Miller, R. Klan., The Journal of Urology: Is routine excretory urography necessary at first diagnosis of bladder cancer? 480-481 (1997).
- [2] O. J. Old, L. M. Fullwood, Vibrational spectroscopy for cancer diagnostics, Analytical Methods, 6(12), 3901-3917, (2014)

Kaprono rūgšties monomerų bei vandenilinio ryšio kompleksų struktūra. Matricinės izoliacijos IR spektroskopijos tyrimas

Structure of caproic acid monomers and hydrogen bond complexes. Matrix isolation IR spectroscopy study

Simona Bučinskaitė, Redas Kazlauskas, Jogilė Mačytė, Justinas Čeponkus

¹Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
justinas.ceponkus@ff.vu.lt

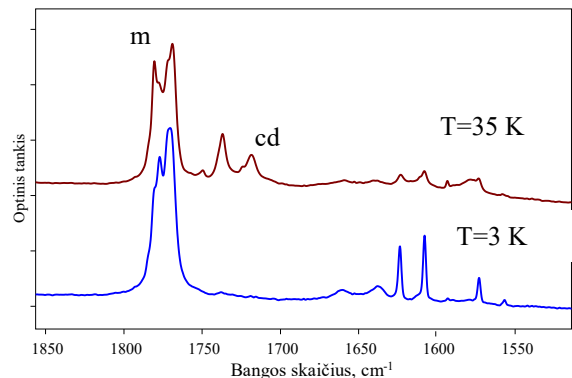
Vandenilinio ryšio sąveikos turi labai didelę įtaką tiek nedidelių tiek ir makromolekulių savybėms. Siekiant suprasti procesus vykstančius sudėtingose sistemose dažnai taikomi modeliniai tyrimai nedidelėse molekulių sistemose. Vandenilinio ryšio savybės sočiojose karboksirūgštyse tyrinėjamos ne vieną dešimtmetį, tačiau vis dar lieka neatsakytų klausimų apie tokių sistemų struktūrą ir susidaranti vandenilinius ryšius tarp šių molekulių. Nustatyta, kad pirmos trys homologinės eilės karboksirūgštys gali sudaryti mažiausiai dviejų tipų dimerus [1]. Daugumoje tyrimų su aukštesnės eilės rūgštimis teigiama, kad jose susidaro tik ciklinio tipo dimerai.

Žemos temperatūros matricinės izoliacijos metodas leidžia izoluoti molekules nuo aplinkos sąveikų jas patalpinant į inertinių dujų molekulinis kristalus. Tokio bandinio infraraudonosios sugerties spektrai pasižymi siauromis spektrinėmis juostomis, leidžiančiomis identifikuoti skirtingas molekulių struktūras.

Paveiksle pateiktas kaprono rūgšties (heksano rūgšties $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{COOH}$) izoliuotos Argono matricioje IR sugerties spektras C=O valentinių ir O-H deformacinių virpesių srityje. 3K temperatūros bandinio spektre 1800-1750 cm^{-1} srityje stebima plati ir struktūrą turinti juosta yra susijusi su kaprono rūgšties C=O grupės valentiniais virpesiais. Ši spektrinė juosta priskirta kaprono rūgšties monomero virpesiams. Juostos forma ir temperatūrinė evoliucija leidžia daryti prielaidą, kad eksperimentiškai stebime daugiau nei vieno tipo šios rūgšties monomeras. Kvantinės chemijos skaičiavimai (B3LYP/aug-cc-pVTZ, atlikti "VU HPC") taip pat patvirtina mažiausiai dviejų labai artimos energijos konformerų egzistavimo galimybę. Šildant bandinį, iki temperatūros artimos terpės lydymosi temperatūrai, inertinėje aplinkoje sudaroma galimybė molekulėms dalinai judėti inertinėje terpėje ir sudaryti molekulinis kompleksus. Kompleksų susidarymą liudija atsirandančios naujos spektrinės juostos 1750-1700 cm^{-1} srityje. Lyginant eksperimentinius duomenis su kvantinės chemijos skaičiavimų rezultatais spektrinę juostą ties 1718 cm^{-1} galima susieti su kaprono rūgšties ciklinių dimerų formavimusi. Kvantinės chemijos skaičiavimai bei spektrinių juostų 1650-1600 cm^{-1} spektrinėje srityje dinamika leidžia identifikuoti vandens ir kaprono rūgšties komplekso susidarymą ir šiam kompleksui priskirti spektrinę juostą ties 1737 cm^{-1} .

Papildomos spektrinės juostos stebimos ties 1749 cm^{-1} ir 1724 cm^{-1} negali būti paaiškintos ciklinio dimero ar vandens ir rūgšties komplekso susidarymų ir leidžia teigti,

kad inertinėje žemos temperatūros argono aplinkoje formuojasi ir nedideli kiekiai neciklinių kaprono rūgšties dimerų. Skirtingoms monomerų struktūroms priskirtų spektrinių juostų dinamika taip pat leidžia teigti jog vandenilinio ryšio kompleksus lengviau sudaro vienas iš konformerų. Atliekant matricios atkaitinimo eksperimentus aukštesnio dažnio monomerams priskirtos juostos komponentas mažėja sparčiau nei žemesnio dažnio spektrinės juostos dalis. Remiantis skaičiavimų rezultatais aukštesnio dažnio monomerams priskirta spektrinė juosta susijusi su molekuline kaprono rūgšties struktūra, kurioje karboksilo grupė nėra vienoje plokštumoje su alifatinės grandinės plokštuma. Tikėtina, kad dėl tokios netiesinės struktūros šis monomeras lengviau gali priartėti prie kito monomero ir sudaryti vandenilinio ryšio kompleksus.



1 pav. Kaprono rūgšties izoliuotos 3K temperatūros Argone (apačia) ir atkaitintos iki 35 K (viršus) IR sugerties spektrai. (m - monomeras, cd - ciklinis dimeras)

Reikšminiai žodžiai: Matricinė izoliacija, karboksirūgštis, IR spektroskopija.

Literatūra

[1] V. Sablinskas et al. Journal of Molecular Structure 976 (2010) 263–269.

Legiruoti organiniai kristalai su itin aukšta atgalinės interkombinacinės konversijos sparta

Doped organic crystals with high reverse intersystem crossing rate

Gediminas Kreiza¹, Saulius Juršėnas¹, Edvinas Orentas², Karolis Kazlauskas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

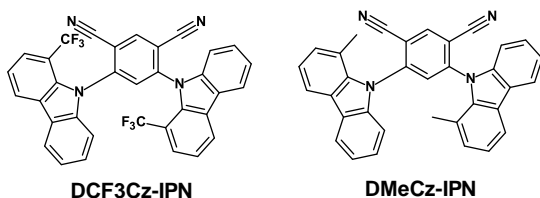
²Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Organinės chemijos katedra, Naugarduko g. 24, LT-03225

Vilnius

gediminas.kreiza@ff.vu.lt

Molekuliniai spinduoliai, pasižymintys šiluma aktyvuota uždelstą fluorescencija (TADF), yra patrauklūs dėl galimybės juos panaudoti našiuose OLED prietaisuose. Norint pasiekti aukštą prietaisų našumą ir žemus našumo nuokryčius, esant didelėms srovėms, reikalingos tokios spinduolių fluorescencijos savybės kaip aukšta atgalinė interkombinacinė konversija ir trumpa uždelstosios fluorescencijos trukmė.

Siekiant realizuoti giliai mėlyną TADF spinduliuotę su aukštomis atgalinės interkombinacinės konversijos spartomis (KRISC) buvo modifikuotas anksčiau mūsų grupės publikuotas dimetilkarbazolo/izoftalonitrilo TADF spinduolis (DMeCz-IPN). Cheminės sintezės metu karbazolo donorų metilo grupės buvo pakeistos akceptorinio pobūdžio CF₃ grupėmis, taip suformuojant naują junginį DCF3Cz-IPN (1 pav.). Trifluorometilo grupių panaudojimas tokioje karbazolo pozicijoje, mūsų žiniomis, yra unikalus ir, taip pat, patrauklus dėl didesnės erdvinės sąveikos su akceptoriumi ir teigiamos šių grupių įtakos elektronų transporto savybėms.

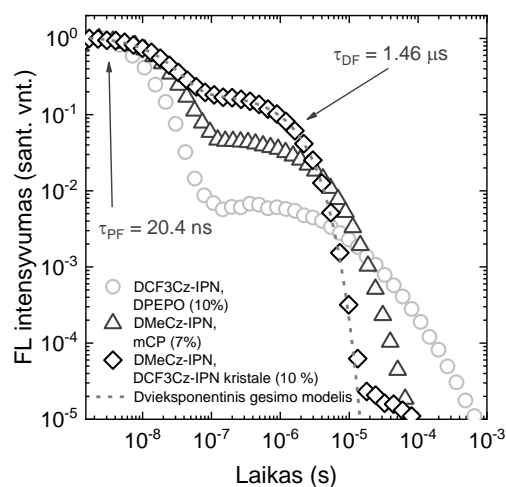


1 pav. Tirtų spinduolių molekulinė struktūra.

Vykdam tyrimus, buvo pastebėta, kad DCF3Cz-IPN ir DMeCz-IPN junginiai dėl, sąlyginai, panašios molekulinės geometrijos itin lengvai formuoja kokristalus. Šie kristalai išlaikė nepakitusių pakavimąsi ir kristalinės gardelės parametrus legiruojant DMeCz-IPN junginiu net koncentracija siekiančia iki 10%. Kadangi DMeCzIPN junginys pasižymi mažesnės energijos spinduliuote nei CF₃ grupės turintis jo atitikmuo, pavyko sukurti unikalią efektyvia Fiersterio pernaša pasižyminčių TADF kristalų sistemą.

Panaudojus tokią sistemą galima ženkliai sumažinti DMeCzIPN spinduolio uždelstosios fluorescencijos trukmę ($t_{DF} = 1,46 \mu\text{s}$, 2 pav.) ir padidinti RISC spartas ($k_{RISC} = 1,1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$) išlaikant aukštą fluorescencijos kvantinį našumą (0,8). Toks ženklus pagrindinių TADF savybių pagerėjimas siejamas su DMeCzIPN junginio molekulinės geometrijos pakitimu – junginys įterptas į DCF3Cz-IPN kristalą dėl tarpmolekulinių sąveikų yra priverstas užimti „šeimininko“ sistemos molekulinę

geometriją. Taip pat kieta spinduolio aplinka neleidžia ženkliai molekulinės geometrijos pakitimų vykstant sužadintų būsenų relaksacijai. Dėl šių priežasčių buvo išvengta TADF spinduoliams būdingų struktūrinės tinkleto nulėmtų žalingų efektų, tokių kaip FL gesimo trukmių pailgėjimas, spektro išplatėjimas ir pan.



2 pav. Tirtų bandinių fluorescencijos kinetikos

Tirti legiruoti kristalai taip pat pasižymėjo aukštu morfologiniu- bei foto-stabilumu, o gaminant plonus polikristalinius sluoksnius pavyko išlaikyti nepakitusius TADF parametrus. Todėl šiuo metu vystoma technologija panaudoti tokio pobūdžio polikristalinį emisinį sluoksnį OLED struktūroje. Tikimasi, kad tai leistų realizuoti ilgą prietaisų veikimo trukmę pasižyminčius TADF OLED, kadangi be aptartų savybių, įprastai molekuliniai kristalai taip pat siejami su geromis krūvininkų transporto savybėmis.

Reikšminiai žodžiai: fluorescencija, TADF, OLED, izoftalonitrilas.

Ambidentinių anijonų aktyvumo tyrimas kvantinės chemijos metodais 1,4- ir 1,5-benzodiazepinonuose

Quantum Chemical study on the Ambident Activity of Anions in 1,4- and 1,5-Benzodiazepinones

Aušra Vektarienė¹, Regina Jančienė², Mantas Jonušis², Dalia Vektarytė³, Simona Jonušienė²

¹Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, 3 Saulėtekio g., Vilnius LT-10257,

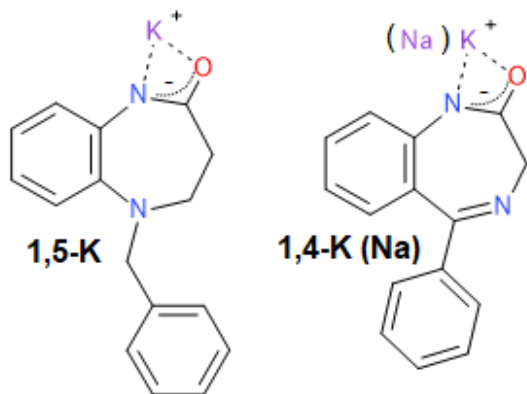
²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas, 12A Mokslininkų g., Vilnius LT-08412,

³Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, 7 Saulėtekio g., Vilnius LT-10257,

ausra.vektariene@tfai.vu.lt

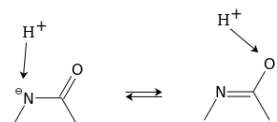
Benzodiazepinai (diazepamas, temazepamas, nitrazepamas) yra bene dažniausiai pasaulyje vartojami psichotropiniai vaistai nerimo slopinimui, panikos atakų ir kitų psichikos sutrikimų gydymui [1].

Šios medžiagos yra įdomios ne tik medicininio, bet ir teorinio požiūriu. Yra pastebėta, kad net nedideli benzodiazepinonų (BD) struktūriniai skirtumai lemia reikšmingus cheminio reaktiškumo pokyčius [2], o naujai gautiems, modifikuotiems BD produktams būdingas skirtingas fiziologinis aktyvumas [3]. Pavyzdžiui, vykdant imidazo-BD sintezę vienodomis sąlygomis, reakcijos eiga ir galutinių produktų sandara 1,4- ir 1,5-BD labai skiriasi [4]. 1,4-BD atveju reakcijos produktas yra imidazo[1,5-a]-BD, tuo tarpu 1,5-BD reakcijos metu 1,5-N heterociklas skyla susidarant oksazolo dariniui. Viena iš priežasčių, lemiančių sunkiai nuspėjamus pokyčius BD molekulėse yra nukleofilinių ambidentinių amidų anijonų **1,4-K** ir **1,5-K(Na)** aktyvavimas reakcijos metu (1. pav).



1 pav. **1,5-K** ir **1,4-K(Na)** benzodiazepinonai su aktyvuotu ambidentiniu centru. K⁺, Na⁺ - kalio, natrio katijonai, N, O⁻, azoto ir deguonies atomai

Amidinis ambidentinis nukleofilinis centras molekulėje turi du alternatyvius elektrono donorinius centrus, kurie geba sudaryti atskirus ryšius su elektrofilais kaip pavaizduota 2 pav. Dėl netolygiai delokalizuoto krūvio ant neekvivalentiškų azoto ir deguonies atomų gali vykti dvi skirtingos reakcijos su elektrofilais.



Pav 2 Amidinio -N-C(=O) ambidentinio centro rezonasinės struktūros, H⁺- protonas arba elektrofilas.

Pagrindinis darbo tikslas buvo paaiškinti ambidentinio anijoninio amido [-N-C(=O)]⁻ regioselektyvų veikimą **1,4-K** ir **1,5-K(Na)** BD.

Šiame darbe skaičiavimams pasirinkome 1 pav pavaizduotas molekules: ambidentinius anijoninius 1,4-BD kompleksus **1,4-K(Na)** koordinuotus su Na⁺ ir K⁺ katijonais, taip pat 1,5-BD, ir K⁺ kompleksą **1,5-K**. Molekulių pusiausvyros geometrijos buvo optimizuojamos B3LYP 311G+d,p metodu. Norint suprasti mūsų tikslinių kompleksų elektroninės struktūros pokyčius, molekulės buvo analizuojamos NBO (*angl. Natural bond orbital*) metodu. Apskaičiuoti Vibergo ryšio stipriai, daliniai krūviai ant atomų. Naudojant pusempirį PM3 metodą apskaičiuoti *p_z* AO elektronų populiacijos tankiai HOMO (aukščiausia užimta molekulinė orbitalė) orbitaleje.

Parodyta, kad aukštas N atomo nukleofiliškumo lygis 1,5-BD ambidentiniame centre lemia reakcijos eigą, kontroliuojamą padidinto *p_z* elektronų populiacijos tankio ant N atomo HOMO, o 1,4-benzodiazepino žiedo persitvarkymo vyksmą lemia didžiausia neigiamo krūvio lokalizacija ant deguonies atomo. Remiantis skaičiavimo rezultatais, buvo sumodeliuoti labiausiai tikėtini reakcijos mechanizmai.

Reikšminiai žodžiai: benzodiazepinonai, ambidentinis, elektroninė sandara

Literatūra

- [1] V. Adomaitienė, *Benzodiazepinai ir į juos panašūs preparatai psichikos sutrikimų gydymui* (Kaunas, 2021).
- [2] R. Janciene, A.Vektariene, Z. Stumbreviciute, L. Kosychova, K. Konstantinavicius, B. D. Puodziunaite, *Monatsh. Chem.* **134**, 1629 (2003).
- [3] T. D Revot, G. Li, J. M. Cook, E. Sibille, *ACS Chem.Neurosci.* **10**, 2088 (2019).
- [4] M. Jonušis, A. Vektarienė, G. Mikulskienė, S. Jonušienė, D. Vektarytė, R. Jančienė, *Chem. Heterocycl. Compd.* **59** 284 (2023).

1,1-dichlorgermaciklopentano konformacinis tyrimas virpesinės spektroskopijos ir teoriniais metodais

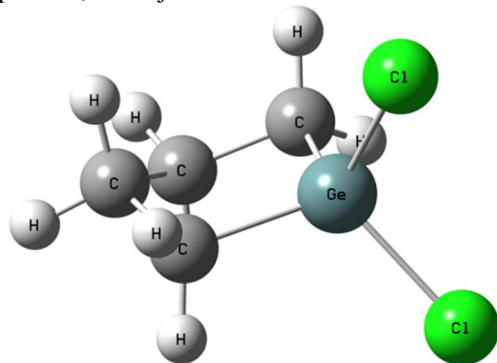
Conformational study of 1,1-dichlorgermacyclopentane by means of vibrational spectroscopy and theoretical calculations

Tautvydas Taraškevičius¹, Jogilė Mačytė¹, Justinas Čeponkus¹, Gamil A. Guirgis², Valdas Šablinskas¹
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
²Čarlstono koledžas, Chemijos ir biochemijos departamentas, SC 29424 Čarlstonas, JAV
tautvydas.taraskevicius@ff.stud.vu.lt

Konformacinė analizė yra populiarus metodas organinių medžiagų struktūriniuose tyrimuose. Konformeri gali skirtis savo fizikinėmis savybėmis, reakingumu ir t.t., taigi norint įvertinti molekules elgseną reikalinga išsami konformacinė analizė [1]. Šio darbo tikslas yra naujai susintetintos 1,1-dichlorgermaciklopentano molekules struktūros ir galimų stabilių konformerų nustatymas, naudojantis virpesine spektroskopija ir tankio funkcionalo (DFT) skaičiavimais.

Molekules struktūros analizė buvo atliekama sugretinus molekulių eksperimentinius virpesinius spektrus su DFT skaičiavimų rezultatais. Tyrimų pradžioje buvo užregistruoti skysto bandinio pažeisto visišką vidaus atspindžio (ATR) infraraudonosios spinduliuotės spektrai. Siekiant atlikti išsamesnę spektrinių juostų identifikaciją taip pat buvo registruojami Ramano sklaidos spektrai, naudojant Furjė ir difrakcinį spektrometrus. Virpesių simetrijos nustatymui buvo užregistruoti poliarizaciniai Ramano sklaidos spektrai.

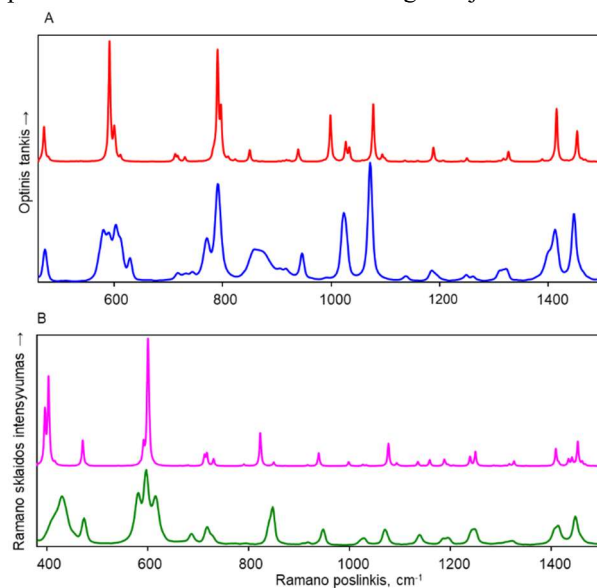
Ieškant galimų konformerų arti esančias spektrines juostas taip pat buvo užregistruoti matricinės izoliacijos FTIR sugerties spektrai. Šiuo metodu užregistruotos spektrinės juostos yra siauros, todėl arti esančios skirtingų konformerų juostos nepersiklos. duomenys interpretuoti, naudojant DFT skaičiavimus.



1 pav. Teoriškai apskaičiuota 1,1-dichlorgermaciklopentano voko struktūra, naudojant *B3LYP/cc-pVTZ*.

DFT skaičiavimai buvo atlikti naudojantis *B3LYP/cc-pVTZ* funkcionalą ir įvertinant virpesių anharmoniskumą. Panaudojant skaičiavimų ir eksperimentinius rezultatus nustatyta, kad 1,1-dichlorgermaciklopentanas turi vieną stabilią

konformaciją (žr. 1 pav.), kuriai būdinga molekules penkianario žiedo voko formos konfigūracija.



2 pav. (A) 1,1-dichlorgermaciklopentano ATR-FTIR sugerties spektras (mėlynas) kartu su teoriškai apskaičiuoto konformero IR spektru (raudonas); (B) 1,1-dichlorgermaciklopentano FT-Ramano spektras (žalias) kartu su teoriškai apskaičiuoto konformero Ramano sklaidos sklaidos spektru (rožinis).

Eksperimentiniai ir teoriniai spektrai pateikti 2 pav. Teoriškai nustatyti virpesinių spektrinių juostų dažniai gerai koreliuoja su eksperimentiškai gautais spektrinių juostų dažniais. Taigi galima teigti, kad apskaičiuota struktūra yra stebima skystos fazės bandinyje. Eksperimentinės spektrinės juostos buvo priskirtos virpesinėms modoms remiantis skaičiavimų rezultatais.

Spektriniai eksperimentai dujų fazėje ir su N₂ matricioje izoliuotomis tiriamomis molekulėmis parodė, kad dujinėje būsenoje molekulė yra nestabili ir greitai suskyla.

Skaičiavimai atlikti Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto superkompiuterio "VU HPC" resursais.

Reikšminiai žodžiai: konformacinė analizė, virpesinė spektroskopija, ciklopentanas.

Literatūra

[1] Dragojlovic, V. Conformational analysis of cycloalkanes. ChemTexts 1, 14 (2015). <https://doi.org/10.1007/s40828-015-0014-0>

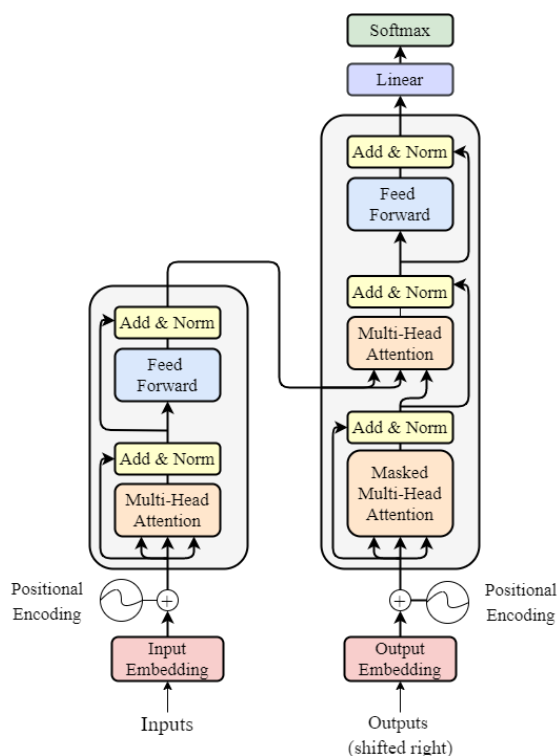
Transformatorių neuroninių tinklų taikymas DFT molekulių struktūrų optimizavimo skaičiavimams spartinti

Using transformer neural networks to speed up molecular structure optimization at DFT level

Rokas Garbačas, Stepas Toliautas

Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius
rokas.garbacauskas@ff.stud.vu.lt

Transformatorių neuroniniai tinklai (1 pav.) yra santykinai nauja inovacija mašininio mokymo srityje [1], kuri leido sukurti pastaruoju metu labai išpopuliarėjusius didelius kalbos modelius (ChatGPT, LLaMA ir kt.) bei pasiekti puikius rezultatus vertimo ir vaizdų generavimo sferose. Ta pati architektūra su tam tikromis modifikacijomis leido pasiekti stulbinančius rezultatus prognozuojant baltymų struktūrą iš amino rūgščių sekos [2]. Šių tinklų pagrindinė stiprybė yra duomenų užkodavimas juos aprašančiais vektoriais bei dėmesio mechanizmas, kuris leidžia modeliui atpažinti net labai subtilias koreliacijas tarp duomenų.



1 pav. Transformatorių neuroninio tinklo architektūra, pasiūlyta [1] straipsnyje.

Šio tipo tinklai puikiai tinka modeliuoti vienmates, t. y. išrikuojamas, sistemas. Efektyvus jų taikymas duomenims daugiamatėje erdvėje yra aktyviai nagrinėjamas klausimas. Molekulių struktūra dažniausiai optimizuojama trimatėje erdvėje, tad efektyvus šios architektūros pritaikymas molekulių struktūrai modeliuoti yra netrivialus uždavinys. Taip pat atviras klausimas yra ir cheminės informacijos

kodavimas vektoriniuose deskriptoriuose bei dėmesio mechanizme.

Įvairūs neuroniniai tinklai jau naudojami kvantinės chemijos skaičiavimuose ir leidžia atlikti molekulių struktūrų optimizaciją, skaičiuoti jėgas bei dipolinius momentus ir kt. su vartotojų lygio įranga žymiai sparčiau nei atliekant DFT skaičiavimus superkompiuterių mazguose [3], [4], [5]. Pagrindiniai neuronų tinklais grįstų metodų trūkumai lyginant su DFT skaičiavimais yra kiek prastesnės gautos energijos vertės, „juodosios dėžės“ veikimo pobūdis bei santykinai prastas duomenų generavimas cheminiams junginiams, nepatenkantiems į mokymo rinkinį.

Su transformatorių neuroninių tinklų architektūra mes norime paspartinti DFT skaičiavimus ir įvertinti, ar pavyksta gauti DFT lygio energijos/ teorinių spektrų tikslumą, skaičiavimams sunaudojant tik dalį įprastai reikalingų resursų. Verta paminėti, jog plečiantis atviros prieigos duomenų bazėse esančių kvantinės chemijos duomenų kiekiui bei įvairovei, automatiškai mažėja ir apmokytam modeliui neatpažįstamų junginių kiekis.

Reikšminiai žodžiai: DFT, molekulių struktūros optimizacija, mašininis mokymas, transformatorių neuroniniai tinklai

Literatūra

- [1] A. Vaswani et al., *Attention is All you Need*, Advances in Neural Information Processing Systems (2017).
- [2] J. Jumper et al., *Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold*, Nature (2021).
- [3] O. T. Unke and M. Meuwly., *PhysNet: A Neural Network for Predicting Energies, Forces, Dipole Moments, and Partial Charges*, Journal of Chemical Physics and Computation (2019).
- [4] J. S. Smith, O. Isayev, and A. E. Roitberg. *ANI-1: an extensible neural network potential with DFT accuracy at force field computational cost*, Chemical Science (2017).
- [5] K. Yao, J. E. Herr, D. W. Toth, R. Mckintyre, and J. Parkhill. *The TensorMol-0.1 model chemistry: a neural network augmented with long-range physics*, Chemical Science (2018).

Naftos, kuro ir alyvos tyrimas Furjė transformacijos infraraudine spektroskopija terahercų srityje

Investigation of crude oil, fuel and technical oils using Fourier transform infrared spectroscopy in terahertz range

Mindaugas Karaliūnas^{1,2}, Neda Mažeikytė^{1,2}, Patricija Šleiniūtė^{1,2}, Ignas Pocius^{1,2}, Aikaterini-Maria Gkouzi^{1,2}, Barbora Škėlaitė^{1,2}, Austėja Bareikytė^{1,2}, Antanas Butkus^{1,2}, Karolis Samušas^{1,2}, Christian Louie Malabanan Cornista³, Irmantas Kašalynas¹, Renata Butkutė^{1,2}, Carlito Jr. Salonga Ponceca^{2,3,4},

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

²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

³Department of Physics, School of Science and Engineering, Ateneo De Manila University, 1004 Manila, Philippines

⁴Department of Mathematics and Natural Sciences, Gulf University for Science and Technology, Mishref, Kuwait
mindaugas.karaliunas@ftmc.lt

Naftos gavyba, nors ir kritikuojama globalinio atšilimo kontekste, išlieka didelė, lyginant su praeitais dešimtmečiais, ir auganti [1]. Atsinaujinantys energijos ir medžiagų šaltiniai keičia naftos produktus, tačiau naftos pramonė artimiausiu laiku niekur nedings. Juolab, išlieka klausimas, ar atsinaujinantys šaltiniai gali patenkinti visus žmonijos resursų poreikius. Šio tyrimo tikslas yra rasti ir pasiūlyti naujus būdus naftos ir jos produktų nustatymui, atpažinimui, kokybės kontrolei ir priežiūrai, pasitelkiant naujas optoelektronikos priemones, kad naftos produktų naudojimas taptų saugesnis aplinkai ir našesnis žmonėms. Nors nafta ir jos produktai iš esmės yra angliavandenilių molekulės, tačiau angliavandenilių gausa ir molekulių ilgių įvairovė daro didelę įtaką optinėms medžiagų savybėms. Anksčiau buvo nustatyta jautri lūžio rodiklio ir sugerties koeficiento priklausomybė nuo angliavandenilio molekulių ilgio, o tokių jungčių, kaip esteriai, būvimas iš esmės keičia optinių savybių priklausomybės tendencijas [2]. Turint tai omeny, žaliavinė nafta yra sudėtingiausia tyrimams terpė naftos produktų klasėje, nes jos cheminė sudėtis yra ypatingai turtinga ir įvairi. Šiame darbe pristatomi naftos, kuro ir alyvos spektrai, išmatuoti naudojant Furjė transformacijos infraraudinę spektroskopiją, siekiant nustatyti unikalius spektrinius bruožus, kuriuos būtų galima panaudoti kompleksiniuose naftos ir naftos produktų charakterizavimo tyrimuose. Darbas atliktas įtraukiant Vilniaus universiteto Šviesos technologijų studijų programos studentus per Optoelektronikos kurso mokslinius projektus bendradarbiaujant su fizikos studentais iš *Ateneo De Manila* universiteto Filipinuose.

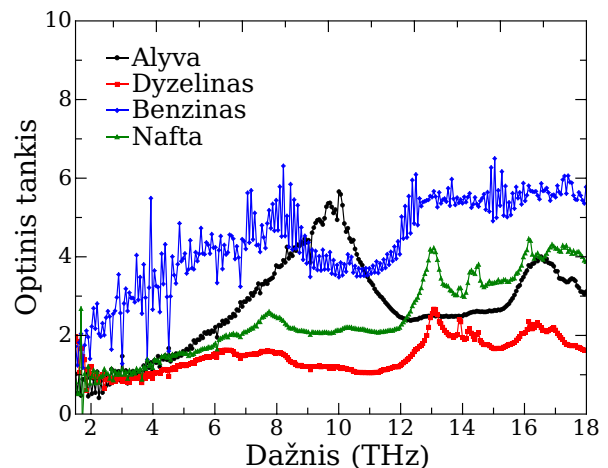
Tyrimui buvo paruošti 50 naftos mėginių iš skirtingų naftos telkinių Kuveite. 5 skirtingo klampumo motoro alyvos buvo įsigytos iš vietos tiekėjų, kaip ir 2 rūšių dyzeliniai iš 2 skirtingų tiekėjų, bei 1 rūšies benzinas iš 2 skirtingų tiekėjų. Buvo išbandyti bandinių tepimo pluonu sluoksniu and plokštelės (*doctor blade*) metodas ir naftos užsegamuose maišeluose matavimas nustatyto storio laikiklyje su apertūra terahercų (THz) pluoštui. Kuro tyrimui buvo pasirinktas pastarasis metodas. Kuro tyrime grynas kuras, tiek benzinas, tiek dyzelinas, buvo maišomi su nustatytu kiekiu teršalų, dažnai aptinkamų naftos produktuose, tai yra vanduo, metanolis, izopropanolis ir

siera. Į kiekvienos rūšies kurą buvo atskirai įmaišyta nuo 5% iki 0,5% teršalų. Koncentracija buvo matuojama pagal turį išskyrus sieros atveju, kurios kiekis buvo nustatytas pagal masę. Spektrai buvo matuojami FTIR spektrometru Nicolet 8700 su tolimajai infraraudonajai ir THz spektrinei sričiai skirta konfigūracija.

1 pav. pavaizduoti bandinių grupėms charakteringi spektrai, t.y. motoro alyvos, gryno dyzelino, gryno benzino ir iškastinės naftos. Paveiksle atidėti optinio tankio spektrai:

$$A = -\log_{10} T, \quad (1)$$

kur T yra pralaidumo koeficientas. Pranešime yra pristatomos tyrimo metu nustatytos spektrinių charakteristikų tendencijos.



1 pav. Naftos ir jos produktų, alyvos, dyzelino ir benzino, spektrai išmatuoti Furjė transformacijos infraraudine spektroskopija 1,5 – 18 THz ruože.

Reikšminiai žodžiai: teraherciai, spektroskopija, nafta, kuras, alyva, optinis tankis, sugertis

Literatūra

- [1] IEA, World crude oil production by region, 1971-2020, IEA, Paris <https://www.iea.org/data-and-statistics/charts/world-crude-oil-production-by-region-1971-2020>, IEA.
- [2] M. Karaliūnas *et al.*, Sci. Rep. **8**, 18025 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-36151-3>.

Dvigubo mikrobangų rezonatoriaus modeliavimas, gamyba bei taikymas EPR spektroskopijoje

Design, fabrication and application of double microwave resonator in EPR spectroscopy

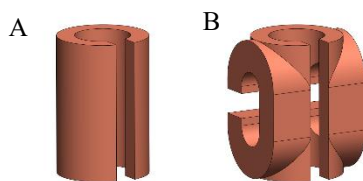
Ignas Pocius¹, Vidmantas Kalendra¹, Jūras Banys¹, Mantas Šimėnas¹
¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
 ignas.pocius@ff.stud.vu.lt

Elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) spektroskopija yra plačiai naudojamas įrankis tirti paramagnetiniams centrams (nesuporuotų elektronų sukinių sistemoms) įvairiose medžiagose, nuo kietųjų kūnų iki baltymų. Šis metodas paremtas kvantine elektrono sukinių prigimtimi, dėl kurios sukinių energijos lygmenys suskyla patalpinus jį į magnetinį lauką. EPR spektroskopijos esmė yra šuolių tarp šių lygmenų sužadimas bei sugerties detektavimas naudojant mikrobangų rezonatorius.

EPR spektroskopija turi gana mažą jautrumą, o tai dažnai apsunkina tiriamųjų medžiagų pasirinkimą. Tad ieškoma naujo tipo įvairių dizainų bei dydžių EPR rezonatorių, kurie galėtų padidinti šios metodikos jautrumą.

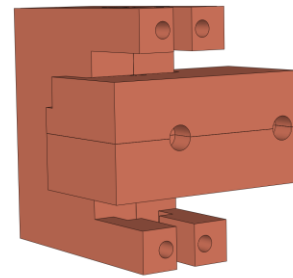
Šiame darbe buvo sumodeliuotas bei pagamintas dviejų ortogonalinių mikrobangų modų rezonatorius. Šio tipo rezonatoriai turi statmenus mikrobangų magnetinius laukus. Dvigubuose mikrobangų rezonatoriuose viena iš modų sužadina bandinį, o kita nuskaityti sukinių EPR signalą. Ši rezonatoriaus geometrija leidžia izoliuoti šiluminį mikrobangų triukšmą bei išvengti rezonatoriaus „skambėjimo“ (angl. „ringing“) efekto [1,2]. Šios priežastys leidžia itin ženkliai padidinti EPR matavimų jautrumą, o tai atveria kelią naujų iki šiol nestudijuotų sukinių sistemų tyrimams.

Tirtas mikrobangų rezonatorius yra kilpos-tarpelio tipo. Šio kilpos-tarpelio tipo vienos bei dviejų modų mikrobangų rezonatoriai yra pavaizduoti 1 pav. [3].



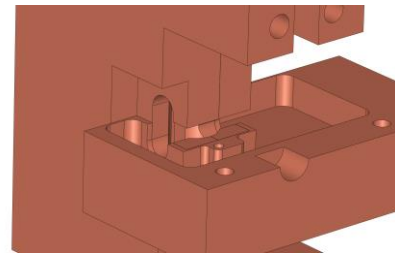
1 pav. a) Vienos bei b) dviejų modų kilpos-tarpelio tipo mikrobangų rezonatoriai.

Sukurtas rezonatorius tinkamam 9-10 GHz dažniui naudojant komercinį EPR spektrometrą (Bruker Elexsys E580). Kuriant rezonatoriaus geometriją taip pat buvo kreipiamas dėmesys į dvigubo mikrobangų rezonatoriaus matmenis, ryšio linijų pravedimą, bei bandinio vamzdelio dydį. Sukurtas dizainas pavaizduotas 2 pav.



2 pav. Kilpos-tarpelis dviejų modų rezonatoriaus geometrija.

Sukurtos geometrijos vidinės detalės pavaizduotos 3 pav. Šiame paveikslėlyje matoma pirma rezonansinė sritis bei viena iš dviejų antrosios rezonansinės srities dalių.



3 pav. Kilpos-tarpelis dviejų modų rezonatoriaus vidinė geometrija, kur matomos rezonatoriaus rezonansinės sritys.

Pranešime bus pristatyti šio rezonatoriaus modeliavimas su CST Studio mikrobangų paketu bei pirmosios versijos gamyba bei taikymas.

Reikšminiai žodžiai: Elektronų paramagnetinis rezonansas, sukinių, rezonatorius.

Literatūra

- [1] G. A. Rinard, R. W. Quine, B. T. Ghim, S. S. Eaton, and G. R. Eaton, *Easily Tunable Crossed-Loop (Bimodal) EPR Resonator* (1996).
- [2] C. Mailer, H. Thomann, B. H. Robinson, and L. R. Dalton, *Review of Scientific Instruments* **51**, 1714 (1980).
- [3] G. A. Rinard, R. W. Quine, J. McPeak, L. Buchanan, S. S. Eaton, and G. R. Eaton, *Appl Magn Reson* **48**, 1219 (2017).

Kelių kūnų sistemų ryšio energijos skaičiavimai algebriniame branduolio modelyje

Calculation of Binding Energies in Few-body Systems in Algebraic Nuclear Model

Augustinas Stepsys^{1,2}, Saulius Mickevičius¹, Darius Germanas², Ramutis Kazys Kalinauskas¹

¹Vytauto Didžiojo universitetas, K. Donelaičio 58, LT-44248, Kaunas, Lithuania

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

augustinas.stepsys@vdu.lt

Atomo branduolio parametrų skaičiavimui ab-initio metodu yra sėkmingai taikomas bešerdis sluoksnių modelis [1]. Surištą atomo branduolio sistemą aprašantys būsenos vektoriai turi būti ne tik antisimetriški, bet ir transliaciškai invariantiški. Šios dvi sąlygos yra labai svarbios, nes atomo branduolį sudarantys nukleonai yra fermionai, o pati sistema nepriklauso nuo išorinių laukų. Taip pat, reikia pažymėti, kad tarpnukleoninė sąveika priklauso tik nuo santykinų koordinatų.

Transliacinio invariantiškumo problema yra lengvai sprendžiama pereinant nuo viendalelinių sistemos koordinatų prie vidinių. Viena iš galimų tokių koordinatų sistemų yra Jacobi koordinatų sistema. Atlikus ortogonalų koordinatų pakeitimo transformaciją yra pašalinamas sistemos masių centro judėjimas ir dirbama tik su santykinio judėjimo koordinatėmis.

Šis metodas yra pakankamai populiarus tirti s-luoksniu branduoliams. Jakobi koordinatų transformacijų atvaizdai yra lengvai konstruojami harmoninio osciliatoriaus (HO) bazėje [2].

Būsenos vektorių antisimetriją galima užtikrinti keliais metodais. Tradicinis Sleiterio determinantų metodas nėra tinkamas vidinių koordinatų sistemose, nes simetrinės grupės dvidalelinių perstatymų operatorių matricinių elementų išraiškų kiekis tampa pernelyg didelis. Todėl dažniausiai yra stengiamasi išnaudoti tinkamos simetrinės grupės algebros savybes.

Algebriniame modelyje antisimetrinis būsenos vektorių poerdvis yra randamas panaudojant vadinamuosius Λ operatorius [3]. Šie operatoriai gali būti suprantami, kaip simetrinės grupės algebros generatoriai. Jų išraiškos susideda iš dvidalelinių perstatymo operatorių sumų. Diagonalizuojant atitinkamą Λ operatorių yra randami Jungo schemomis charakterizuojami neredukuotiniai poerdviai, o vienas iš šių poerdvių yra antisimetrinis. Λ operatoriaus tikrinių vektorių pagrindu yra konstruojami kilminiai koeficientai pagal simetrinės grupės grandinę:

$$S_N \supset S_{N_1} \times S_{N_2} , \quad (1)$$

kur N yra sistemos nukleonų kiekis, N_1 pirmo klasterio, o N_2 antro klasterio nukleonų kiekis. Būsenos vektoriai yra konstruojami panaudojant dvinarių klasterių formalizmą, geru kvantiniu skaičiumi laikant pilnutinį judesio kiekio momentą J . Taip pat, modelyje yra panaudojamas izosukinio formalizmas, t. y. protonas ir neutronas yra laikomi tapatingomis dalelėmis. J

schemoje yra gaunami daug kompaktiškesni ortogonalų transformacijų atvaizdai, tačiau reikiamų transformacijų konstravimas reikalauja ypač kruopštaus darbo su judesio kiekio momento perrišimo koeficientais, išreiškiamais per $6j$ ir $9j$ simbolius.

Mes pritaikėme algebrinį modelį trijų ir keturių kūnų sistemoms ($3H$, $3He$ ir $4He$) ir suskaičiavome ryšio energiją panaudojant fenomenologines sąveikas (Argonne v18 [4], Reid93 [5]) ir naujas sąveikas, sukurtas chiralinės perturbacijų teorijos pagrindu (Idaho N3LO [6]). Gauti rezultatai leidžia palyginti ryšio energijos konvergavimą, patikrinti algebrinio modelio galimybes sudėtingesnių sistemų parametrų skaičiavimui.

Reikšminiai žodžiai: branduolio fizika, matematinė fizika, ab-initio skaičiavimai.

Literatūra

- [1] A. Idini et al. Phys. Rev. Lett. 123, 092501 (2019)
- [2] S. Liebig et al. Eur. Phys. J. A 52, 103 (2016)
- [3] S. Mickevičius et al. Phys. Atom. Nucl. 81, 899 (2018)
- [4] R. B. Wiringa et al. Phys. Rev. C 51, 38-51 (1995)
- [5] V. G. J. Stoks et al. Phys. Rev. C 49, 2950 (1994)
- [6] S. K. Saha et al. Phys. Rev. C 107, 034002 (2023)

Dielektrinių lazerinių greitintuvų modeliavimas pasirinktiems parametrams

Modeling dielectric laser accelerators for chosen parameters

Janina Grinevičiūtė¹, Artūras Plukis¹¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
janina.grineviciute@ftmc.lt

Tiesiniuose greitintuvuose pasiekiamas maksimalus greitinimo gradientas gali būti iki 100 MeV/m. Dielektrinių lazerinių greitintuvų idėja yra itin patraukli dėl potencialaus GV/m greitinimo gradiento ir mažo greitintuvo dydžio. Eksperimentuose maksimalūs pasiekti gradientai buvo 370 MeV/m nereliatyvistiniams elektronams [1] ir 1.8 GV/m reliatyvistiniams elektronams [2].

Aukštos įtampos elektronas judėdamas metalinės gardelės paviršiumi sukelia spinduliavimą jei tenkinama sinchroniškumo sąlyga tarp bangos ir elektrono (Smith-Purcell efektas). Atvirkštinis efektas yra pasiekiamas, kai tenkinama ta pati sąlyga tarp elektronų ir krintančios bangos. Elektromagnetinė banga, kurios dažnis $f = c/\lambda$, sužadina erdvinę harmonikas, kurios sklinda gardelių paviršiumi $v_{ph} = f\lambda_p/n$ greičiu. Čia λ_p yra gardelės periodas ir n yra harmonikos skaičius. n -toji harmonika yra sinchroniška su elektronais, kurių greitis yra $v_e = \beta c = v_{ph}$, taigi sinchroniškumo sąlyga yra $\lambda_p = \lambda\beta n$. Nereliatyvistiniams elektronams, atsižvelgiant į elektronų greičio padidėjimą, gardelės periodas turėtų būti atitinkamai koreguojamas.

Priklausomai nuo elektrono padėties/fazės lauko atžvilgiu, elektronas gali būti greitinamas, lėtinamas arba keisti kryptį. Asinchroninių bangų poveikis elektronams per laiką susividurkina į nulį.

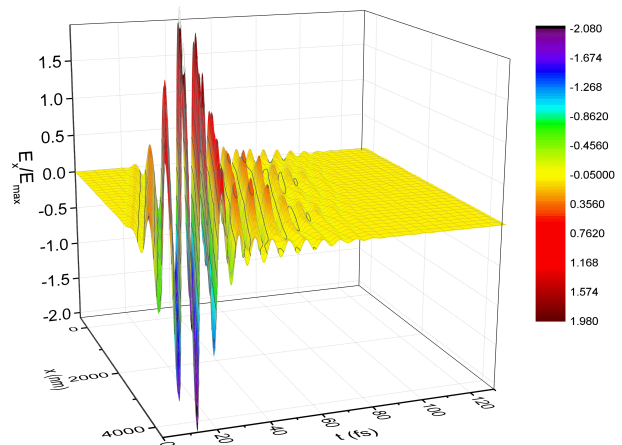
Kai gardelė yra viapusė, nereliatyvistinis elektronas yra greitinamas tik atvirkštinio Smith-Purcell efekto dėka, tačiau, kai gardelė yra dvipusė, elektrono greitinimas yra didesnis dėl konstruktyvios bangų interferencijos. Norint sumažinti elektronų nuokrypį vakuume kanale, naudojamas simetriškas apšvietimas lazeriu arba Bragg reflektoriai.

Šio darbo tikslas yra ištirti elektronų greitinimo priklausomybę nuo įvairių gardelės struktūros parametru. Modeliavime pasirinkti dielektrikai yra silicis ir silicio dioksidas. Skaičiavimuose krintančios plokščios bangos ilgis yra 2000 nm. Gardelės periodas 880 nm yra parinktas 50 keV elektronui ($\beta = 0.44$, $v = 1.32 \cdot 10^8$ m/s), kad atitektų sinchroniškumo sąlyga. Dvipusė gardelė yra apšviečiama simetriškai. Sąveikos atstumas yra 4.84 μm .

Maksvelo lygtys sprendžiamos baigtinių skirtumų laiko skalėje (FDTD) metodu. Maksimalus greitinimo

gradientas yra vidutinis išilginis elektrinis laukas, kuris veikia vieną elektroną vieną gardelės struktūros periodą.

Preliminarūs rezultatai rodo maksimalų greitinimo gradientą $0.17 \cdot E_{\text{max}}$ kvarco gardelės struktūroje ir $0.42 \cdot E_{\text{max}}$ silikono gardelės struktūroje. Abiems dielektrikams greitinimo gradientas yra didesnis, jei elektronų vakuume kanalas yra mažesnis. Kvarco atveju maksimalus gradientas pasiekiamas, kai gardelės storis yra lygus tarpui tarp gardelių, t. y. $0.5\lambda_p = 440$ nm, o silikono atveju, kai gardelės storis išilgine kryptimi yra 500 nm, o tarpas tarp gardelių yra 380 nm. Išilginis elektrinis laukas kvarco atveju yra parodytas Pav. 1.



1 pav. Išilginis elektrinis laukas E_x/E_{max} kvarco gardelės struktūroje, matomas 50 keV elektrono.

Reikšminiai žodžiai: dielektrinis lazerinis greitintuvas, nereliatyvistiniai elektronai.

Literatūra

- [1] Kenneth J. Leedle, Andrew Ceballos, Huiyang Deng, Olav Solgaard, R. Fabian Pease, Robert L. Byer, and James S. Harris, Opt. Lett. 40, 4344-4347 (2015)
- [2] Cesar, D., Custodio, S., Maxson, J. et al. Commun Phys 1, 46 (2018).

Jonizacijos elektronais N^{2+} jone tyrimas

Study of electron-impact ionization for N^{2+}

Valdas Jonauskas, Aušra Kynienė, Šarūnas Masys

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

valdas.jonauskas@tfai.vu.lt

Ieškant alternatyvių energijos šaltinių didelis dėmesys yra skiriamas valdomai termobranduolinei sintezei. Spektro linijų modeliavimas svarbus vertinant plazmoje vykstančius procesus. Spektro linijų intensyvumas stipriai priklauso nuo jonų pasiskirstymo pagal jonizacijos laipsnius. Jonizacija elektronų smūgiais bei rekombinacija lemia krūvio pasiskirstymą termobranduolinėje plazmoje. Lengvieji cheminiai elementai yra naudojami termobranduolinės sintezės reaktoriuose siekiant mažinti plazmos šilumos poveikį vidinėms reaktorių sienelėms. Azotas yra vienas iš cheminių elementų, kurį planuojama naudoti apsaugant reaktorių sienes nuo plazmos dalelių ardančio poveikio. Todėl yra svarbu įvertinti jonizacijos elektronais skerspjūvius azoto jonams.

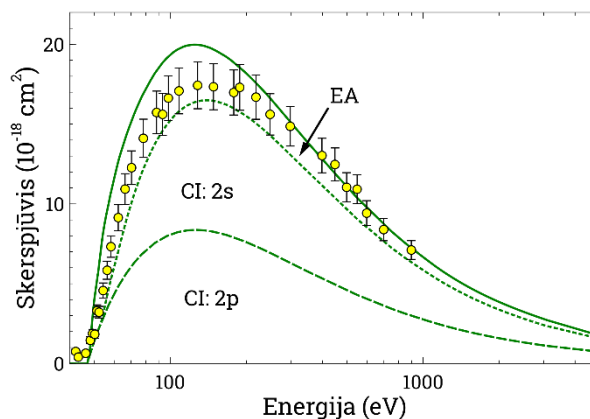
Darbe nagrinėjame N^{2+} jono viengubą jonizaciją elektronais pagrindinės $2s^2 2p$ konfigūracijos lygmenims. Tyrimas taip pat įtraukia ilgai gyvuojančius N^{2+} jono $2s 2p^2$ konfigūracijos lygmenis. Vienguba jonizacija nagrinėjama kaip tiesioginės ir netiesioginės jonizacijos elektronais suma. Tiesioginė jonizacija reiškia, kad elektronas yra iš karto pašalinamas iš atominės sistemos. Netiesioginė jonizacija tirta kaip sužadimas su po to sekančia autojonizacija. Pagrindinės konfigūracijos atveju nagrinėti sužadimai iš $2s$ pasluoksnio, o sužadintos konfigūracijos atveju įtraukti dar sužadimai iš $2p$ pasluoksnio. Sužadimai nagrinėjami į sluoksnius su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi $n \leq 20$. Nustatyta, kad sužadimai į sluoksnius su didesniais pagrindiniais kvantiniais skaičiais neduoda esminio indėlio. Darbe išnagrinėjome sužadimus į visus orbitinius kvantinius skaičius iki $l = 5$. Parodyta, kad sužadimai į sluoksnius su orbitiniais kvantiniais skaičiais $l = 0, 2$ vaidina svarbiausią vaidmenį netiesioginės jonizacijos atveju. Sužadimo-autojonizacijos proceso atveju įvertinta ir radiacinio gesinimo įtaka, nagrinėjant sužadintų lygmenų suirimą vykstant elektriniams dipoliniams šuoliams. Tiesioginės jonizacijos tyrimas apima N^{2+} jono $2s$ ir $2p$ pasluoksnius.

Energijos lygmenys, elektrinių dipolinių šuolių ir Ožė šuolių tikimybės, bei sužadimo elektronais ir jonizacijos skerspjūviai buvo tirti naudojant Flexible Atomic Code programą [1], kurioje naudojamas Dirako-Foko-Slaterio artinys. Skerspjūviai buvo įvertinti iškraipytųjų bangų artinyje.

Teorinių viengubos jonizacijos elektronais skerspjūvių verčių palyginimas su eksperimentinėmis vertėmis [2] pateiktas 1 paveiksle. Matyti, kad didesnėms elektronų energijoms (virš 200 eV) sutapimas su eksperimentiniais duomenimis yra paklaidų ribose.

Tačiau jonizacijos skerspjūvių viršūnėje teoriniai duomenys viršija eksperimentines vertes apie 5%. Teoriniai duomenys taip pat viršija eksperimentines vertes prie mažesnių energijų.

Pagrindinį indėlį į viengubą jonizaciją iš pagrindinės konfigūracijos lygmenų duoda tiesioginė jonizacija iš $2s$ ir $2p$ pasluoksnų. Tiesioginės jonizacijos iš jono $2s$ ir $2p$ pasluoksnų indėlis yra apytiksliai vienodas. Reikia pabrėžti, kad eksperimentiniuose duomenyse matomas ir indėlis žemiau jonizacijos slenksčio. Tai rodo, kad eksperimentiniame jonų pluoštelyje yra nenulinė ilgai gyvuojančių lygmenų, priklausančių $2s 2p^2$ konfigūracijai, užpilda. Gauti rezultatai leidžia įvertinti, kad ilgai gyvuojančių lygmenų užpilda yra mažesnė nei 10%.



1 pav. Jonizacijos elektronais skerspjūvių pagrindiniams N^{2+} jono lygmeniu palyginimas su eksperimentinėmis vertėmis [2]. CI – tiesioginė jonizacija iš atitinkamo pasluoksnio, EA – netiesioginė jonizacija.

Reikšminiai žodžiai: jonizacija, sužadimai, jonizacijos skerspjūviai.

Literatūra

- [1] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [2] K. L. Aitken, M. F. A. Harrison, and R. D. Rundel, J. Phys. B **4**, 1189 (1971).

Matavimo neapibrėžtumų koreliacijų įtaka matavimo ir modeliavimo rezultatų palyginimo kiekybiniam įvertinimui

Effect of uncertainty correlations to the quantitative comparison of measurement and simulation results

Andrius Juodagalvis ir Marijus Ambrozas

Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
andrius.juodagalvis@tfai.vu.lt

Eksperimentiniu būdu nustatytų dydžių pasiskirstymo artumą modeliavimu gautoms vertėms dažnai įvertiname skaičiuodami χ^2 vertę:

$$\chi^2 = (y_{\text{exp}} - y_{\text{mc}})^T (V_{\text{exp}} + V_{\text{mc}})^{-1} (y_{\text{exp}} - y_{\text{mc}}). \quad (1)$$

Čia y_{exp} ir y_{mc} yra nagrinėjamo dydžio išmatuotų ir sumodeliuotų centrinių verčių vektoriai, o V_{exp} ir V_{mc} yra to dydžio centrinių verčių neapibrėžtumų (kovariacijos) matricos. Jei skirtingą indeksą turinčios vertės nėra koreliuotos, neapibrėžtumų matricos yra diagonalios, ir χ^2 formulė gali būti užrašyta paprasčiau:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_{\text{exp},i} - y_{\text{mc},i})^2}{\sigma_{\text{exp},i}^2 + \sigma_{\text{mc},i}^2}, \quad (2)$$

Čia $\sigma_{a,i}$ yra $y_{a,i}$ neapibrėžtumas (paklaida).

CERN Didžiojo hadronų greitintuvo (LHC) pagalba vykdomi didelių energijų fizikos eksperimentai ATLAS ir CMS savo straipsniuose paskelbtus matavimo rezultatus pateikia ir elektronine forma HepData internetiniame portale [1], kuris specializuojasi paskelbtų eksperimento duomenų kaupime. Šio portalo naudą didina kita Durhamo universiteto iniciatyva – Rivet procedūrų rinkinys [2], kuris leidžia teoretikams perrinkti sumodeliuotus protonų susidūrimų įvykius išrenkant reikalingus fizikinius dydžius ir pritaikant eksperimente naudotus įvykių atrankos kriterijus (pvz., susidariusių dalelių skersinio impulso apatines ribas įvykio įskaitymui). Tiesa, dalį modeliavimui taikytų pataisų kartais tenka pritaikyti atskirai, jei jos nėra įdiegtos į Rivet aplinkai parengtą kompiuterinę procedūrą. Šios dvi Durhamo universiteto iniciatyvos – HepData ir Rivet – leidžia išsaugoti eksperimente gautą naudingą informaciją tolesniam naudojimui (pvz., vertinant teorinių modelių teisingumą), o didėjant saugojimo paslaugos populiarumui, pasidaro svarbi ir saugomos informacijos kokybė bei jos detalumas. Jei anksčiau buvo siekiama kokybiškai įvertinti teorijos ir eksperimento atitikimą, lyginant centrines vertes paklaidų ribose, tai didėjant Didžiojo hadronų greitintuvo eksperimentų matavimo tikslumui ir mažėjant išmatuotų dydžių statistiniam neapibrėžtumui, teoretikams ir fenomenologams svarbu galėti modeliuoti sisteminių paklaidų įtaką išmatuotų centrinių verčių tikėtinumui, todėl svarbu saugoti ne tik centrines vertes, bet ir jų neapibrėžtumų kovariacijas. Jei sisteminių paklaidų šaltinių yra daug, nėra paprasta pateikti tinkamą informaciją.

CERN LHC Elektrosilpnųjų procesų darbo grupės „Vektorinių bozonų ir džetų“ pogrupis studijuoja

ATLAS ir CMS eksperimentuose išmatuotą džetų susidarymo diferencialinį reakcijos skerspjūvį, kai pilna protonų susidūrimo energija yra 13 TeV [3, 4]. VU grupės nariai modeliuoja situaciją, kai tuos duomenis nori panaudoti teoretikas ir vertina pasiekiamos informacijos pilnumą, tikslumą ir patogumą naudoti. Tam jie naudoja viešose publikacijose, HepData ir Rivet bazėse užregistruotą informaciją, o paskelbtus matavimo rezultatus lygina su tinkamais CMS kolektyvo sukurtais protonų susidūrimų įvykiais, modeliuotais Pythia8 generatoriumi. ATLAS ir CMS eksperimentai matavimo neapibrėžtumų kovariacijas pateikia skirtingais būdais, kas leidžia palyginti naudojimo patogumą. Apskaičiavus χ^2/n (čia n žymi centrinių verčių pasiskirstymo laisvės laipsnių skaičių), galima prasmingai palyginti dviejų eksperimentų matavimo rezultatų panašumą į pasirinktu modeliavimo parametrų rinkiniu sugeneruotus dydžius. Kadangi darbas yra atliekamas LHC darbo grupėje, į kurią įeina ir ATLAS, ir CMS eksperimentų atstovai, atrandami viešų duomenų naudojimo keblumai gali būti aptarti ir ištaisomi. Taip pat yra vertinama ir Rivet aplinka, ieškant optimalaus būdo panaudoti HepData pateikiamas duomenų lenteles. Tiriamasis darbas turėtų baigtis arXiv portale paskelbtomis rekomendacijomis eksperimentatoriams.

Konferencijos pranešime bus pristatytas VU grupės atliekamas darbas bei jos gauti rezultatai, rodantys, kad matavimo neapibrėžtumų koreliacijų įskaitymas stipriai įtakoja matavimo ir modeliavimo rezultatų kiekybinį panašumą įvertimą naudojant χ^2/n vertę.

Reikšminiai žodžiai: elementariųjų dalelių fizika, matavimo paklaidų koreliacijos.

Literatūra

1. E. Maguire, L. Heinrich, and G. Watt, „HEPData: a repository for high energy physics data“, *J. Phys. Conf. Ser.* 898 (2017) 102006 [1704.05473]. HEPData portalas <https://www.hepdata.net>.
2. C. Bierlich *et al.*, Robust independent validation of experiment and theory: Rivet version 3, *SciPost Phys.* 8 (2020) 026 [1912.05451]. Rivet portalas <https://rivet.hepforge.org>.
3. CMS collaboration, A. Tumasyan et al., Measurement and QCD analysis of double-differential inclusive jet cross sections in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV, *JHEP* 02 (2022) 142 [2111.10431]; HepData collection <https://doi.org/10.17182/hepdata.115022>.
4. ATLAS collaboration, M. Aaboud et al., Measurement of inclusive jet and dijet cross-sections in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector, *JHEP* 05 (2018) 195 [1711.02692]; HepData collection <https://doi.org/10.17182/hepdata.79952>.

Molibdenu legiruotų deimantų tipo anglies plėvelių mikrostruktūros ir nanotribologinių savybių tyrimas

Investigation of microstructure and nanotribological properties of molybdenum doped diamond-like carbon films

H. Zhairabany*¹, H. Khaksar², E. Vanags³, E. Gnecco², L. Marcinauskas¹

¹ Kaunas University of Technology, Department of Physics, Studentų str. 50, Kaunas, Lithuania

² M. Smoluchowski Institute of Physics, Jagiellonian University, ul. Lojasiewicza 11, Krakow, Poland.

³ Institute of Solid-State Physics, University of Latvia, Microscopy laboratory, Kengaraga Str 8. Riga, Latvia.
hassan.zhairabany@ktu.edu

Nowadays, by using metals such as Ag, Ti, Ni, Cr, and Ag, as well as non-metals elements Si, O, N, and F as alloying materials, it is possible to change and modify the structure and properties of diamond-like carbon (DLC) films. This has led to extensive studies on the formation of doped DLC coatings to expand the application areas of these films [1-3]. Some dopants have already demonstrated the possibility of enhancing desirable properties for the different types of DLC films and in different application areas, such as biological implants [1]. The doping of DLC films with molybdenum (Mo) has demonstrated its role in enhancing tribological and mechanical properties. It was found that the Mo-DLC films demonstrated a lower compressive stress, friction coefficient values, enhanced corrosion and wear resistance as well improved hardness and biocompatibility [4-6]. It should be noted that the bonding structure and final properties of the Mo-doped DLC films strongly depend on the molybdenum concentration in the film [5-6].

Molybdenum doped amorphous DLC films were deposited on Si (100) substrates by magnetron sputtering at fixed target-substrate distance (6 cm). The graphite and Mo targets were used. The graphite and the Mo targets currents were fixed at 1.5 A and 0.25 A respectively, while a slit opening on a shield mounted above the Mo target was changed to have gradually increased the Mo content embedded in the DLC films. The deposition duration was 600 s. The surface morphology, friction forces, elemental composition, structure, and hardness of the sputtered Mo-doped DLC films were investigated by atomic force microscopy (AFM), energy dispersive X-ray spectroscopy, Raman spectroscopy and nanoindenter.

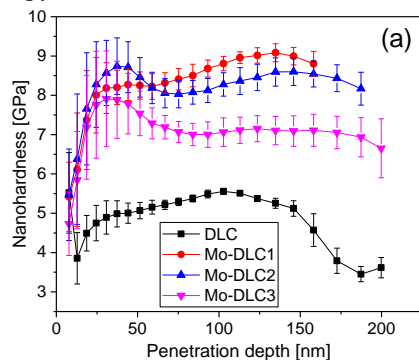


Figure 1: Average nano-hardness versus the indentation depth of DLC and Mo-DLC films.

It was obtained that the molybdenum doped diamond-like carbon films with a low concentration of oxygen were successfully deposited on a silicon substrate using direct current magnetron sputtering. The amount of molybdenum increased from 1.1 at.% to 6.2 at.%. The highest oxygen concentration was found in the Mo-DLC film with the highest molybdenum concentration. Surface roughness values decreased with the addition of a low amount up to 2.5 at.% of Mo in the films. Raman spectroscopy measurements showed that the sp^2/sp^3 ratio increased and a slight graphitization of the films was promoted with the increase in Mo concentration. DLC film without the molybdenum had the lowest nano-hardness and Youngs modulus values (Fig.1). The addition of the Mo enhanced the hardness of the Mo-DLC films. It was found that the highest nano-hardness and elastic modulus were obtained when the Mo concentration in the film was 2.5 at.% (Fig.1).

The nano-tribological measurements demonstrated that the friction coefficient of the DLC film was 1.16. The addition of Mo reduced the friction coefficient of DLC films. The friction coefficient of the Mo-DLC films varied from 0.86 to 0.97. This research has shown that doping DLC films with molybdenum is an effective way to enhance the nano-hardness, reduce surface roughness and friction coefficient, and control the fraction of sp^2 and sp^3 bonds in the amorphous carbon films.

Keywords: Mo-doped diamond-like carbon, microstructure, friction coefficient, nano-hardness.

Literature

- [1] C. A. Love, R. B. Cook, T. J. Harvey, P. A. Dearnley, and R. J. K. Wood, *Tribol Int*, vol. 63, pp. 141–150, Jul. 2013, doi: 10.1016/j.triboint.2012.09.006.
- [2] J. Jiang, J. Hao, X. Pang, P. Wang, and W. Liu, *Diam Relat Mater*, vol. 19, no. 10, pp. 1172–1177, Oct. 2010, doi: 10.1016/j.diamond.2010.05.005.
- [3] M. Evaristo, R. Azevedo, C. Palacio, and A. Cavaleiro, *Diam Relat Mater*, vol. 70, pp. 201–210, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.diamond.2016.10.024.
- [4] D. B. Padmanaban, L. Mohan, P. Giri, P. Bera, C. Anandan, and H. C. Barshilia, *C (Basel)*, vol. 7, no. 1, p. 1, Dec. 2020, doi: 10.3390/c7010001.
- [5] Y. Su, X. Gong, W. Huang, T. Zhang, R. Hu, P. Zhang, H. Ruan, Y. Ma, *Diamond and Related Materials*, vol 135, 2023, 109795, ISSN 0925-9635. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2023.109795>.
- [6] Y. Su, W. Huang, L. Cai, X. Gong, T. Zhang, R. Hu, P. Zhang, H. Ruan, *Tribology International*, vol 174, 2022, 107774, ISSN 0301-679X, <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2022.107774>.

1D plazmoninių gardelių formavimas naudojantis tiesioginiu lazeriniu rašymo metodu

Formation of 1D plasmonic grating using direct laser writing method

Kipras Čepaitis, Kernius Vilkevičius, Evaldas Stankevičius

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

kipras.cepaitis@ff.stud.vu.lt

Įvairūs plazmoninių metalų mikrodariniai yra plačiai tyrinėjami dėl jų panaudojimo jutikliuose, saulės elementuose, paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje (SERS) bei magnetiniame įrašyme šilumos pagalba (HAMR) [1]. Atskirus darinius sugrupavus į gardelę, pavienių darinių lokalizuoti plazmonai tarpusavyje sąveikauja ir sužadina hibridinius plazmonus, kurie pasižymi intensyvesniu ir siauresniu rezonansu.

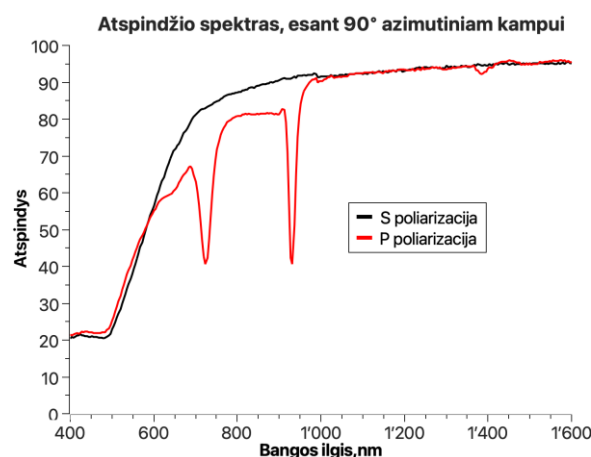
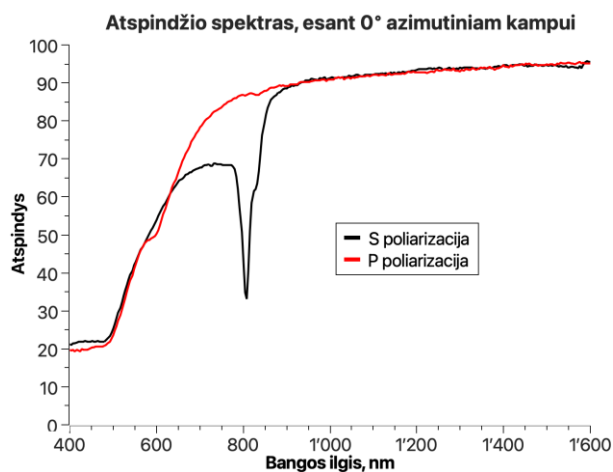
Dažnai tokios gardelės yra formuojamos litografiniais metodais, tačiau tam reikalingos vakuuminės sistemos apsunkina industrinį pritaikymą. Šių masyvų formavimas tiesioginio lazerinio rašymo metodu leidžia lengviau bei greičiau apdirbti tauruosius metalus bei pritaikyti jų plazmonines savybes. Šioje technologijoje lazerio spindulys aštriai sufokusuojamas į metalo paviršių ir lazerio impulsas modifikuoja arba abliuoja ploną dangą. Impulsams persiklojant, gaunamos linijos, kurios ir sudaro vienmatę gardelę [2].

Formuojamų linijų storis priklauso nuo lazerio impulso energijos, fokusavimo sąlygų ir metalo sluoksnio storio. Kadangi impulso energija yra sukoncentruota spindulio centre, gaunama modifikacija ar abliacija priklauso ir nuo to, kiek impulsai persikloja vienas su kitu.

Šiame darbe gardelė yra formuojama femtosekundiniu lazeriu, o bandinių atspindžio spektrai matuojami spektrofotometru. Registruojant atspindžio spektrą pastebėta, jog gardelės rezonansinis atsakas priklauso nuo krentančios spinduliuotės poliarizacijos. Krentant S poliarizacijai, gaunamas vienas sugerties rezonansas ties gardelės periodo bangos ilgiu. Pasukus bandinį 90 laipsnių, gaunami du rezonansai krentant P poliarizacijos šviesai, tačiau S poliarizuota spinduliuotė nebesugeriama (1 pav.). Taip pat buvo ištirta rezonansų bangos ilgio priklausomybė nuo mikrodarinių periodo. Kadangi įvairiems jutikliams ar optiniams įrenginiams svarbu turėti stipresnį jautrumą ties tam tikrais bangos ilgiais, svarbu sugebėti nuspėti, ties kuriuo bangos ilgiu atsiras rezonansas suformavus gardelę. Teoriniams apskaičiavimams galima naudoti viendimensinės gardelės difrakcijos formulę [3]:

$$\lambda_{rez} = \frac{d}{m} \left(\pm \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m} - \sin^2 \theta} \right) \quad (1)$$

Naudojant praktinius rezultatus ištirta rezonanso bangos ilgio priklausomybė nuo šviesos kritimo kampo, o jie gerai atitinka teorinius skaičiavimus.



1 pav. Gardelių atspindžio spektrai, esant 0° ir 90° azimutiniams kampams, spinduliuotei į bandinį krentant 8° kampu.

Reikšminiai žodžiai: 1D gardelė, aukso mikrodariniai, tiesioginis lazerinis rašymas.

Literatūra

- [1] T. Iqbal, *Current Applied Physics*, 15, 1445-1452 (2015).
- [2] K. Yang et. al, *Advanced Materials*, 33, 2007988 (2021)
- [3] E. Stankevičius et. al, *Advanced Optical Materials*, 9, 2100027 (2021)

Hibridinių kompozitų su anglies nanodalelėmis žemo dažnio triukšmas

Low frequency noise of hybrid composites with carbon nanoparticles

Frydrichas Mireckas¹, Marina Korzhenevskaya¹, Sandra Pralgauskaitė¹, Jonas Matukas¹,

Darya Meisak¹, Sergejs Gaidukovs², Jan Macutkevič¹, Jūras Banys¹

¹ Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

² Rygos technikos universitetas, Kipsalas iela 6a, LV-1048 Ryga, Latvija

frydrichas.mireckas@ff.stud.vu.lt

Anglies nanodalelių kompozitai yra didelio mokslo ir technologijų bendruomenės dėmesio sulaukusios medžiagos dėl jų ypatingų charakteristikų: puikių elektrinio ir šiluminio laidžių, mechaninio tvirtumo [1]. Anglies nanodalelės šiuose kompozituose dielektrinėje polimero matricoje sudaro laidų tinklą [2]. Kadangi kompozitinių medžiagų savybės yra susijusios su jų sudėtimi ir morfologine sandara, efektyvus jų taikymas praktikoje reikalauja išsamaus kompozito savybių tyrimo.

Žemo dažnio triukšmo matavimai yra efektyvus metodas tirti krūvio pernašos reiškinius kompozitiniuose medžiagose [3]. Ypač aktualus yra $1/f$ tipo triukšmas, kurio intensyvumas nusako sensorių jautrumo ribą.

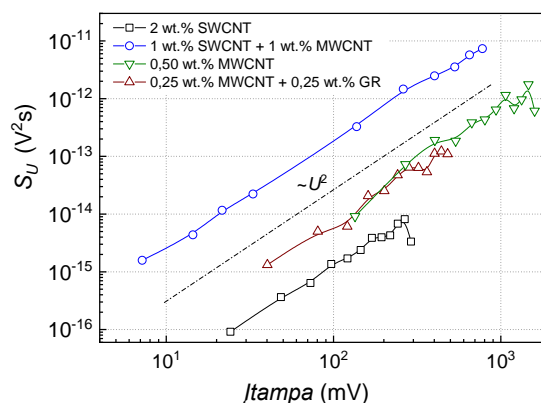
Šiame darbe pateikiame hibridinių kompozitų su skirtingomis anglies nanodalelėmis žemo dažnio triukšmo tyrimo, kurio tikslas yra nustatyti triukšmo šaltinius tiriamosiose medžiagose ir ištirti vyraujančius krūvio pernašos mechanizmus, rezultatus.

Tirtųjų hibridinių kompozitų užpildai: daugiasieniai anglies nanovamzdeliai (MWCNT) ir vienasieniai anglies nanovamzdeliai (SWCNT) arba grafasas (GR). Ištirtos skirtingos užpildų koncentracijos medžiagos. Atlikti kompozitų savitosios varžos ir žemo dažnio (10 Hz – 20 kHz) triukšmo charakteristikų matavimai temperatūros intervale nuo 75 K iki 365 K.

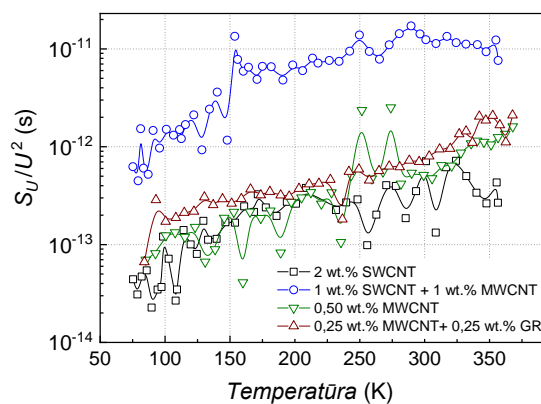
Tirtų kompozitinių medžiagų įtampos fliktuacijų spektras sudarytas iš $1/f^\alpha$ ir Lorencio tipo komponentų. Įtampos fliktuacijų spektrinis tankis yra proporcingas įtampos kvadratui (1 pav.), kas indikuoja, kad stebimas triukšmas šiuose kompozituose yra sukeltas varžos fliktuacijų.

Dalinis SWCNT užpildo pakeitimas MWCNT hibridiniuose MWCNT/SWCNT kompozituose lemia savitosios varžos ir įtampos fliktuacijų intensyvumo padidėjimą (1 ir 2 pav.). Tai sietina su didesniais MWCNT matmenimis, dėl kurių, esant ekvivalenčiai užpildų koncentracijai, individualių užpildo dalelių skaičius yra mažesnis, kas sumažina tikimybę sudaryti efektyvų laidų tinklą kompozito struktūroje. Dėl didesnio MWCNT paviršiaus ploto, didėja ir paviršinių defektų (krūvininkų pagavos centrų) skaičius.

Dalinis MWCNT pakeitimas grafenu MWCNT/GR kompozituose taip pat lemia savitosios varžos padidėjimą, tačiau šio pakeitimo poveikis įtampos fliktuacijų spektriniam tankiui yra mažesnis (1 ir 2 pav.).



1 pav. Įtampos fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo įtampos kambario temperatūroje 86 Hz dažniui.



2 pav. Normuoto įtampos fliktuacijų spektrinio tankio priklausomybė nuo temperatūros 86 Hz dažniui.

Reikšminiai žodžiai: anglies nanodalelės, anglies nanovamzdeliai, krūvininkų pernaša, žemadažnis triukšmas.

Literatūra

- [1] R.H. Baughman, Science **297**, 787–792 (2002).
- [2] Z. Spitalsky, D. Tasis, K. Papagelis, and C. Galiotis, Progress in Polymer Science **35**, 357–401 (2010).
- [3] M. Tretjak, S. Pralgauskaitė, J. Matukas, J. Macutkevič, J. Banys, and O. Shenderova, Fluctuation and Noise Letters **18**, (2019).

Titano pasluoksnio įtaka mikrogumbelių formavimui ir plazmoniniam sužaditimui plonoje aukso dangoje naudojant tiesioginį lazerinį rašymą

Titanium interlayer influence on microbump formation and plasmonic excitation on the thin gold film using direct laser writing technique

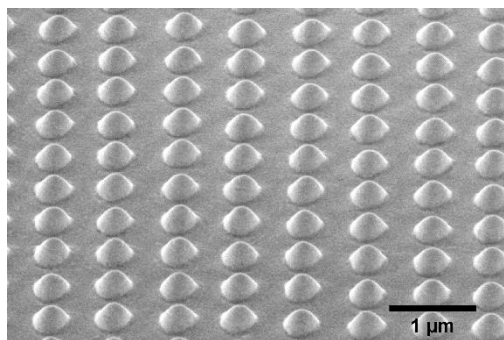
Rodrigas Liudvinavičius¹, Evaldas Stankevičius¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių Technologijų skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
rodrigas.liudvinavicius@ftmc.lt

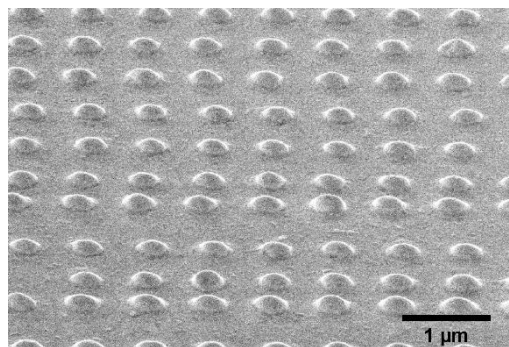
Periodiškai išdėstytos mikrodalelės ir jų struktūros gali būti pritaikytos daugelyje sričių. Dažną jų naudojimą lemia plazmoninis efektas, šviesos ir metalo mikrostruktūrų sąveika. Ši sąveiką ir visa plazmonikos sritis, vis daugiau sulaukia dėmesio, dėl perspektyvių panaudojimų kuriant naujus optinius prietaisus, grindžiamus plazmonų sužadimui ir hibridinės gardelės plazmonų rezonansu (HLPR). HLPR, tai kolektyviniai krūvio svyravimai, susieti su išoriniu elektromagnetiniu lauku, sklindančiu metalo ir dielektriko sąsaja. Tačiau, nauji tyrimai yra vis dar reikalingi, norint pagerinti rezonanso kokybę ir išplėsti sąveikos pritaikymų sritis.

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

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



1 pav. Aukso mikrogumbelių gardelės SEM mikrografija, be papildomo adhezinio sluoksnio. Gumbeliai suformuoti naudojant 0,5 nJ impulso energiją.



2 pav. Aukso mikrogumbelių gardelės SEM mikrografija, be papildomo adhezinio sluoksnio. Gumbeliai suformuoti naudojant 0,45 nJ impulso energiją.

Darbo metu gauti rezultatai rodo, kad HLPR, be pagrindinių priklausomybių kaip gardelės periodas, šviesos poliarizacija, šviesos kritimo kampas, bandinio pasukimo kampas, taip pat priklauso ir nuo adhezinio titano tarp sluoksnio, kadangi naudojant papildomą titano pasluoksnį tarp aukso dangos ir pagrindo, gauti geresni rezultatai. Tokie eksperimentiniai rezultatai buvo patvirtinti atliekant lipnios juostelės testą, kuriuo metu buvo vertinamas dangos sukibimas su pagrindu.

Adhezinio pasluoksnio įtaka buvo vertinama matuojant bandinių atspindžių grafikus, įvertinant rezonanso smailių parametrus: gylį, pilnąjį plotį pusės maksimumo lygyje (FWHM), Q faktorių ir MQ faktorių.

Reikšminiai žodžiai: tiesioginis lazerinis rašymas, plazmonika, adhezija, auksas, titanas.

Literatūra

- [1] V. G. Kravets, F. Schedin, A. N. Grigorenko, Extremely Narrow Plasmon Resonances Based on Diffraction Coupling of Localized Plasmons in Arrays of Metallic Nanoparticles, *Phys. Rev. Lett.* 101, 087403, 2008.
 [2] Q. Jiang et al., *Nanoscale* 12(4) p. 2524-2531 (2020).

Padėka

Finansavimas gautas iš Lietuvos Mokslo Tarybos (LMT) (projekto numeris Nr. S-MIP-23-32).

Apkonvertuojančių nanodalelių dengtų aukso-baltymo nanoklasteriais teranostinių savybių tyrimai

Studies on theranostic properties of upconverting nanoparticles coated with gold-protein nanoclusters

Marius Saulėnas^{1,2}, Vilius Poderys², Eglė Ežerskytė^{2,3}, Vaidas Klimkevičius^{2,3}, Greta Butkienė², Vitalijus Karabanovas^{1,2}

¹Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius

²Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baulbio g. 3b, LT-08406, Vilnius

³Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius

marius.saulenas@stud.vilniustech.lt

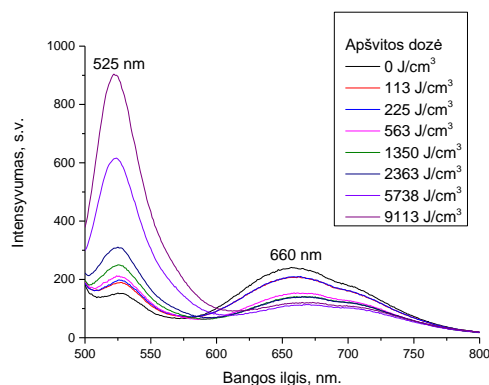
Nuolat tobulėjant šiuolaikinės medicinos metodams bei preparatams, didelis dėmesys yra skiriamas inovatyvių ir daugiavališkųjų teranostinių medžiagų paieškai bei tyrimams. Terapinių ir diagnostinių metodų apjungimas vienoje nanodalelėje (teranostika), teikia daug vilčių kuriant inovatyvius bei personalizuotus ligų diagnostikos bei gydymo metodus. Vienos iš teranostikai taikomų medžiagų gali būti apkonvertuojančios nanodalelės dengtos aukso-baltymo nanoklasteriais, kurios gali būti taikomos kaip žymekliai optinei biopsijai bei fotovaistai fotosensibilizuotai navikų terapijai (FNT).

Aukso – jaučio serumo albumino nanoklasteriai (JSA-Au NK) pasižymi fotoluminescencija raudonojoje regimojo spektro srityje (juostos maksimumas ties 660 nm), kuri pateka į audinių skaidrumo langą, todėl yra tinkami taikymui optinėje diagnostikoje. Juos apšvietus 405 nm spinduliuote, šie nanoklasteriai generuoja aktyvias deguonies formas kurios gali inicijuoti pažaidas navikiniame audinyje t.y. JSA-NK gali būti naudojami terapiniais tikslais atliekant FNT. Yra žinoma, kad tokių nanoklasterių sintezei galima panaudoti ir žmogaus kraujo plazmos baltymus, taigi tokių dalelių pagrindu galima kurti fotovaistus personalizuotai terapijai, kurie pasižymėtų geresniu biosuderinamumu bei mažesniais šalutiniais efektais [1].

Siekiant pagerinti JSA-Au NK FNT iniciavimą gilesniuose audinio sluoksniuose gali būti pasitelkiamos apkonvertuojančios nanodalelės. Šios nanodalelės pasižymi anti-Stokso tipo emisija - jos sugeria artimos infraraudonos srities (NIR) spinduliuotę (audinių skaidrumo lange) ir išspinduliuoja trumpesnio ilgio bangos spinduliuotę [2], kuri gali sužadinti JSA-Au NK ir inicijuoti FNT vyksmus.

Šiame darbe buvo tiriama aktyvių deguonies formų generacija NIR spinduliuote (980 nm) švitinant apkonvertuojančias aukso nanodaleles padengtas JSA-Au-NK. Darbe naudotos sferinės branduolio-lukšto architektūros $\text{NaGdF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}@\text{NaGdF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Nd}^{3+}$ apkonvertuojančios nanodalelės, kurios buvo padengtos JSA-Au NK, sudarant apkonvertuojančių nanodalelių kompleksą su JSA-Au NK (AKND:JSA-Au NK). Aktyvių deguonies formų (ADF) generacijai tirti buvo naudojamas dihidrorodaminas 123 (DHR) – aktyvių deguonies formų sensorius [3]. Tirpale generuojamos aktyvios deguonies formos oksiduoja DHR ir jis tampa rodaminu123, kuris pasižymi intensyvia fluorescencija (smailė ties 525nm). Švitinant AKND:JSA-Au NK

tirpalą 980nm bangos ilgio lazeriu buvo stebimas fluorescencijos juostos (ties 525 nm) augimas (1 pav.). Švitinimui naudojamos spinduliuotės nesugeria nei DHR, nei JSA-Au NK, todėl švitinant šiuo medžiagų tirpalus juostos ties 525 nm augimas buvo nežymus, taip pat kaip ir švitinant tirpalą kuriame buvo AKND be JSA Au NK dangos. Tai rodo, kad AKND:JSA-Au NK dalelės generavo ADF, o energija, kurią JSA Au-NK panaudojo aktyvių deguonies formų generavimui buvo gauta iš AKND kurios buvo žadinamos 980 nm šviesa.



1 pav. AKND BSA-Au komplekso ir DHR tirpalo fluorescencijos spektras apšvitinus skirtinga 980nm spinduliuotės doze.

Naudojant mūsų susintetintas AKND:JSA-Au NK nanodaleles galima inicijuoti FNT vyksmus naudojant NIR spinduliuotę. NIR spinduliuotė išsiskverbia į gilesnius audinio sluoksnius todėl fotosensibilizatorių, kurie gali būti sužadinti šia spinduliuote, naudojimas leistų ženkliai praplėsti FNT taikymo galimybes.

Reikšminiai žodžiai: teranostika, aukso nanoklasteriai, apkonvertuojančios nanodalelės.

Šiems tyrimams finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-23-5

Literatūra

- [1] Jarockyte, G.; Poderys, V.; Barzda, V.; Karabanovas, V.; Rotomskis, R. Blood Plasma Stabilized Gold Nanoclusters for Personalized Tumor Theranostics *Cancers* 2022, 14, 1887.
- [2] Wu X, Chen G, Shen J, Li Z, Zhang Y, Han G. Upconversion nanoparticles: a versatile solution to multiscale biological imaging, 2015, 26
- [3] John P. Crow, Dichlorodihydrofluorescein and Dihydrodramine 123 Are Sensitive Indicators of Peroxynitrite in Vitro: Implications for Intracellular Measurement of Reactive Nitrogen and Oxygen Species, 1996, 13.

Ti₃C₂T_x Maksenų nanostruktūrų sintezė ir sąveikos su metileno mėlio organinėmis molekulėmis tyrimas

Synthesis of Ti₃C₂T_x MXenes nanostructures and study of interaction with organic methylene blue molecules

Germantė Paulikaitė¹, Martynas Talaikis², Gediminas Niaura², Simonas Ramanavičius²

¹Fizikinės chemijos katedra, Vilniaus universiteto chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius

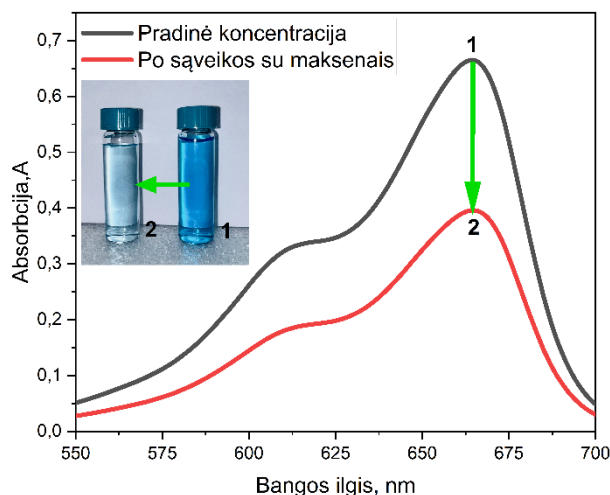
²Organinės chemijos skyrius, VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

germante.paulikaite@chgf.stud.vu.lt

Maksenai (angl. MXenes) Drekselio universitete (JAV) atrastos dvimatės nanostruktūros, kurios mokslininkų dėmesį patraukė dėl unikalių elektrinių, plazmoninių, hidrofiliųjų ir mechaninių savybių [1]. Nemažiau svarbu, kad šios nanostruktūros pasižymi ir labai sudėtinga paviršiaus chemija, kuri daro didelę įtaką medžiagos savybėms. Nors maksenai yra plati medžiagų klasė, tačiau labiausiai ištirtinėtoms T₃C₂T_x struktūroms, kurios ir buvo atrastos pirmos. Vienas iš populiariausių būdų T₃C₂T_x nanostruktūrų sintezei yra pirmtako Ti₃AlC₂ selektyvus išdėsinimas vandenilio fluorida (HF) rūgštyje. Tokiu būdu suformuojamos akordeono formos struktūros, kurios lyginant su kitomis maksenų struktūromis pasižymi stabilumu įvairiose terpėse, todėl jas yra paprasčiau naudoti praktiniams taikymams.

Maksenai plačiai tyrinėjami ne tik dėl unikalių savybių, tačiau ir dėl labai plataus šių medžiagų pritaikymo. Jau yra žinoma, kad maksenai pritaikomi paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje [2], biokuro elementuose [3], ličio bei natrio jonų baterijose [4] bei kitur. Taip pat, maksenai pasižymi ypatingai sudėtinga paviršiaus chemija, todėl jų sąveika su organinėmis molekulėmis, gali būti plačiai pritaikyta įvairaus tipo jutikliuose bei adsorbentuose. Vis daugėja tyrimų, kuriuose išnaudojant maksenų plazmonines savybes konstruojami įvairūs paviršiaus plazmonų rezonansu pagrįsti jutikliai.

Šiame tyrime, maksenai buvo susintetinti koncentruotoje HF rūgštyje išdėsinant Ti₃AlC₂ pirmtaką. Šiuo būdu susintetintos nanostruktūros pasižymi dideliu paviršiaus plotu, todėl yra parankios sąveikoms su įvairiomis molekulėmis tirti. Metileno mėlis buvo pasirinktas kaip modelinė organinė molekulė maksenų ir organinių molekulių sąveikai bei jos ypatumams iširti. Kadangi yra žinoma, kad maksenai puikiai adsorbuoja tirpaluose esančius katijonus, tyrimai atlikti buferiniuose tirpaluose su pastovia Na⁺ jonų koncentracija, esant pH nuo 3 iki 6. Tokiu būdu buvo užtikrinamos stacionarios sąlygos bei nustatyta adsorbcijos talpos pokyčio priklausomybė nuo pH. Adsorbcijos talpai suskaičiuoti pasirinktas spektrofotometrinis tyrimo metodas, kurio pagalba registruotas metileno mėlio adsorbcijos maksimumo intensyvumo pokytis (1 Pav.). Taip pat, siekiant įvertinti funkcinių grupių parankumą molekulėms adsorbuotis ant maksenų paviršiaus, tyrimai atlikti ir panaudojant azurą A, kurio struktūra yra gimininga metileno mėliui.



1 Pav. Metileno mėlio regimosios šviesos absorbcijos spektrai prieš ir po sąveikos su maksenais.

Tyrimų metu nustatyta, kad maksenų susintetintu koncentruotoje HF rūgštyje paviršius yra parankus adsorbuoti metileno mėlio organines molekules. Ši maksenų savybė gali būti plačiai pritaikoma įvairaus tipo jutikliuose bei vandeninių tirpalų valymui adsorbcijos būdu.

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. PD-22-155.

Reikšminiai žodžiai: maksenai (MXenes), spektrofotometrija, jutikliai, adsorbcija, vandens valymas.

Literatūra

- [1] Gogotsi Y, Anasori B. The Rise of MXenes. *ACS Nano* 2019;13:8491–4. <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b06394>.
- [2] Adomavičiūtė-Grabusovė S, Ramanavičius S, Popov A, Šablinskas V, Gogotsi O, Ramanavičius A. Selective enhancement of SERS spectral bands of salicylic acid adsorbate on 2D Ti₃C₂T_x-based MXene film. *Chemosensors* 2021;9:223.
- [3] Ramanavicius S, Ramanavicius A. Progress and Insights in the Application of MXenes as New 2D Nano-Materials Suitable for Biosensors and Biofuel Cell Design. *Int J Mol Sci* 2020;21. <https://doi.org/10.3390/ijms21239224>.
- [4] Li X, Huang Z, Shuck CE, Liang G, Gogotsi Y, Zhi C. MXene chemistry, electrochemistry and energy storage applications. *Nat Rev Chem* 2022;6:389–404. <https://doi.org/10.1038/s41570-022-00384-8>.

Katodoluminescencija GaN kristaluose, užaugintuose ant grafeno/SiC padėklų

Cathodoluminescence in GaN nanocrystals grown on graphene/SiC templates

Mantas Migauskas, Viktorija Mickūnaitė, Žydrūnas Podlipskas

Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
mantas.migauskas@ff.stud.vu.lt

Dažnai naudojama metodika gaminant plonus galio nitrido (GaN) sluoksnius yra epitaksija ant safyro ar silicio karbido padėklų, tačiau šis būdas turi nemažai trūkumų kaip augimo vietoje nesutampantių GaN ir padėklo kristalinių gardelių ir skirtingo šiluminio plėtimosi. Siekiant pagerinti auginimo metodiką ir didėjant susidomėjimui 2D van der Waals (vdW) medžiagomis vystomas kitas auginimo metodas – van der Waals epitaksija. Jo metu kristalai auginami ant padėklų, padengtų 2D vdW medžiagomis, kurių populiariausia yra grafenas. Šiuo metodu nusodinamos medžiagos atomų išsidėstymas yra nulemiamas ne stiprių kovalentinių ryšių, o tolimo atstumo vdW jėgų, todėl suteikiama daugiau laisvės gardelės atstumui ir terminiam plėtimuisi [1]. Kadangi šis gamybos metodas yra ganėtinai naujas, taip gautos medžiagos yra itin tiriamos, šiuo atveju naudojant hibridinę skenuojančių elektronų mikroskopijos (SEM) ir katodoluminescencijos (CL) sistemą.

Pranešimas suskirstytas į dvi dalis: didelio kiekio nano salų CL signalo analizę ir atskirų salų CL signalo pokyčius jų viduje. Kadangi bandinys buvo nusėtas įvairių formų ir dydžių nano salomis, buvo susitelkta tik į salas, atitinkančias taisyklingas figūras: piramides, šešiakampius bei strypus.

Pradedant nuo kiekybinių priklausomybių, ištirtas CL spektras ir palygintas su anksčiau matuotu homogenišku GaN sluoksniu, užaugintu ant safyro padėklo. Pastebėta, kad nors bendra spektro forma yra panaši, GaN/grafenas bandinio pagrindinė juosta, esanti ties 360 nm, yra iki dviejų kartų platesnė nei GaN/safyras bandinyje. Labiausiai tikėtina, kad šis platėjimas nulemtas pakavimo defektų, kurie, šiuo atveju, atsiranda augančiam GaN pradedant keistis iš kubinės į heksagoninę gardeles ir atvirksčiai [2]. Papildomi pokyčiai pasimato 400 – 500 nm bangos ilgio regione, kur GaN/grafenas bandinyje CL signalo beveik nėra, palyginus su GaN/safyras bandiniu. Šiuo atveju nors pakavimo defektai gali būti dalinė priežastis, signalo nebuvimas gali indikuoti ir mažą anglies priemaišų buvimą, kadangi jos dažnai siejamos su šio regiono spinduliavimu.

Nagrinėjant atskiras salas buvo nustatyta, kad iš panašaus dydžių minėtų figūrų geriausiai spinduliuoja šešiakampiai. Tokie rezultatai buvo netikėti, nes šešiakampės struktūros formuojasi tiesiai ant SiC, per grafene esančias nano skylutes, nepaisydamos grafeno sluoksnio. Tokio pobūdžio augimo metu formuojasi didelis

defektų ir paviršiaus įtempimų kiekis [3]. Pirminiu žvilgsniu papildomi defektai turėtų modifikuoti spektrą ir mažinti CL intensyvumą, tačiau taip nėra. Taip pat buvo pastebėta, kad spektro sudėtis kinta nuo figūros dydžio. Nuspėjimai, pagrindinis maksimumas krenta mažėjant figūrai, tačiau 400 – 700 nm vadinama defektų juosta nepriklauso nuo salos dydžio, todėl šios dvi smailės mažėjant figūrai tampa vis labiau palyginamos, jų santykis artėja link vieneto.

Taip pat buvo ištirta, kaip CL signalas kinta skirtingų figūrų viduje. Nagrinėti du parametrai, signalo plotis ties puse maksimumo (geriau žinomas angl. trumpiniu FWHM) ir maksimumą atitinkančio bangos ilgio poslinkis (angl. peak wavelength shift arba PWS). Abu šie parametrai gerai sutapo tarpusavyje ir parodė vienodas tendencijas visų formų salose. Figūrų viduryje signalo maksimumas yra siauriausias ir geriausiai atitinka tradicinio GaN spinduliuojamą bangos ilgį. Artėjant link kraštų maksimumas gali išplatėti 10 – 20 nm bei tuo pačiu pasislinkti į raudonąją spektro pusę 10 – 25 nm. Mažiausias pokytis kaip ir didžiausias CL signalas buvo matomas šešiakampėse nano salose.

Reikšminiai žodžiai: GaN, grafenas, epitaksija, katodoluminescencija.

Literatūra

- [1] Badokas, K., Kadys, A., Augulis, D., Mickevičius, J., Ignatjev, I., Skapas, M., Šebeka, B., Juška, G., & Malinauskas, T. (2022). MOVPE growth of GaN via graphene layers on GaN/Sapphire templates. *Nanomaterials*, 12(5), 785.
- [2] Bosch, J., Valera, L., Mastropasqua, C., Michon, A., Nemoz, M., Portail, M., Zúñiga-Pérez, J., Tchernycheva, M., Alloing, B., & Durand, C. (2023). InGaN/GaN QWs on tetrahedral structures grown on graphene/SiC. *Microelectronic Engineering*, 275, 111995.
- [3] Journot, T., Okuno, H., Mollard, N., Michon, A., Dagher, R., Gergaud, P., Dijon, J., Kolobov, A. V., & Hyot, B. (2019c). Remote epitaxy using graphene enables growth of stress-free GaN. *Nanotechnology*, 30(50), 505603.

Koloidinių Ag nanodalelių su SiO₂ apvalkalu pritaikymas modelinio 4-MBA monosluoksnio spektrinio intensyvumo pokyčio analizei SERS metodu

Application of colloidal Ag nanoparticles with SiO₂ shell to the analysis of spectral intensity change of model 4-MBA monolayer by SERS method

Marija Kalnaitytė, Tatjana Charkova, Martynas Talaikis

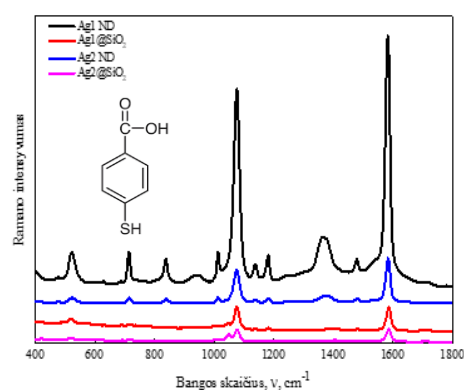
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
marija.kalnaityte@ff.stud.vu.lt

Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (SERS) yra virpesinės spektroskopijos metodas, kuris ženkliai sustiprina tiriamų molekulių Ramano sklaidos intensyvumą dėl laisvųjų elektronų plazmos rezonanso prie nanostruktūruotų Au, Ag ir Cu paviršių ar nanodalelių. Šis fenomenas yra ypač naudingas analizuojant mažas molekulių koncentracijas ir tai suteikia galimybę gauti išsamios informacijos apie virpesinius tiriamų medžiagų lygmenis bei jų cheminę sudėtį. Deja SERS metodas pasižymi trūkumais, pavyzdžiui: (i) metodui būtinas pasiurkštintas tauriųjų metalų paviršius, (ii) paviršius greitai užsiteršia atsitiktinėmis molekulėmis ir tai matoma SERS spektruose kaip pašalinės spektrinės juostos, (iii) paviršius gali turėti tam tikrą elektrinį krūvį, kuris veiks tiriamas molekules (jų erdvinę orientaciją, adsorbciją). Sprendžiant šias problemas buvo pasiūlytos naujos kartos plazmoninės nanodalelės padengtos apsauginiu dielektriko sluoksniu ir šiam naujai užgimusiui metodui suteiktas pavadinimas *nanodalelių, padengtų apsauginiu sluoksniu, sustiprinta Ramano spektroskopija* (SHINERS) [1]. Šios nanodalelės išbarstytos ant tiriamo paviršiaus elgiasi kaip maži Ramano signalo stiprintuvai, o jų apvalkalas apsaugo tyrinėjamą objektą nuo tiesioginio metalinės dalelės poveikio bei sąveikos su aplinka.

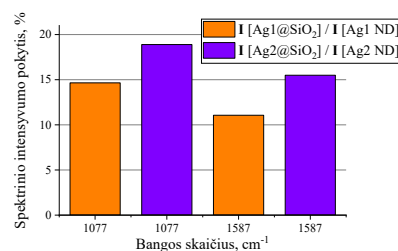
Cheminė redukcija tirpale, redukuojant citratu ir papildomai stabilizuojant polioliiais, dažnai naudojamas metalinių dalelių sintezės metodas [2]. Šio tyrimo metu, buvo susintetintos sferinės sidabro nanodalelės redukuojant tik citratu (Ag1 ND) ir citrato ir dietilenglikolio mišinyje (Ag2 ND). Abiejų rūšių dalelės (apie 80 ± 5 nm skersmens) buvo sėkmingai apvilktos plonu (iki 10 nm) silicio dioksido (SiO₂) sluoksniu (Ag1@SiO₂ ir Ag2@SiO₂) (1 pav.). Toliau dalelės pritaikytos modelinio 4-merkaptobenzoinės rūgšties (4-MBA) savitvarkio monosluoksnio analizei stebint jo Ramano charakteringų spektrinių juostų (1077 cm^{-1} ir 1587 cm^{-1}) intensyvumų pokyčius (2 pav.).

Nustatyta, kad naudojant Ag nanodaleles, 4-MBA savitvarkio monosluoksnio Ramano spektriniai intensyvumai buvo didesni nei naudojant tas pačias daleles padengtas SiO₂ sluoksniu. Apsauginis sluoksnis neleidžia tiesiogiai sąveikauti Ag šerdžiai su tiriamą medžiaga (4-MBA) ir taip paveikti jos struktūrą, bet kartu ir sumažina metodo jautrumą. Dėl SiO₂ apvalkalo spektriniai intensyvumai sumažėja iki 11–15 % lyginant su pradiniais intensyvumais (Ag nanodalelės be

apvalkalo) sintetinat su natrio citratu (Ag1@SiO₂), ir 16–19 % papildomai naudojant dietilenglikolį (Ag2@SiO₂). Dietilenglikolis papildomai stabilizuoja daleles, todėl sintetinant jos gaunamos sąlyginai stambesnės. Dėl sferinių dalelių skersmens padidėjimo, išauga Ramano signalo stiprinimas, kuris prarandamas apvelkant tokias daleles SiO₂.



1 pav. 4-MBA savitvarkio monosluoksnio SHINERS spektrai gauti naudojant Ag1, Ag1@SiO₂, Ag2 ir Ag2@SiO₂ nanodaleles. Taip pat pateikta 4-MBA molekulinė struktūra.



2 pav. Intensyviausių 4-MBA monosluoksnio Ramano spektrinių juostų (1077 cm^{-1} ir 1587 cm^{-1}) likutiniai intensyvumai pritaikius tas pačias nanodaleles su papildomu SiO₂ sluoksniu.

Reikšminiai žodžiai: nanodalelės, savitvarkiai monosluoksniai, SERS, SHINERS.

Literatūra

- [1] J.F. Li, et. al. Shell-Isolated Nanoparticle-Enhanced Raman Spectroscopy, *Nature*. 464 (2010) 392–395.
- [2] E. Daublytė, M. Kalnaitytė, A. Klimovich, A. Drabavičius, T. Charkova, „Synthesis of Silver Nanoparticles with Polyols under Reflux and Microwave Irradiation Conditions”, *Chemija*, Vol.34, No. 3, 2023.

Aukšta sisteminė fotoelektrocheminio (PEC) vandens skaidymo kinetika naudojant plazmoninius nanokompozitus BiVO₄.

High System Kinetics of Photoelectrochemical (PEC) water splitting using Plasmonic Nanocomposites of BiVO₄.

Muhammad Haris^{1,2}, Syeda Ammara Shabbir²

¹Kaunas University of Technology, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Studentų str. 50, LT-51368 Kaunas

²Forman Christian College, University(ACharteredUniversity),Lahore 54600,Pakistan

muhhar@ktu.lt , ammaraanwar@fccollege.edu.pk

Carbon-free fuel or green hydrogen production by photoelectrochemical water splitting is a promising way to replace the usage of fossil fuels on a large scale. However, green hydrogen is not cost-friendly in comparison with fossil fuels due to the average energy efficiency[1-2]. In this project, photoanodes based on nanocomposites of monoclinic BiVO₄ by incorporating the nanoparticles of plasmonic metals (Au & Ag), reduced graphene Oxide (RGO), and carbon nanotubes (CNT) were fabricated for photoelectrochemical water splitting. Four different photoanodes were prepared by using drop-casting and electrochemical deposition techniques. Scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), and Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) analysis confirmed the surface morphology, structural details, and concentration of carbon nanotubes, graphene sheet, and BiVO₄, Au, and Ag nanoparticles in photoanodes. Ultraviolet-Visible spectroscopy revealed the increasing trend in absorption edge, for RGO/CNT/BiVO₄, RGO/CNT/Ag/BiVO₄, RGO/CNT/Au/BiVO₄, and RGO/CNT/Ag/Au/BiVO₄, photoanodes respectively. The photoelectrochemical (PEC) catalytic response of these fabricated photoanodes was determined through linear sweep voltammetry (LSV) during oxygen evolution reaction (OER) and hydrogen evolution reaction (HER). The incorporation of reduced graphene oxide and carbon nanotubes revealed an increasing trend in current density through fast transportation of electrons. RGO/CNT/Ag/Au/BiVO₄ photoanode exhibited high system kinetics with the lowest over-potential of 200 mV with the great ABPE% of 6.62%.

- water splitting. European Journal of Inorganic Chemistry (2021).
 [2] Thakur, A., Ghosh, D., Devi, P., Kim, K. H., & Kumar, P. Current progress and challenges in photoelectrode materials for the production of hydrogen. Chemical Engineering Journal(2020).

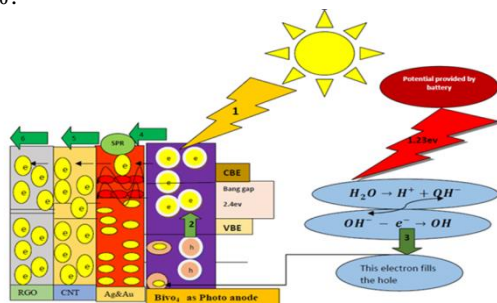


Figure 1 working principle of Photoelectrochemical water splitting

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

Literature

- [1] Marschall, R.. 50 years of materials research for photocatalytic

Žadinimo bangos ilgiui pritaikomi SERS padėklai biojutiklių taikymams

Wavelength-tailored SERS active substrates for biosensing applications

Nadzeya Khinevich¹, Weronika Andrzejewska², Asta Tamulevičienė^{1,3}, Tomas Tamulevičius^{1,3,4}, Mikołaj Lewandowski², Sigitas Tamulevičius^{1,3}

¹Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

²NanoBioMedical Centre, Adam Mickiewicz University, Wszechnicy Piastowskiej 3, 61-614 Poznań, Poland

³Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

⁴UAB Nanoversa, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

nadzeya.khinevich@ktu.lt

Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), the strain of coronavirus that causes COVID-19, has shocked the world with its rapid spread and severe consequences and made the scientific world develop reliable infection tests. Nowadays, there are two widely used methods: molecular diagnostic and serologic tests. The first one is considered to be very sensitive but time-consuming, whereas the second is fast and simple but cannot be applied for early COVID-19 diagnosis. Thus, there is a need for developing methods that provide fast and reliable detection of viruses.

Surface-enhanced Raman scattering (SERS) is a powerful analytical technique used in chemistry, pharmacology, and biomedicine for studying biological systems, e.g., proteins, tissues, bacteria, or viruses. This method deserves consideration for its ability to target molecules, such as viral particles or biomarkers associated with the SARS-Cov-2 detection. Moreover, the analysis can be performed in a label-free way.

A periodic array of noble nanoparticles with tunable optical properties finds application across various fields, ranging from photocatalytic processes to laser technology [1–3]. Recently, the study focusing on this structure's application in SERS has been reported [4,5] and interest is constantly increasing. Lately, our research group demonstrated that the tailored-to-target wavelength optical response of silver nanoparticle array produces an increase in SERS sensitivity demonstrating the enhancement factor (EF) up to 10^9 [6].

Within the present study, we have fabricated SERS-active substrates consisting of 2D nanostructures of periodic arrays of Au nanoparticles implemented into a polymer matrix using a capillary-assisted particle deposition technique and surface-functionalized with SARS-CoV-2 antibodies. The arrays are shown to be applicable for the efficient and specific detection of micro-molar concentrations of antibodies through the observation of their SERS signals (Fig. 1).

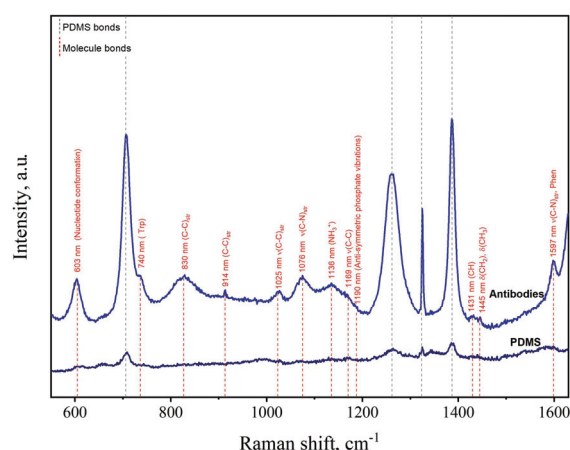


Fig. 1. SERS spectra of PDMS template with Au nanoparticles and detection of SARS-CoV-2 antibodies

Keywords: gold nanoparticles, SERS-active substrates, biosensing, SARS-CoV-2.

The research was financed through the LaSensA project carried out under the M-ERA.NET scheme and co-funded by the European Union's Horizon 2020 program, the Research Council of Lithuania (LMTLT), Agreement No. S-M-ERA.NET-21-2, the Saxon State Ministry for Science, Culture, and Tourism (Germany), and the National Science Centre of Poland, Project No. 2020/02/Y/ST5/00086.

References

- [1] T. K. Hakala et al., Nat. Commun. 8, 1 (2017).
- [2] W. Wang, L. Qi, Adv. Funct. Mater. 29, 1807275 (2019)
- [3] Q. Tong, W. Wang, Y. Fan, L. Dang, TrAC - Trends Anal. Chem. 106, 246 (2018)
- [4] L. Chen, C. Hu, Y. Dong, Y. Li, Q. Shi, G. Liu, R. Long, Y. Xiong, J. Phys. Chem. C 127, 8167 (2023)
- [5] C. Xing, D. Liu, J. Chen, Y. Fan, F. Zhou, K. Kaur, W. Cai, Y. Li, Chem. Mater. 33 (2021) 310–319
- [6] N. Khinevich, M. Juodėnas, A. Tamulevičienė, T. Tamulevičius, S. Tamulevičius, M. Talaikis, G. Niaura, Sensor Actuat B-Chem, 394, 134418 (2023)

Leucino ir Izoleucino atpažinimas paremtas fragmentacijos rezultatais elektromagnetiniame lauke

Discrimination of leucine and isoleucine via fragmentation by electromagnetic field

Jelena Tamuliene¹, Teodora Kirova²

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

²Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas iela 3, LV-1004, Riga, Latvia
teo@lu.lv

Proteins are complex molecules essential for many biological functions, such as enzymatic activity and the transport of nutrients and other biochemical compounds across cellular membranes [1]. To determine protein structure, various analytical methods (direct or indirect) are used, and all these methods have their advantages and disadvantages. The determination of the complete amino acid sequence of proteins still remains a challenge, especially for proteins whose residues are leucine (*Leu*) or isoleucine (*Ile*), especially the mass spectrometry-based ones [2]. The composition of *Leu* and *Ile* is identical, thus, distinguishing them by mass is a non-trivial task, because their mass spectra are different only due to the intensity of the m/z 69 peaks, which is dependent on the experimental condition.

We investigated numerically the interaction of *Leu* and *Ile* with dipole electric (DE) and electromagnetic (EM) radiation fields, further conducting a comparative study between the two isomers. Geometry optimization of the *Leu* and *Ile* structures under the action of a DE field was performed, employing the original cc-pVTZ basis with the help of the computational GAUSSIAN09 package [3].

In the case of the EM field, we proceeded using a modified cc-pVTZ basis in which correction coefficients were introduced to the molecular wave functions in order to reflect the elongation of electron orbitals and densities caused by the magnetic field, similar to our recent work [4]. These coefficients were calculated following the procedure of the Anisotropic Gaussian-type orbital method [5, 6]. Since the values of the magnetic field of radiation are very small, ($\sim 10^{-5}$ a.u.) the obtained correction coefficients proved to be independent of the type of atom or orbital.

In the DE and EM fields, *Leu* was partially deformed (Fig. 1 left). In the case of *Ile2* (one of the *Ile* conformers obtained by us), increasing the field strength leads to the O-H and N-H bond rotations, while in the case of *Ile1*, when the study is performed with the inclusion of both the dipole electric and the corresponding magnetic field, the H transfer is obtained, i.e. the zwitterion form of *Ile1* is formed.

In addition, we have studied the electrostatic potential which also indicates the charge distribution and allows predict different behaviour of *Leu* vs *Ile* in the DE or EM fields, and can be used for these structural isomers' discrimination. For example, for field strength 0.5 a.u. in the case of *Leu*, the fragmentation is field-independent, giving CO₂, C₂H₅N, C₃H₆, and 2H, while *Ile* decomposes into CH₃, C₃H₆, C₂H₄NO₂ in the electric

dipole field, and into CO₂, C₃H₈N, C₂H₄, H in the electromagnetic field. Moreover, this method could be used for the conformer's (*Ile1* vs *Ile2*) recognition. The latter suggests the relevance of our numerical calculations, which account for corrections to the molecular orbitals due to the magnetic field, and they could be proposed as a possible tool for isomer discrimination.

This abstract is based upon work from COST Action CA18212-Molecular Dynamics in the GAS phase (MD-GAS), supported by COST (European Cooperation in Science and Technology). The numerical calculations with GAUSSIAN09 package were performed at the High Performance Computing Center of Vilnius University "HPC Sauletekis".

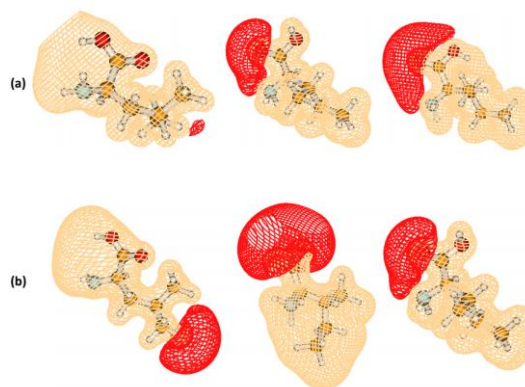


Fig. 1 View of the electric potential of *Leu* (on the left), *Ile1* (in the center), and *Ile2* (on the right) obtained with the inclusion of the electric dipole field (a) and along with the corresponding magnetic field (b). The field strength is $E=0.40$ a.u. The contour value is 0.10.

Key words: amino acids, isomers, conformers, basis set, electromagnetic field, fragmentation

References:

- [1] G. Wu, F. W. Baser, Z. Dai, D. Li, J. Wang, and W. Zhenlong, *Annu. Rev. Anim. Biosci.* **2**, 387 (2014).
- [2] K. Biemann, *Biomed. Environ. Mass Spectrom.* **16(1-12)**, 99 (1988).
- [3] <http://www.gaussian.com>
- [4] T. Kirova and J. Tamuliene, *Materials* **16(5)**, 1814 (2023).
- [5] P. Schmelcher and L. S. Cederbaum, *Phys. Rev. A* **37(3)**, 672 (1988).
- [6] W. Zhu and S. B. Trickey, *J. Chem. Phys.* **147**, 2441084 (2017).

Anomalioji difuzija ir ilga atmintis rinkėjo modelyje

Anomalous diffusion and long-range memory in the voter model

Rytis Kazakevičius, Aleksėjus Kononovičius

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

rytis.kazakevicius@tfai.vu.lt

Rinkėjo modelis yra vienas iš labiausiai ištirtų agentais pagrįstų modelių sociofizikoje [1]. Nors pradinis rinkėjo (Kirmano) modelis buvo skirtas aprašyti konkurenciją tarp rūšių, šis paprastas imitacinis modelis buvo pritaikytas ir nuomonių dinamikai tirti [2]. Todėl savo tyrime aprašėme netiesines rinkėjo modelio transformacijas [3]. Tiek kintamojo aprašančio agentų (rinkėjų) skaičių vienoje būsenoje (turinčių vieną iš dviejų galimų nuomonių), tiek laiko skalės transformacijos veda į procesą, kuris gali atkurti įvairius ilgos atminties statistinius įverčius, tokius kaip anomalioji difuzija (subdifuzija ir superdifuzija) ir laipsninis galios spektrinis tankis.

Darant prielaidą, kad yra dvi galimos būsenos ir agentų skaičius N yra fiksuotas, modeliui apibūdinti galima užrašyti tokios perėjimo spartas:

$$\begin{aligned}\pi^+ &= \pi(X \rightarrow X+1) = (N-X)(r_1 + hX), \\ \pi^- &= \pi(X \rightarrow X-1) = X(r_2 + h(N-X)).\end{aligned}\quad (1)$$

X yra agentų skaičius pirmoje būsenoje, r_i yra nepriklausomo (vienos dalelės sąveikos) perėjimo sparta, o h yra parametras įvertinantis bandos jausmą (dviejų dalelių sąveikos įvertis).

Termodinaminėje riboje $N \rightarrow \infty$, o $x = X/N$ gauname tokia stochastinė diferencialinė lygtį (SDL)

$$\begin{aligned}dx &= \frac{\pi^+ - \pi^-}{N} dt + \sqrt{\frac{\pi^+ - \pi^-}{N^2}} dW_t \approx \\ &\approx h[\varepsilon_1(1-x) + \varepsilon_2 x] dt + \sqrt{x(1-x)} dW_t.\end{aligned}\quad (2)$$

Čia $\varepsilon_i = r_i/h$ yra santykinis perėjimo sparta, o W_t yra standartinis Wiener procesas.

Yra žinoma, kad kai kurie prekyautojai slepia savo ketinimus nuo kitų prekybininkų. Čia mes apsvarstysime netiesinę x transformaciją, kuri galėtų šį efektą įvertinti

$$y = \left(\frac{x}{1-x}\right)^\alpha, \quad (3)$$

jei $\alpha > 1$, tai daroma prielaida, kad prekyautojai slepia savo ketinimus, kai rinka išeina iš pusiausvyros (auga perteklinė paklausa).

$\alpha > 1$, prekybininkai slepia savo ketinimus, kai rinka artėja prie pusiausvyros (perteklinė paklausa tampa nuliu)

Atlikus kintamojo transformaciją aprašytą (3) formule (2) SDL gauname naują SDL

$$dy = \left[\left(\eta_+ - \frac{\lambda_+}{2}\right) y^{2\eta_+-1} + \left(\eta_- - \frac{\lambda_-}{2}\right) y^{2\eta_- -1} \right] dt + (y^{\eta_+} + y^{\eta_-}) dW_t. \quad (4)$$

Naujai įvesti parametrai yra:

$$\eta = 1 + \frac{\alpha}{2}, \quad \lambda_+ = 1 - \alpha\varepsilon_1, \quad \lambda_- = 1 + \alpha\varepsilon_2. \quad (5)$$

Jei $\alpha > 0$ ir $y < 1$, aukščiau pateikta SDL galima aproksimuoti heterogeninės difuzijos procesu (HDP) išoriniame potenciale [4]

$$dy = \left(\eta - \frac{\lambda}{2}\right) y^{2\eta-1} dt + y^\eta dW_t. \quad (6)$$

Su atspindinčia kraštine sąlyga (6) SDL, pasižymi tokiais ilgos atminties savybėmis [5] kaip laipsninis skirstinys $P(x) \sim 1/x^\lambda$, anomalioji difuzija

$$\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2 \sim t^\gamma, \quad \gamma = \frac{1}{1-\eta} = \frac{1}{\alpha}. \quad (6)$$

ir laipsninis galios spektrinis tankis

$$S(f) = \frac{1}{f^\beta}, \quad \beta = 1 + \frac{\lambda-3}{2(\eta-1)}. \quad (3)$$

Mes išvedėme analitines aproksimacijas aprašančias rinkėjo modelio momentų kitimą laikui bėgant. Pasinaudojant šiomis aproksimacijomis galima nesunku apskaičiuoti vidurkio, dispersijos ir kitų aukštesnių momentų laikinę raidą. Skaitmeninio modeliavimo rezultatai, suskaičiuoti pasinaudojant Gillespie metodu, sutampa su išvestomis analitinėmis išraiškėmis. Mūsų išvedimai buvo pagrįsti rinkėjo modelio nuo laiko priklausomos tikimybės tankio funkcijos aproksimavimu heterogeninės difuzijos proceso tikimybės tankio funkcija. Pasiūlytą tikimybės tankio formulę būtų galima panaudoti norint gauti pirmojo praėjimo (kirtimo) laikų pasiskirstymą.

Reikšminiai žodžiai: rinkėjo modelis, ilga atmintis, anomalioji difuzija.

Literatūra

- [1] C. Castellano, S. Fortunato and V. Loreto, Rev. Mod. Phys., **81**, 591 (2009).
- [2] T. Liggett, Stochastic interacting systems: contact, voter, and exclusion processes (Springer, Berlin, 1999).
- [3] R. Kazakevičius, A. Kononovičius, Phys. Rev. E, **103**, 032151 (2021).
- [4] R. Kazakevičius, A. Kononovičius, Phys. Rev. E, **94**, 032109 (2016).
- [5] R. Kazakevičius, A. Kononovicus, B. Kaulakys, V. Gontis, Entropy **23** (2021).

Yang-Baxter lygtis

Yang-Baxter equation

Vidas Regelskis^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²School of Physics, Astronomy and Mathematics, University of Hertfordshire, Hatfield, AL10 9AB, UK
vidas.regelskis@ff.vu.lt

Lygčių sprendimas yra sena kaip laikas istorija ir mūsų kasdieninio gyvenimo dalis. Vienos lygtys yra lengvai išsprendžiamos, tuo tarpu kitos reikalauja didelio išradingumo. Yang-Baxter lygtis yra trečios eilės netiesinė lygtis, veikianti tenzorinėje vektorinėje erdvėje $V \otimes V \otimes V$,

$$R_{12}R_{23}R_{12} = R_{23}R_{12}R_{23} \quad (1)$$

kur $R : V \otimes V \rightarrow V \otimes V$ yra tiesinis operatorius, vadinamas *R-matrica*, o žymėjimas R_{ij} reiškia, kad operatorius R veikia i -tame ir j -tame tenzoranduose. Grafiškai,

Yang-Baxter lygtis pavadinta Chen-Ning Yang'o ir Rodney Baxter'io garbei. Jie atrado šią lygtį kvantinės mechanikos [1] ir statistinės fizikos [2] kontekste. Šiuo metu Yang-Baxter lygtis užima svarbų vaidmenį daugelyje matematikos ir fizikos sričių: dagiadalelėse sistemose, sklaidos matricos teorijoje, kondensuotųjų medžiagų fizikoje, kvantinių laukų teorijoje, grupių teorijoje, mazgų teorijoje, įvaizdžių teorijoje.

Vienas paprasčiausių netrivialių Yang-Baxter lygties sprendinių yra Yang'o *R*-matrica,

$$R(u) = \text{id} - uP \quad (2)$$

kur id yra vienietinis operatorius, o P yra perstatymo operatorius,

$$P : a \otimes b \mapsto b \otimes a \quad (3)$$

visiems $a, b \in V$. Ši sprendinį fizikos kontekste galima interpretuoti kaip dalinę dviejų tapatingų dalelių sklaidos matricą, kur u yra dalelių judesio kiekio momentų skirtumas. Tai nėra pilna sklaidos matrica, nes trūksta skaliarinio daugiklio, kuris dažnu atveju yra meromorfinė funkcija nustatoma iš unitarumo ir krūvio-jungtinumo sąlygų.

Surasti visus Yang-Baxter lygties sprendinius, kai V yra bet kokia vektorinė erdvė, yra nepasiekiamas užduotis. Šią užduotį galima stipriai supaprastinti pareikalavus, kad V būtų neredukuojamas paprastos Lie algebros \mathfrak{g} įvaizdis. Pastaruoju atveju Yang-Baxter lygties sprendiniai yra \mathfrak{g} -ekvariantiniai

tiesiniai atvaizdavimai. Jų klasifikacija visoms paprastoms Lie algebroms buvo surasta Alexander Belavin'o ir Vladimir Drinfeld'o [3]. Jie parodė, kad kiekvienai paprastai Lie algebrai \mathfrak{g} egzistuoja trijų tipų sprendiniai: racionalūs, trigonometriniai ir eliptiniai (tik kai $\mathfrak{g} = \mathfrak{sl}_n$), ir nurodė jų nulių ir polių struktūrą.

Svarbu tai, kad kiekvienas Lie tipo sprendinys natūraliu būdu apibrėžia begalinę asociatyvią nekomutatyvią algebrą, vadinamą kvantine grupe. Geriausiai suprastos ir plačiausiai išnagrinėtos yra racionalaus tipo kvantinės grupės, žinomos Yangian algebrų vardu [4]. Fizikoje, šios algebros naudojamos aprašyti procesus sukinių grandinėse, pavyzdžiui vienmačiuose feromagnetuose, fazinius virsmus kristalinėse medžiagose, pavyzdžiui ledo kristaluose, netiesinių sigma modelių dinamiką, o taip pat yra kertinės algebrinės struktūros Costello-Witten-Yamazaki kalibruotinių laukų teorijoje.

Skirtingai nuo paprastų Lie algebrų, Yangian algebrų baigtinių įvaizdžių kategorija $Y(\mathfrak{g})\text{-rep}^{\text{f.d.}}$ nėra pusiau-paprasta. Kai $\mathfrak{g} = \mathfrak{sl}_n$, egzistuoja surjektyvus homomorfizmas iš Yangian algebros $Y(\mathfrak{sl}_n)$ į universalų \mathfrak{sl}_n gaubtą $U(\mathfrak{sl}_n)$, leidžiantis kiekvieną \mathfrak{sl}_n -modulį laikyti $Y(\mathfrak{sl}_n)$ -moduliu. Ši savybė yra išskirtinė Lie algebrai \mathfrak{sl}_n ir stipriai palengvina kategorijos $Y(\mathfrak{sl}_n)\text{-rep}^{\text{f.d.}}$ analizę. Visgi, net šiuo atveju, yra likę daug neatsakytų klausimų susijusių su šia kategorija.

Šiame paranešime supažindinsiu su Yang-Baxter lygties sprendiniais, apibrėžiančiais Yangian tipo algebras, skirtingomis jų realizacijomis, ir atvirais klausimas, susijusiais su $Y(\mathfrak{g})\text{-rep}^{\text{f.d.}}$ kategorija.

Reikšminiai žodžiai: Yang-Baxter lygtis, Yangian algebros, įvaizdžių teorija.

Literatūra

- [1] C. N. Yang, *Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction*. Phys. Rev. Lett., 19 (23): 1312–1315, 1967.
- [2] R. J. Baxter, *Partition function of the eight-vertex lattice model*, Ann. Physics, 70 (1): 193–228, 1972.
- [3] A. A. Belavin and V. G. Drinfeld, *Solutions of the Classical Yang–Baxter Equation for Simple Lie Algebras*, Funktsional. Anal. i Prilozhen., 16 (3): 1–29, 1982; Funct. Anal. Appl., 16 (3):159–180, 1982.
- [4] A. Molev, *Yangians and Classical Lie Algebras*, Amer. Math. Soc., Providence, 2007.

Kondensacija dvimatėse topologinėse materijos fazėse

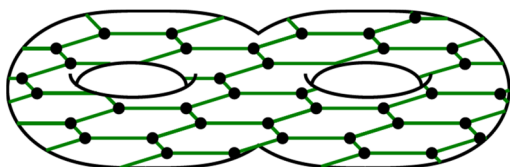
Condensation in two-dimensional topological phases of matter

Vincentas Mulevičius¹

¹Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius
vincentas.mulevicius@ff.vu.lt

Topologinės materijos fazės sudaro tam tikrą kvantinių sistemų klasę. Jas atpažinti galima per keletą būdingų egzotiškų reiškinių. Vienas jų yra išsigimęs (t.y. ne vienmatis) vakuomo būsenų poerdvis, priklausantis nuo fizinės sistemos erdvės (pvz. gardelės) topologijos, bet nepriklausantis nuo jos dydžio. Ši savybė sieja topologines materijos fazes su stebėtinais plačiu kitų fizikos sričių diapazonu, pvz. jų efektyviai žemos energijos artiniai yra vadinamosios topologinės kvantinio lauko teorijos. Pastarosios sutinkamos kvantinės gravitacijos modeliuose, stygų teorijoje, nagrinėjant instantonines pseudo-daleles, o taip pat moderniose matematikos srityse, kaip mazgų teorija, kategorijų teorija ir t.t. Dvimatės topologinės materijos fazės (t.y. apibrėžtos per gardeles/lauko teorijas ant plokštumos, sferos, toro ir t.t.) turi turtingą sužadinių teoriją - anyonines daleles. Anyonai yra dalelės, kurių statistika skiriasi nuo bozonų ir fermionų, jos gali būti panaudotos pvz. konstruojant kvantinius kompiuterius ir kvantinės informacijos lustus.

Konkretūs modeliai, realizuojantys dvimates topologines fazes, buvo pasiūlyti Kitaev [1] ir Levin–Wen [2]. Juos apibrėžiant pasirenkamas paviršius Σ ir gardelės formos poaibis $\Gamma \subseteq \Sigma$.



1 pav. Gardelė Γ ant paviršiaus Σ . Kiekviena plaketė turi būti homeomorfiška diskui.

Gardelės viršūnėms priskiriama lokalių laisvės laipsnių Hilberto erdvė X , sistemos Hamiltonianas turi pavidalą

$$H = \sum_v (1 - P_v) + \sum_e (1 - P_e) + \sum_f (1 - P_f), \quad (1)$$

kur indeksai v, e, f žymi gardelės viršūnes, briaunas ir plaketes. Operatoriai $P_v: X \rightarrow X$, $P_e: X^{\otimes 2} \rightarrow X^{\otimes 2}$ ir $P_f: X^{\otimes n} \rightarrow X^{\otimes n}$ veikia tik ant laisvės laipsnių, gretimų atitinkamam komponentui c (viršūnei, briaunai, plaketei), ir sudaro komutuojančių projektorių šeimą, t.y.

$$[P_c, P_{\tilde{c}}] = 0, \quad P_c P_{\tilde{c}} = P_{\tilde{c}}. \quad (2)$$

Tokiu būdu vakuomo būsenų erdvė yra bendras projektorių vaizdas $\text{im} \prod P_c$, o sužadintos būsenos gaunamos komponuojant tik dalį operatorių, pvz. $\text{im} \prod_{c \neq \tilde{c}} P_c$.

Atskiri modelių (1) pavyzdžiai gaunami pasirinkus tam tikrą algebrinę struktūrą: Kitaev modeliams reikalinga baigtinė grupė G , Levin–Wen modeliams – pusiau-paprasta sferinė tenzorinė kategorija \mathcal{S} . Nuo jos priklauso tiek operatorių P_c išraiškos, tiek sistemos

anyoninių sužadinių tipai. Paprasčiausias pavyzdys yra Kitaev modelis gaunamas iš grupės $\mathbb{Z}_2 \cong \{\pm 1\}$, dar vadinamas toriniu kodu. Jo anyonai aprašomi paprastosiomis šios grupės kvantinio dublio (t.y. $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$) reprezentacijomis, kurių yra keturios: 1×1 (trivialioji \times trivialioji), $1 \times s$ (triviali \times ženklas ± 1), $s \times 1$ ir $s \times s$. Tokiu būdu torinis kodas turi 3 netrivialius anyonus. Algebrinė struktūra taip pat nusako efektyvą topologinę kvantinio lauko teoriją: Kitaev modeliams gaunamos Dijkgraaf–Witten tipo teorijos, Levin–Wen modeliams – Turaev–Viro–Barrett–Westbury tipo teorijos.

Straipsnio manuskripte [3] su kolegomis Ingo Runkel ir Thomas Voß (Hamburgo universitetas, Vokietija) nagrinėjame panašaus tipo modelius, kurie konstruojami kitų topologinių materijos fazių „viduje“. Tai reiškia, kad lokalieji laisvės laipsniai X patys yra anyoninės dalelės jau realizuotoje fazėje \mathcal{A} . Tokiai anyoninei gardelei pritaikomas Hamiltonianas, turintis analogišką (1) formą. Manuskripte pademonstruojame, kad šių sistemų vakuomo būsenos sudaro naują topologinę fazę \mathcal{B} . Tokiu būdu fazė \mathcal{A} „kondensuojama“ į fazę \mathcal{B} . Įdomu tai, kad fazė \mathcal{B} gali turėti daug turtingesnę anyonų šeimą, nei fazė \mathcal{A} , pvz. ankstesniame darbe [4] nagrinėjome pavyzdį, kuris šiame kontekste rodo, kad Ising fazė, turinti 2 netrivialius anyonus, gali būti sukondensuota į Wess–Zumino–Witten fazę „sl₂ lygyje 10“, turinčią 10 netrivialių anyonų.

Kaip ir anksčiau minėti topologinių fazių modeliai, mūsų modeliui apibrėžti reikalinga algebrinė struktūra. Šiuo atveju ji vadinama *orbifold datum* ir yra susijusi su defektais lauko teorijose ir vadinamosiomis neinvertuojamomis lauko teorijų simetrijomis. Matematinis šių konstrukcijų formalizmas nagrinėjamas [5] ir potencialiai gali būti pritaikytas panašioms bet kokios dimensijos topologinių materijos fazių kondensacijos procesams aprašyti.

Reikšminiai žodžiai: topologinės materijos fazės, lauko teorijos, anyonai, defektai, matematinė fizika

Literatūra

- [1] A. Kitaev, *Fault-tolerant quantum computation by anyons*, Ann. Phys. **303**:1 (2003) 2–30, arXiv:quant-ph/9707021.
- [2] M.A. Levin, X.G. Wen, *String net condensation: A Physical mechanism for topological phases*, Phys. Rev. B **71** (2005) 045110, arXiv:cond-mat/0404617 [cond-mat.str-el].
- [3] V. Mulevičius, I. Runkel, T. Voß, *Internal Levin–Wen models*, arXiv:2309.05755 [cond-mat.str-el].
- [4] V. Mulevičius, I. Runkel, *Fibonacci-type orbifold data in Ising modular categories*, J. Pure Appl. Algebra **227**:6 (2023) 107301, arXiv:2010.00932 [math.QA].
- [5] N. Carqueville, I. Runkel, G. Schaumann, *Orbifolds of n-dimensional defect TQFTs*, Geom. Topol. **23** (2019) 781–864, arXiv:1705.06085 [math.QA].

Statistinių ir mastelinių erdvinės įvairovės indeksų dinamikos Izingo modelyje

Dynamics of statistical and scale-based spatial indices in Ising model

Justas Kvedaravičius¹, Aleksejus Kononovičius²

¹ Vilniaus universiteto Fizikos Fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius

² Vilniaus universiteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius
justas.kvedaravicius@ff.stud.vu.lt

Socialinių sistemų dinamikos tyrinėjimas panaudojant statistines fizikos tyrimų metodus suformavo tarpdisciplininę tyrimų sritį - sociofiziką. Izingo modelio paradigma sulaukė didžiulio pasisekimo perkeltiant socialinių sistemų agentų sąveikas ir iš to kylančius reiškinius į sukininius modelius [1]. Įprastai šie modeliai analizuojami laikinės dinamikos požiūriu, tačiau kai kurie reiškiniai gali būti paaiškinti tik erdvinės dinamikos požiūriu, pavyzdžiui, migracija [2], reguliarios kelionės į (iš) darbovietę [3]. Šio tyrimo tikslas - iširti mastelinių ir statistinių erdvinės įvairovės indeksų savybes feromagnetinio ir antiferomagnetinio Izingo modelio gardelei.

Izingo modelio gardelės konfigūracijos gerai iliustruoja galimas erdvinės būsenas - (anti)feromagnetinė gardelė atitinka (anti)koreliuotą būseną, o paramagnetinė konfigūracija atitinka nekoreliuotą (atsitiktinę) būseną. Šiame tyrime kiekybiškai nustatyti šioms būsenoms pasitelkiami dviejų tipų indeksai. Statistiniai indeksai remiasi dviejų erdvių vienetų koreliacijos įvertinimu, erdvinėje statistikoje dažnai sutinkami Geary c ir Moran I indeksai [4].

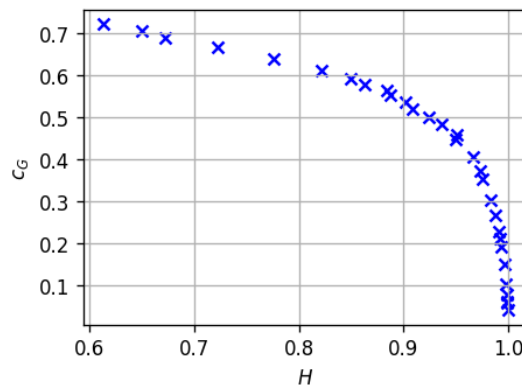
Palyginimui tyrime pasiūlomas mastelinio tipo indeksas - nevienalytiškumo indeksas H . Apskaičiuoti indeksui atliekama mastelio pakeitimo operacija - gretimi sukiniai sujungiami į vieną, kurio vertė yra sujungtųjų vidurkis. Tokios indekso formuluotės privalumas tas, jog jį patogiu taikyti hierarchiniams duomenims. Transformacijos sudarymo principas yra panašus į renormalizacijos grupės metodą. Nevienalytiškumo indeksas apibrėžiamas per nepilną reguliarizuotą Beta funkciją $I_{\alpha,\beta}(\tilde{\sigma}_K)$:

$$H = 2\langle I_{\alpha,\beta}(\tilde{\sigma}_K) \rangle - 1. \quad (1)$$

čia $\tilde{\sigma}_K$ žymi pasirinkto mastelio verčių normalizuotą standartinį nuokrypį, vidurkinimas per visus pasirinktus mastelius. Parametrų α ir β pasirinkimu galima lemti tai, jog sudėtinio tikimybės tankio funkcijos rolę atliekanti nepilnoji reguliarizuota Beta funkcija savo medianos vertę įgytų atsitiktinio išsimaišymo atveju:

$$\tilde{\sigma}_K = \frac{1}{\sqrt{K}}. \quad (2)$$

Šis proporcingumas gaunamas mastelio transformaciją atliekant ne gretimiems sukiniams, o pasirenkant juos atsitiktinai. Šiam atvejui parenkama $H = 0$ (analogiškai Pearsono koreliacijos koeficientui), o parametrų α ir β vertės gaunamos sulyginant (2) su $I_{\alpha,\beta}$ mediana.



1 pav. Sąryšis tarp Geary c indekso verčių ir nevienalytiškumo indekso H skirtingose feromagnetinio Izingo modelio pagal Kawasaki interpretaciją temperatūrose. Temperatūros vertės T tarp T_0 ir $5T_0$, kur T_0 yra temperatūra normuota į Bolcmano konstantą k_B ir feromagnetinės sąveikos konstantą J .

Statistinių ir mastelinių erdvinės įvairovės indeksų vertės apskaičiuotos antiferomagnetiniais ir feromagnetiniais Izingo modelio Kawasaki ir Metropolio interpretacijų atvejais. Viena iš erdvių matų dinamikų pateikiama 1 pav.

Mastelinis nevienalytiškumo indeksas yra tiesiškai proporcingas statistiniams indeksams atsitiktinių Izingo modelio (abiejų interpretacijų) gardelių konfigūracijų srityje. Tačiau mastelinis nevienalytiškumo indeksas yra mažiau detalus kraštutinių verčių srityse. Šį dėsnumą atskleidžia indeksų tarpusavio verčių sąryšio kreivėse atsirandantis netiesinis proporcingumas antiferomagnetinių ir kritinių konfigūracijų srityse.

Reikšminiai žodžiai: Izingo modelis, erdvinė dinamika

Literatūra

- [1] Castellano, Claudio Fortunato, Santo Loreto, Vittorio. (2007). Statistical physics of social dynamics. Reviews of Modern Physics. 81. 10.1103/RevModPhys.81.591.
- [2] Kononovičius, Aleksejus (2019). Compartmental voter model. Journal of Statistical Mechanics 2019. 10.1088/1742-5468/ab409b.
- [3] Fernández-Gracia, Juan Suchecki, Krzysztof Ramasco, Jose Javier Miguel, Maxi Eguíluz, Víctor. (2014). Is the Voter Model a Model for Voters?. Physical Review Letters. 112. 158701. 10.1103/PhysRevLett.112.158701.
- [4] Ripley, B. D. (1981). Spatial statistics. John Wiley Sons, New York.

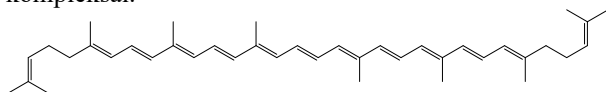
Likopeno su ciklodekstrinu kompleksų Ab initio tyrimas

Lycopene and Cyclodextrins Complexes Ab Initio Study

Goda Bankovskaitė¹, Laurynas Diska¹, Mindaugas Macernis¹

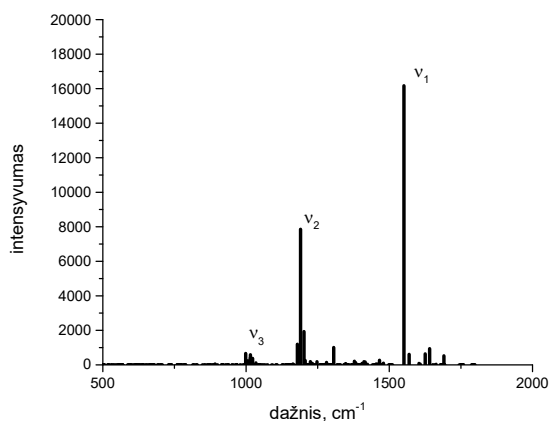
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
goda.bankovskaite@ff.vu.lt

Karotinoidai yra pigmentinės molekulės, kurios suteikia spalvas vaisiams, gėlėms ir gyvūnams, o tai yra pagrindas kompleksiškiems signalizavimo procesams [1,2]. Tuo tarpu fotosintetiniuose organizmuose jei dalyvauja fotonų surinkimo procesuose ir šiuo metu yra nustatyta virš tūkst. skirtingų molekulių rūšių [1]. Karotinoidai yra konjuguoti (1 pav.) ir netirpūs vandenyje, tačiau savybes galima pakeisti, sudarant kompleksus su kitomis molekulėmis, pavyzdžiui, ciklodekstrinais [1]. Karotinoidai turi Ramano spektrą, tipiška sudaryta iš trijų dažnių ν_1 , ν_2 ir ν_3 (pav. 2). Anksčiau buvo nagrinėta ciklodekstrino sąveika su betakarotenu [1], kur Ramano poslinkio savybės susietos su galuose esančias betažiedais. Ramano pokyčiai taip pat stebimi likopeno (1 pav.) su ciklodekstrinu kompleksuose, kur likopeno struktūra yra kitokia (eksperimentiniai duomenys nepublikuoti). Šiame darbe nagrinėjami galimi likopeno ir ciklodekstrino kompleksai.



1 pav. Likopeno cheminė formulė

Skaičiavimai buvo atliekami naudojant AMBER molekulių dinamiką (MD), analizė atlikta su DFT teorijomis: B3LYP ir CAM-B3LYP su cc-pVDZ.

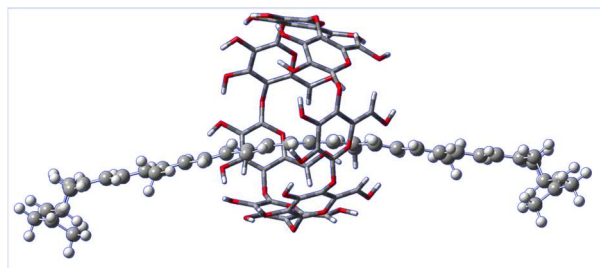


2 pav. Likopeno su ciklodekstrinu Ramano spektras

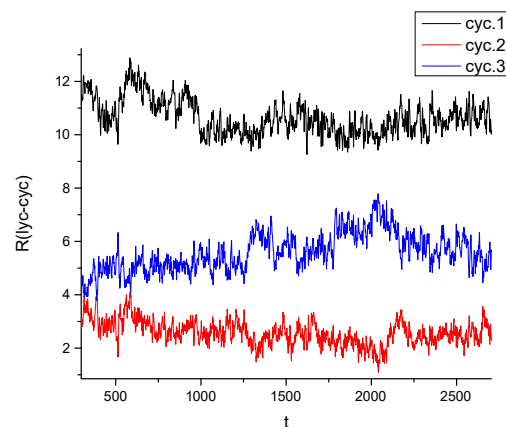
MD simuliacijomis suskaičiuoti kompleksai, kai likopenas yra su 1, 2 ir 3 ciklodekstrinais bei pridėdant vandens molekules ir be jų. Gauta, kad esant mažiau kaip 4 tūkst. vandens molekulių, MD simuliacijos formuoja atskirus vandens klasterius. Ciklodekstrino ir likopeno ryšio energijos ties visomis polieno grandinėlių padėtimis yra apie 0.1 eV. Iš likopeno su ciklodekstrinu

kompleksų (3 pav.) gauti likopeno Ramano spektrai (2 pav.).

MD simuliacijose palygintos RMSD ir masių centro analizės. Pagal masių centro analizę matosi, kiek laiko ciklodekstrinas išbūna ties tam tikra likopeno grandinėlių padėtimi (4 pav.).



3 pav. Likopeno su ciklodekstrinu kompleksas po optimizacijos



4 pav. Likopeno su 3 ciklodekstrinais komplekso vandens tirpiklyje MD

Reikšminiai žodžiai: molekulių dinamika, kvantinė chemija, superkompiuteris, karotinoidai.

Padėka

Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-MIP-23-48). Skaičiavimai buvo atlikti, naudojant superkompiuterį "VU HPC" Saulėtekis, resursais, esančiais Vilniaus universiteto Fizikos fakultete [3].

Literatūra

- [1] M. Macernis, A. Bockuviene, et al. J. Phys. Chem. A **124**, 2792 (2020).
- [2] M. Macernis, S. Streckaitė, R. Litvin et al. J. Phys. Chem. A **126**, 813 (2022).
- [3] M. Macernis, V. Mickus, J. Ahonen et al. arXiv:2210.00934 (2022).

Sinapsinio plastiškumo įtaka pirmo tipo neuronų sinchronizacijos režimams

Interplay of synchronization modes and synaptic plasticity in a system of class I neurons

Irmantas Ratas, Kęstutis Pyragas

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

irmantas.ratas@ftmc.lt

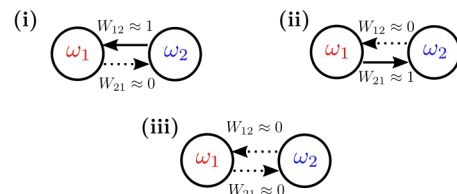
Sinchronizacija smegenyse gali atlikti tiek konstruktyvų tiek destruktivų vaidmenį, todėl svarbu suprasti šio reiškinio atsiradimo bei egzistavimo sąlygas. Neuronų galimybes sinchronizuotis nulemia individualios neuronų savybės, jų tinklo struktūra ir ryšio stiprumas. Neuronų tinklas nėra statiškas. Tinklo jungtys ir jungčių stiprumas keičiasi priklausomai nuo individualių neuronų veiklos. Ši jungčių savybė vadinama sinapsiniu plastiškumu. Taigi turime grįžtamąjį ryšį tarp individualių neuronų ir pačio tinklo dinamikos, kurį šiame darbe ir tirsime.

Neuronų dinamikai aprašyti pasirinkome pirmo tipo neuronų modelius: kvadratiškai integruojantį neuroną (angl. *quadratic integrate and fire* (QIF)), Wang–Buzsáki ir Morris–Lecar. Pirmo tipo neuronai, priklausomai nuo pridėtos pastovios išorinės jėgos, gali generuoti dažnius iš plataus spektro. Dažniausiai pridėjus teigiamo ženklo stimuliaciją tokie neuronai greitina savo dinamiką.

Laikas, kai neurono potencialas viršija tam tikrą kritinę vertę ir gali perduoti signalą kitam neuronui, yra vadinamas aktyvavimo laiku. Neuronai mūsų modelyje tarpusavyje sąveikauja delta impulsais. Darbe ryšio dinamiką aprašėme nuo neuronų aktyvavimo laiko priklausomu sinapsiniu plastiškumu (angl. Spike-timing-dependent plasticity (STDP)). Tai reiškia, kad ryšio kitimas tarp dviejų neuronų priklauso nuo jų aktyvavimo laikų skirtumo. Kuo tas laikas yra trumpesnis, tuo labiau šis ryšys pakinta. Pokyčio ženklas priklauso nuo aktyvacijos eiliškumo. Plačiau apie STDP taisykles ir jas patvirtinančius eksperimentus galima paskaityti apžvalgoje [1,2].

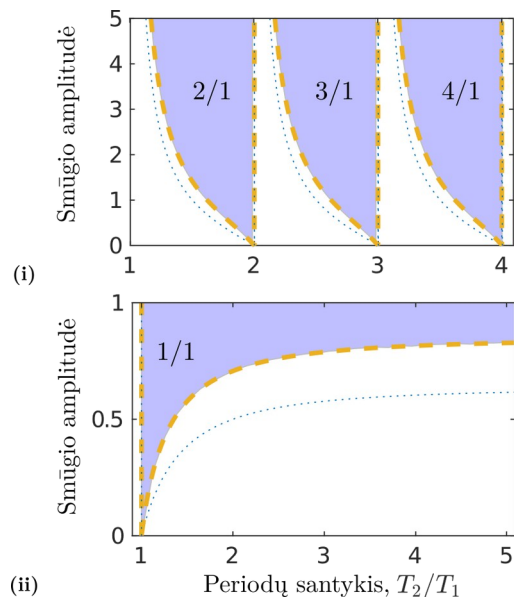
Tyrimą pradėjome nagrinėdami dviejų sujungtų neuronų atvejį. Išsiaiškinome, jog tarp dviejų neuronų gali egzistuoti trys tinklo konfigūracijos (žr. 1 pav.): (i) Ryšys iš greitesnio į lėtesnį neuroną nunyksta, o iš lėtesnio į greitesnį įgyja maksimalią vertę, sistema osciliuoja lėtojo dažniu; (ii) Ryšys iš lėtesnio į greitesnį nunyksta, o iš greitesnio į lėtesnį įgyja maksimalią vertę, sistema osciliuoja greitesnio neurono dažniu; (iii) Abu ryšiai nunyksta, sistema desinchronizuota.

Pirmoms dviem konfigūracijoms išlikti stabilioms reikalingas tam tikras sąveikaujančių neuronų savųjų periodų santykis ir atitinkama delta impulso amplitudė. Ši priklausomybė vadinama Arnoldo liežuviumi (AŽ), buvo rasta analitiškai. Palyginę AŽ statiškomis ir plastiškoms konfigūracijoms matome, jog plastiškumas sumažina galimybę dviem neuronams sinchronizuotis (žr. 2 pav.).



1 pav. Galimos dviejų neuronų $\omega_1 > \omega_2$ konfigūracijos.

Atlikę skaitmeninius modeliavimus su didesniais tinklais nustatėme, jog tokiuose tinkluose gali pasireikšti visos trys konfigūracijos, aptinkamos dviejų neuronų atveju. Iš šių rezultatų įdomu tai, jog lėtas neuronas gali priversti visą tinklą osciliuoti lėtu dažniu. Rezultatai publikuoti straipsnyje [3].



2 pav. Arnoldo liežuvio pavyzdžiai dviem QIF neuronams, esant (i) ir (ii) konfigūracijoms. Mėlyna taškuota kreivė statinis ryšys, geltona brūkšniuota kreivė plastiškas ryšys.

Reikšminiai žodžiai: Sinchronizacija, sinapsinis plastiškumas.

Literatūra

- [1] Daniel E. Feldman, *Neural Circuit and Cognitive Development (Second Edition)*, p.127-141, (Academic Press,2020).
- [2] Henry Markram, Wulfram Gerstner, Per Jesper Sjöström, Spike-Timing-Dependent Plasticity: A Comprehensive Overview, *Frontiers in Synaptic Neuroscience*, 4 (2012).
- [3] I. Ratas and K. Pyragas, Interplay of different synchronization modes and synaptic plasticity in a system of class I neurons, *Sci. Rep.* 12, 19631 (2022).

Neuroninių tinklų desinchronizavimas stabilizuojant nežinomas pusiausvyros būsenas

Desynchronization of neural networks by stabilizing unknown equilibrium states

Tatjana Pyragienė, Kęstutis Pyragas

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

tatjana.pyragiene@ftmc.lt

Sinchronizacijos tyrimai didelėse susietų netiesinių osciliatorių populiacijose yra svarbūs įvairiose mokslo srityse, pradedant fizika ir baigiant neuromokslu. Sinchronizacijos vaidmuo neuroninėse sistemose gali būti dvejopas. Sveikoje būsenoje sinchronizacija atsakinga už mokymąsi ir pažinimą [1], tačiau perteklinė sinchronizacija gali sukelti įvairias neurologines ligas, tokias kaip Parkinsono liga [2], epilepsija ir kt.

Aukšto dažnio gilioji smegenų stimuliacija (GSS) yra standartinė neurologinių sutrikimų gydymo procedūra, tačiau ji gali sukelti šalutinį poveikį, o jos gydomasis poveikis laikui bėgant gali sumažėti, todėl yra didelis mažiau invazinių ir veiksmingesnių stimuliavimo metodų poreikis [3].

Nemažai teorinių darbų rodo, kad koherentinių virpesių desinchronizavimas yra ypač efektyvus grįžtamojo ryšio valdymo algoritmų pagalba. Didelio masto neuroniniuose tinkluose koherentiniai ribinio ciklo virpesiai paprastai egzistuoja kartu su nestabiliomis nekoherentinėmis pusiausvyros būsenomis, kurios nėra stebimos eksperimentiškai. Siekdami stabilizuoti nežinomas nestabilias pusiausvyros būsenas ir nuslopinti koherentinius virpesius, įdiegėme pirmos eilės grįžtamojo ryšio valdiklį, kurio idėja buvo pasiūlyta mūsų ankstesnėje publikacijoje [4].

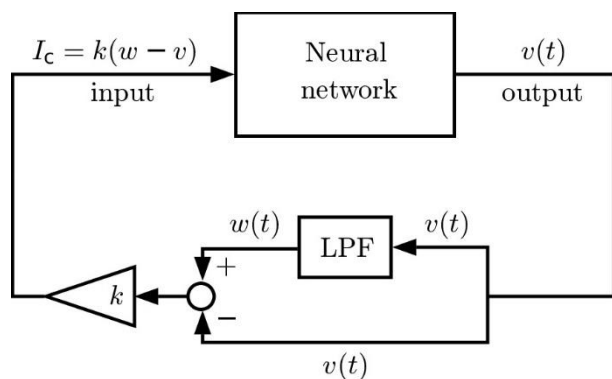
Mes pritaikėme šį algoritmą neuroniniams tinklams, sudarytiems iš QIF (*quadratic integrate-and-fire*) neuronų [5]. Termodinaminėje (be galo didelio tinklo) riboje QIF neuroninio tinklo mikroskopinės lygtys buvo redukuotos iki paprastos, mažos dimensijos vidutinio lauko (*mean-field*) lygčių sistemos, kuri leido analitiškai iširti valdymo problemą. Stabilizavome dviejų tipų nekoherentines būsenas, susijusias su nestabiliu židiniu ir balno pusiausvyros taškais. Balno stabilizavimui panaudojome nestabilų valdiklį.

Valdiklis sukonstruotas naudojant žemųjų dažnių filtrą LPF (*low-pass filter*). Valdiklio, pritaikyto neuroniniams tinklams, simbolinė schema parodyta 1 pav. Darome prielaidą, kad tinklo išvestyje (*output of the network*) galima išmatuoti visos arba dalies neuronų populiacijos vidutinį membranų potencialą $v(t)$ (*mean membrane potential*). Be to, tariame, kad visa neuronų populiacija arba jos dalis gali būti stimuliuojama įvesties srove (*input current*) $I_c(t)$. Tinklo įvestis ir išvestis (*input and output*) yra sujungti grįžtamojo ryšio kilpa, aprašyta tokiomis lygtimis:

$$w' = w_c (v - w), \quad (1a)$$

$$I_c = k(w - v), \quad (1b)$$

kur w yra valdiklio LPF dinaminis kintamasis. Valdymo algoritmas turi du reguliuojamus parametrus: LPF ribinį dažnį w_c ir grįžtamojo ryšio stiprį k . Stabilizuojant balną, w_c yra neigiamas, kas atitinka nestabilų valdiklį. Valdiklis sukonstruotas taip, kad stabilizuotoje nekoherentinėje būsenoje stimuliacijos srovė $I_c(t)$ asimptotiškai artėja prie nulio.



1 pav. Nežinomų nestabilių būsenų stabilizavimo neuroniniuose tinkluose simbolinis vaizdavimas.

Siūlomo valdiklio idėja yra patraukli projektuojant naujos kartos neurostimulatorius, nes nereikia žinoti tikslaus tinklo modelio, o neuronų desinchronizacija pasiekama minimalios invazijos būdu.

Padėka

Darbas parengtas pagal Lietuvos Mokslo Tarybos projektą Nr. S-MIP-21-2.

Reikšminiai žodžiai: neuroniniai tinklai, vidutinio lauko (*mean-field*) lygtys, *sinchronizacijos valdymas*.

Literatūra

- [1] J. Fell, N. Axmacher, *Nat Rev Neurosci* **12** (2), 105 (2011).
- [2] C. Hammond, H. Bergman, P. Brown, *Trends Neurosci.* **30** (7), 357 (2007).
- [3] J. K. Krauss, N. Lipsman, T. Aziz, A. Boutet, P. Brown, J. W. Chang, B. Davidson, W. M. Grill, M. I. Hariz, A. Horn, M. Schulder, A. Mammis, P. A. Tass, J. Volkmann, A. M. Lozano, *Nat Rev Neurol* **17** (2), 75 (2021).
- [4] K. Pyragas, V. Pyragas, I. Z. Kiss, J. L. Hudson, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 244103 (2002).
- [5] T. Pyragienė, K. Pyragas, *Phys. Lett. A* (2023) submitted.

Vandens lašelio tūrio prognozavimas mikroskysčių gardelėse

Droplet volume prediction for microfluidics chips

Valdemaras Milkus¹, Linas Mažutis¹¹Vilniaus Universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
valdemaras.milkus@bti.vu.lt

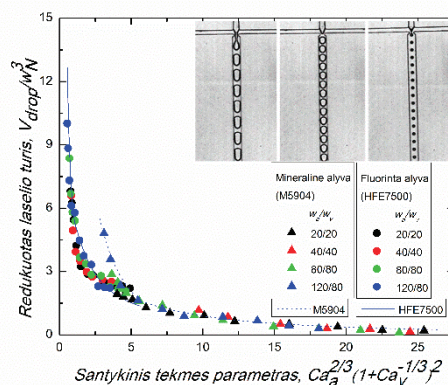
Mikroskysčių (angl.- Microfluidics) technologija yra paremta laminarine skysčių tėkme kanaluose, kurių aukštis ir plotis 10-100 mikrometrų (10^{-5} - 10^{-4} m). Biochemijos ir biologijos tyrimuose vis plačiau yra naudojamos mikroskysčių gardelės, kuriose dviejų nesimaišančių skysčių dėka gaminami lašeliai, atskirti pavienes ląsteles ar biomolekules. Vandens lašelių tūrį galima kontroliuoti keičiant tėkmės parametrus, o tai suteikia praplečia analitines galimybes charakterizuojant biologinius mėginius. Šiame darbe naudojama tėkmės geometrija paremta vandeninės terpės suspaudimu iš dviejų pusių alyvos skersinio srauto dėka ir siauro purkštuko (angl.- Nozzle) sukuriama papildomu pasipriešinimu (angl.-Flow-focusing junction). Taip suformuojami pikolitru- nanolitru tūrio (10^{-12} - 10^{-9} l) vandens lašeliai alyvoje (1 pav.).

Nors lašelių technologija naudojama seniai, pilno teorinio aprašymo lašelio susidarymui nėra. Ankstesni modeliai paaiškina ir teoriškai gali nuspėti tik dalį stebimų lašelio dydžio skirtumų. Teorinį modelį apsunkina ne tik eksperimentinių (tėkmės srautų Q , klampų η) ir geometrinių gardelės parametrų gausa (kanalų aukštis ir plotis- H , w , purkštuko plotis w_N), bet ir paviršiaus aktyvių medžiagų (angl.-Surfactant) naudojimas lašelių stabilumui užtikrinti [1]. Šių medžiagų adsorbcija lemia mažėjantį paviršiaus įtempies koeficientą γ .

Mūsų modelis paremtas veikiančių jėgų pusiausvyros sąlyga. Skysčius stumiančios šlyties ir pasipriešinimo slėgio jėgos yra atsveriamos paviršiaus įtempies jėga. Tarp dviejų skysčių ir kanalo sienelių susidaranti trinties jėga lemia energijos sklaidos atsiradimą ir jėgų pusiausvyros pažeidimą. Pusiausvyros pažeidimo metu lašelis nutrūksta ir šis procesas kartojasi pastoviu periodu. Todėl visų lašelių tūris yra vienodas. Ankstesniuose darbuose buvo įrodyta, kad stačiakampio skerspūvio kanale energijos sklaidą labiausiai lemia išorinės alyvos tėkmės greitis [1], [2].

Mūsų tiriamuoju atveju energijos sklaida yra proporcinga kapiliariniam skaičiui, kuris nusako klampos ir paviršiaus įtempies jėgų santykį:

$$Ca_{(a,v)} = \frac{\eta_{(a,v)} Q_{(a,v)}}{\gamma H w_{(a,v)}}. \quad (1)$$



1 pav. Lašelio redukuoto tūrio eksperimentinės vertės ir šio modelio prognozuojamos kreivės.

Nustatyta, kad trinties jėga ir susijusi energijos sklaida yra pagrindinis veiksnys, keičiantis lašelio tūrį. Santykinis tėkmės parametras leidžia skirtingų kanalų pločių ir lašelių tūrių vertes apibendinti viena funkcija (1 pav.). Šis modelis tinka skirtingo tankio ar klampumo alyvoms (fluorintai ir mineralinei), taip pat ir ne-Newtoninės klampos tirpalams. Apskaičiuotos funkcijos gali nesutapti esant lėtai apgaubiančios alyvos tėkmei skirtingo pločio kanaluose. Silpnė konvekcija lemia didesnę paviršiaus aktyvių medžiagų adsorbciją ir paviršiaus įtempies koeficiento γ sumažėjimą. Šiuo atveju lašelio tūriui sužinoti reikalingas pilnos pusiausvyros lygties sprendimas skaitmeniniais metodais.

Reikšminiai žodžiai: mikroskysčiai, lašelis, klampa, sklaida, paviršiaus įtempis

Literatūra

1. C. N. Baroud, F. Gallaire, and R. Danga, *Lab Chip*, 2010, 10, 2032–2045.
2. H. Wong, C.J. Radke and S. Morris, *J. Fluid Mech.* (1995), vol. 292, pp. 95-11

Ląstelių išsėdimas mikroskysčių gardelių eksperimentuose

Cell sedimentation in the experiments with microfluidics chips

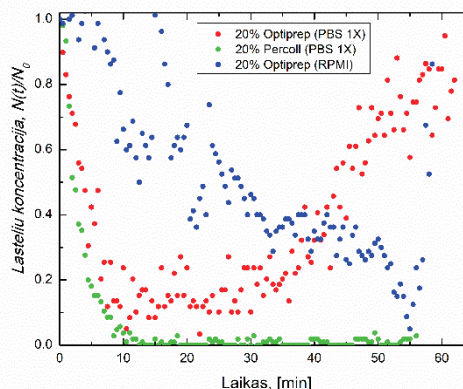
Valdemaras Milkus¹, Emilė Pranauskaitė¹, Rapolas Žilionis, Linas Mažutis¹

¹Vilniaus Universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al.7, LT-10257 Vilnius
valdemaras.milkus@bti.vu.lt

Biomokslų pažanga remiasi specifinių biologiškai aktyvių ar informaciją ląstelėje koduojančių medžiagų (DNR, RNR, baltymų) tyrimais. Įprasti biocheminiai metodai remiasi ląstelių populiaciniais tyrimais, kai matuojama viena vidutinė vertė. Mikroskysčių (angl.-Microfluidics) gardelių pagalba kiekviena tirama ląstelė gali būti analizuojama individualiai. Ląstelės patalpinamos į pikolitru- nanolitru (10^{-12} - 10^{-9} l) tūrio vandens lašelius. Kiekvienas lašelis gali būti laikomas atskiru mėgintuvėliu, o tarpusavyje jie yra atskirti inertinės alyvos sluoksniu, kuris neleidžia susiliesti ir susimaišyti. Lašelių formavimui reikalingi skysčiai yra injektuojami pasirinktais tėkmės srauto (angl.-flow rate) parametrais. Norint sumažinti nepageidaujamą dalelių ar ląstelių išsėdimą eksperimentų metu, įprastai į suspensiją įdedamas tankio gradiento tirpalas *Optiprep*, kuris padidina vandeninės terpės tankį. Tokiu būdu siekiama parinkti optimalų tankį ir pagaminti lašelius, kurie turėtų po vieną ląstelę.

Eksperimento, kurio trukmė >1 val., metu galima pastebėti, jog ląstelių skaičius per laiko vienetą patenkantis į gardelę, yra nepastovus. Šis nepastovumas reikalauja papildomo tėkmės srautų reguliavimo, tam, kad išlaikyti pastovią ląstelių koncentraciją lašeliuose per visą eksperimento eigą. Skirtingos *Optiprep* koncentracijos sukuria skirtingą suspensijos tirpalo tankį ir ląstelių srauto profilį, tačiau nesumažina koncentracijos kitimo intervalo (1 pav.) Remiantis prielaida, kad pradinė ląstelių koncentracija N_0 yra vienoda per visą tūrį, galima apskaičiuoti išsėdusių/iškeltų ląstelių skaičių [1]-[2] ir likusių suspenduotų ląstelių koncentraciją $N(t)$. Eksperimento metu skaičiuojama, kiek ląstelių per laiko vienetą patenka į gardelę skirtingais laiko momentais. Ląstelių santykinė koncentracija $N(t)/N_0$ buvo matuojama skirtingo tankio tirpaluose. Visais atvejais pritaikytos teorinės $N(t)/N_0$ funkcijos. Nustatyta, kad esant vandeningos terpės tankiui (1.053 g/ml), stebimas ląstelių skaičius didėja greičiau nei prognozuoja pradinis teorinis modelis ir pasiekia pradinės koncentracijos vertę, $N(t)/N_0=1$. Tai reiškia, kad

ląstelės tankis gali būti nepastovus ir artėjantis link tirpalo tankio. Palyginimui buvo atlikti analogiški matavimai su kita tankio gradiento terpe *Percoll*, kurios tankį keičianti dalis yra nanodalelės. Šiuose eksperimentuose nebuvo stebėtas ankstesnis $N(t)/N_0$ augimas. Daroma išvada, kad šios dalelės negali patekti į ląstelę ir keisti jos tankio. Ląstelėms esant augimo terpėje (*RPMI*), jos gali aktyviai išstumti *Optiprep* ir likti to paties tankio.



1 pav. Eksperimentiškai stebėtas ląstelių koncentracijos kitimas skirtingose terpėse.

Tyrimo rezultatai leidžia kelti hipotezę, kad *Optiprep* tirpalo aktyvioji medžiaga, kuri yra naudojama vandeninės terpės tankio padidinimui, gali būti įnešama į ląstelę. Difuzijai analogiško pernašos modelio pritaikymas $N(t)/N_0$ atitinka stebimą ląstelių skaičiaus kitimą.

Reikšminiai žodžiai: mikroskysčiai, ląstelė, išsėdimas, tankio gradientas, difuzija.

Literatūra

1. W. D. Hill, R.R. Rothfus and K. Li, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 3, pp. 561-583. Pergamon/Elsevier, 1977.
2. E. Ponder, "On Sedimentation and Rouleaux Formation- I", *Quart. Journ. Exper. Physiol.*, 1925.

Ce²⁺ jono energijos spektro ir radiacinių šuolių teorinis tyrimas

Theoretical study of energy spectra and radiative transitions of Ce²⁺ ion

Pavel Rynkun¹, Gediminas Gaigalas¹, Laima Kitovienė¹, Masaomi Tanaka^{2,3}, Daiji Kato^{4,5}, and Mantas Kučinskas⁶

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Astronomical Institute, Tohoku University, Aoba, Sendai 980-8578, Japan

³Division for the Establishment of Frontier Sciences, Organization for Advanced Studies, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan

⁴National Institute for Fusion Science, 322-6 Oroshi-cho, Toki 509-5292, Japan

⁵Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University, Kasuga, Fukuoka 816-8580, Japan

⁶Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

pavel.rynkun@tfai.vu.lt

In this work, *ab-initio* atomic calculations for Ce²⁺ were performed. Ce²⁺ is one of the important candidates to produce strong absorption features in near-infrared spectra of kilonova, electromagnetic emission from neutron star mergers. GRASP2018 [1] package, based on the multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock and relativistic configuration interaction methods, was used to compute energy levels of the ground [Kr]4d¹⁰5s²5p⁶4f² and first excited [Kr]4d¹⁰5s²5p⁶4f5d configurations and transition data. Energy levels were compared with recommended values from the NIST Atomic Spectra Database (NIST ASD) [2] and other available works.

The influence of the correlations was studied by opening the closed shells step by step for substitutions. To reduce the computational resources, the importance of the correlations of the closed shells was studied for the levels of the ground configurations with $J = 4$ (since it is the ground level) and the levels of the first excited configuration with $J = 3$. From the analysis it follows that correlations from 4d shells are important. By opening the 4p shell the energies of the ground configuration almost do not change; the energies of the first excited configuration are too high. Restricting the substitutions from 4p and 4s shells (allowing only single substitutions) improves the agreement with the NIST data. By opening the 3d shell the agreement remains similar.

Fig. 1 presents the comparison of the final results with the NIST ASD and with other theoretical calculations. The differences between present results with NIST ASD for energy levels of two configurations till 12000 cm⁻¹ energy reaches 600 cm⁻¹. The disagreement of other energies reaches 2500 cm⁻¹, and the largest difference (8200 cm⁻¹) is for the level of the ground configuration (4f² ¹S₀). The root-mean-square (rms) deviations obtained for energy levels of the ground configuration from the NIST data are 2732 cm⁻¹ but excluding the level with worst disagreement (4f² ¹S₀), the rms is 1404 cm⁻¹. The rms for the first excited configuration is 618 cm⁻¹.

It should be mentioned that in [3] only some levels of the ground and first excited configurations were studied, in [4] only energy levels of the ground configuration were studied. The differences of other theoretical results with NIST data for most energy levels are similar. The rms for energy levels of the ground configuration by Froese Fischer and Godefroid from the NIST data with

excluded level (4f² ¹S₀) is 1777 cm⁻¹. The rms for energy levels of the ground configuration by Carvajal Gallego et al. [5] from the NIST data with excluded level (4f² ¹S₀) is 1392 cm⁻¹, and 565 cm⁻¹ for the first excited configuration. Levels of the first excited configurations computed by Safronova et al. disagree about 4000 cm⁻¹.

The transition data were also computed and evaluated. The discussion of transition data in details would be presented during the conference.

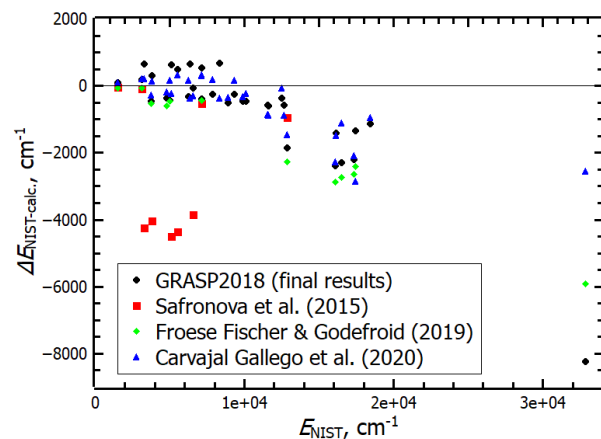


Fig. 1. Differences between NIST ASD energy levels and those of the present GRASP2018, and other calculations (in cm⁻¹)

Keywords: energy levels, transition data

Acknowledgments: This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-LJB-23-1.

References

- [1] C. Froese Fischer, G. Gaigalas, P. Jönsson, and J. Bieroń, *Computer Physics Communications* **237**, 184 (2019).
- [2] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team. 2022, NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2023, July 14]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [3] M. S. Safronova, U. I. Safronova, and C. W. Clark, *Phys. Rev. A* **91**, 022504 (2015).
- [4] C. Froese Fischer, M. R. Godefroid, *Phys. Rev. A* **99**, 032511 (2019).
- [5] H. Carvajal Gallego, P. Palmeri, and P. Quinet, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **501**, 1440 (2020).

Košy triukšmo poveikis kvadratiškai integruojančių ir spaikuojančių neuronų tinklui esant ne-Košy heterogeniškumams

Effect of Cauchy noise on a network of quadratic integrate-and-fire neurons with non-Cauchy heterogeneities

Viktoras Pyragas¹, Kęstutis Pyragas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
viktoras.pyragas@ftmc.lt

Daugelis biologinių sistemų, tokios, kaip smegenys, yra sudarytos iš milžiniško skaičiaus dinaminėse vienetų. Tokių sistemų modeliavimas mikroskopiniame lygyje reikalauja didelių skaičiavimo išteklių. Alternatyvus tyrimo metodas būtų supaprastintų euristinių modelių taikymas grubiam mastelyje. Neuromoksle tokie modeliai žinomi kaip neuroniniai masės modeliai. Jie sėkmingai paaiškina tam tikros klasės reiškinius, tačiau negali teisingai aprašyti sinchronizacijos procesų neuroniniuose tinkluose. Neseniai buvo pasiekti žymūs rezultatai, plėtojant žemos dimensijos modelius, galinčius tinkamai aprašyti kolektyvinę didelio masto neuroninių tinklų dinamiką. Nauja teorija yra grindžiama sinchronizuotų sistemų tyrimu taikant statistinės fizikos metodus. Begalinės dimensijos tinklo termodinaminėje riboje, ši teorija leidžia išvesti tikslią žemos dimensijos suvidurkinto lauko lygčių sistemą iš atskirų neuronų mikroskopinės dinamikos. Šitai išvestos suvidurkinto lauko lygtys buvo pavadintos naujos kartos neuroniniai masės modeliais.

Bendra matematinė idėja naujos kartos modeliams buvo išplėta Otto ir Antonseno (OA) [1]. Jie nustatė, kad be galo didelės neuronų populiacijos globaliai susietų heterogeninių fazinių osciliatorių dinamika konverguoja prie invariantinės žemos dimensijos daugdaros (*angl.* manifold) – OA daugdaros. Buvo gauta redukuota antros eilės paprastųjų diferencialinių lygčių sistema, kuri tiksliai aprašo neuronų populiacijos dinamiką ant šios daugdaros. Vėliau OA metodas buvo pritaikytas Teta neuronų tinklui. [2] darbe buvo išvesta redukuota suvidurkinto lauko lygčių sistema heterogeniniam tarpusavyje sujungtų kvadratiškai integruojančių ir spaikuojančių (*angl.* QIF) neuronų tinklui. QIF ir Teta neuronų modeliai gali būti vienas į kitą suvesti, atliekant kintamųjų pakeitimą [2]. Šie modeliai atstovauja I-os klasės neuronų kanoninėms formoms. QIF neuronams OA daugdara transformuojasi į Lorenco formą [2]. Pastaruoju metu, redukuotos suvidurkinto lauko lygtys buvo gautos daugeliui modifikuotų QIF neuroninių tinklų modelių. Redukcijai supaprastinti, paprastai yra daroma prielaida, kad heterogeniškumas yra pasiskirstęs pagal Košy skirstinį, nors kai kuriose publikacijose suvidurkinto lauko lygtys yra gautos ir ne-Košy heterogeniškumams.

Kadangi triukšmas yra svarbus veiksnys neuroninėse sistemose, OA teorijos praplėtimas triukšmo veikiamiems QIF neuronų tinklams yra aktualus

uždavinys. Deja, šiuo metu nėra tikslios žemos dimensijos redukcijos teorijos QIF neuronų populiacijoms, trikdymoms Gausinio triukšmo, ir kol kas pavyko išplėtoti tikrai apytiksles suvidurkinto lauko teorijas. Tačiau situacija pasikeičia, kai triukšmas yra ne Gausinis, o Košy. Pastarose publikacijose buvo parodyta, kad tiksli žemos dimensijos redukcija gali būti pritaikyta Kuramoto osciliatoriams, trikdymams baltojo Košy triukšmo. Tuomet gautos tikslios suvidurkinto lauko lygtys QIF neuronų tinklui, veikiamam heterogeninių pagal Košy pasiskirstysiomis srovėms, ir baltajam Košy triukšmui. Šiose publikacijose parodyta, kad baltas Košy triukšmas ir pagal Košy pasiskirstysios heterogeninės srovės turi vienodą poveikį neuronų tinklo makroskopiniam elgesiui. Makroskopiniame lygyje kokybiškai panašūs reiškiniai tarp triukšmo ir heterogeniškumo buvo stebimi, kai triukšmas buvo Gausinis, o heterogeniškumo skirstinys - Košy. Kyla natūralus klausimas: ar yra heterogeniškumo bei triukšmo poveikiai kokybiškai panašūs, nepaisant jų statistikos?

Čia mes tiriamo QIF neuronų tinklo dinamiką, kai triukšmas yra baltas ir pasiskirstęs pagal Košy skirstinį, o heterogeninės srovės yra pasiskirstysios pagal ne-Košy skirstinius [3]. Nagrinėjame du neheterogeniškumo tipus, kuriuos aprašo dvi skirstinių šeimos: q-Gauso [4] ir plokštieji skirstiniai. Abiem atvejams išvedame tiksliai suvidurkinto lauko lygtis, ir parodome, kad triukšmas ir heterogeniškumas gali sąlygoti skirtingus poveikius kolektyvinei tinklo dinamikai.

Reikšminiai žodžiai: triukšmo veikiami neuroniniai tinklai, suvidurkinto lauko redukcija, OA pakeitimas, kvadratiškai integruojantys ir spaikuojuantys neuronai, bifurkacinė analizė.

Literatūra

- [1] E. Ott, T.M. Antonsen, Chaos, Interdiscip. J. Nonlinear Sci. **18**(3), 037113 (2008).
- [2] E. Montbrió, D. Pazó, A. Roxin, Phys. Rev. X **5**, 021028 (2015).
- [3] V. Pyragas and K. Pyragas, Phys. Lett. A **480**C, 128972 (2023).
- [4] V. Pyragas, K. Pyragas, Phys. Rev. E **105**, 044402 (2022).

Didelės skvarbos medžiagų matavimų metodika mikrobangų intervale

Determination the ϵ' , ϵ'' of materials with high permittivity values in microwave range

Olga Suvorova¹, Alexander Barannik², Irina Protsenko², Artem Plyuchsh¹, Juras Banys¹

¹Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 9, III bld., Vilnius, LT-10222

²Institute for Radiophysics and Electronics, Akademika Proskury st., 12, Kharkiv, 61085

o.a.suvorova@gmail.com

Advantages in computer science and mathematical methods bring us a family of electromagnetic software able to analyze the behavior of many electronic components. The aim of this communication is to verify how commercial solvers can extract dielectric permittivity of a sample of high permittivity materials, e.g., ferroelectric materials. For measurements we applied two methods.

The first type of measurements is the following: a sample of ferroelectrics of appropriate size were placed in rectangular waveguide, then we measured set of S - parameters by network analyzer. Then by digital model designed in Ansys HFSS or Comsol Multiphysics, we calculated S - parameters which are corresponded to measured ones.

For exact extraction of ϵ' , ϵ'' from S parameters, we start the iterative process of tuning of every simulated $S(\epsilon', \epsilon'')$ to a measured S - parameter in a way that

$$\|S_{ij}^{\text{measured}} - S_{ij}^{\text{calculated}}\| \leq \text{tolerance} \quad (1)$$

We found, that in many cases due to the oscillating behavior of functions $S(\epsilon', \epsilon'')$ direct methods of tuning, ex. Newton- Raphson method, Simplex method does not work. Instead of that we look for local minimums of

$$\min \|S_{ij}^{\text{measured}} - S_{ij}^{\text{calculated}}\|_{L2} \quad (2)$$

by methods without derivative, e.g. search based ones [1].

The approach has been tested, and then it has been used for extraction of ϵ' , ϵ'' of samples with unknown permittivity. We extracted ϵ' , ϵ'' of a sample of material BT-0.1CF (Table 1). Reflection |R| and transmission |T| coefficients were measured in 25-40 GHz band.

Table 1. Extracted from |R| and |T| coefficients ϵ' , ϵ'' values of and its error. Sample sizes are 0.08x0.11 mm.

F(GHz)	ϵ'	ϵ''	error(%)
26.53	447	234	4
27.68	442	233	3
29.74	432	210	4.1
30.64	415	206	4.5
31.58	401	168	5
33.02	378	155	0.9
35.35	314	99	1.7

In the second approach we put a sample in close proximity of sapphire semi-optical resonator, where the sample can perturb EM field radiated by resonator [2]. Earlier this method was applied for determination of complex permittivity of liquids and graphene films [2-3]. Resonator has been made from synthetic sapphire. Material NBT-0.3BT had the form of thin cylinder with diameter 17.6 mm and high 3.2 mm. We measured the resonance response of empty resonator, then we determined frequency shift ΔF and value of quality factor ΔQ of resonator loaded by sample. These parameters were measured at chosen frequency 30.32 GHz at H₉₁₁ mode. By tuning of simulated ΔF and ΔQ to measured ones we estimated the ϵ' , ϵ'' of the sample.

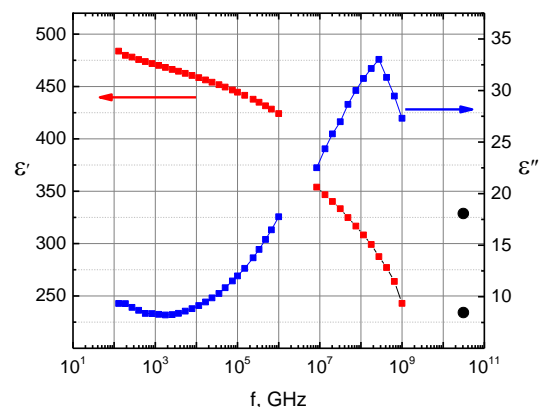


Fig.1. Extracted ϵ' , ϵ'' values from measured parameters by waveguide (curves, [4]) and by sapphire resonator (black points, $\epsilon' = 234$ $\epsilon'' = 18$).

Key words: dielectric permittivity, numerical simulation, ferroelectrics.

Literature

- [1] DR Kincaid, EW Cheney. Numerical analysis: mathematics of scientific computing, (2009).
- [2] A. Gubin, A. Barannik, N. Cherpak, I. Protsenko, S. Pud, A. Offenhäuser, S. Vitusevich, IEEE Trans. MTT **63**(6):1-7 (2015).
- [3] A. Barannik; N. Cherpak; I. Protsenko; A. Gubin; D. Kireev, S. Vitusevich, Appl. Phys. Lett. **113**, 094102 (2018).
- [4] Dmitrius Tonkovic, (*Na_{0.5}Bi_{0.5}*)TiO₃-*x*BaTiMn_{0.01}O₃ kietojo tirpalo placiajuoste dielektrine spektroskopija, (Bakalauro tezis, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius, 2023).

Užšaldytų modų artinys klasikinėse sistemose

Mode-freezing approximation in classical systems

Justina Vaičaitytė^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Leonas Valkūnas^{1,2}¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

justina.vaicaityte@ff.stud.vu.lt

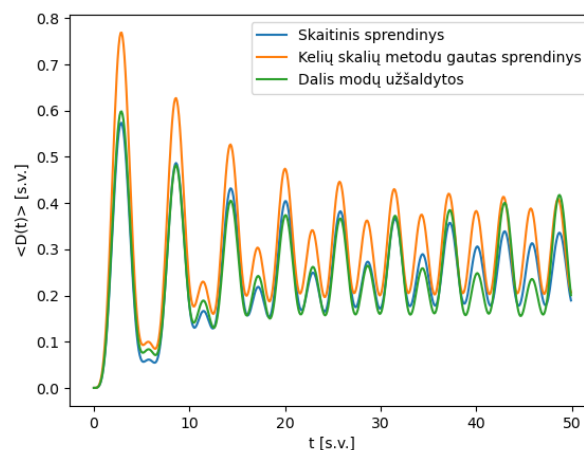
Artutiniai metodai yra svarbi matematikos ir fizikos dalis, naudojama sprendžiant įvairius uždavinius ir lygtis. Vienas iš tokių metodų privalumų yra tai, kad jie gali būti pritaikyti įvairiems uždaviniams spręsti, net jei jų analitiniai sprendiniai yra sudėtingi arba iš viso neegzistuoja. Todėl artutinių metodų taikymas yra plačiai paplitęs įvairiose mokslo srityse, ypač kvantinėje ir klasikinėje mechanikoje. Vis dėlto, dažnai tokie metodai nėra pakankamai tikslūs, todėl paprastai ieškoma įvairių alternatyvų klasikinėms trikdžių teorijos metodams siekiant patikslinti sprendinius. Fizikoje itin plačiai nagrinėjamos klasikinės ir kvantinės osciliatorių sistemos. Tokiu atveju alternatyvus artutinis metodas galėtų būti užšaldytų modų artinys. Nustatyta, jog nagrinėjant atvirąsias kvantines sistemas užšaldžius lėtus aplinkos laisvės laipsnius ir pritaikius įprastą Redfildo teoriją kitiems laisvės laipsniams rezultatų tikslumas ženkliai išauga. Parodyta, jog toks artinys ne tik padidina rezultatų tikslumą nemarkoviniuose režimuose, bet ir iš esmės turi panašias skaičiavimo sąnaudas [1]. Maža to, užšaldytų modų artinį galima pritaikyti ne tik kvantinėms, bet ir klasikinėms sistemoms.

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

apibrėžta tokio pavidalo spektrinio tankio funkcija:

$$I(\omega) = \frac{\lambda\pi\omega}{\omega_c} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right), \quad (1)$$

čia λ —reorganizacijos energija, apibrėžianti suminių sistemos osciliatoriaus sąveikos su aplinkos osciliatoriais stiprį, ω —dažnis, ω_c —ribinis dažnis. Buvo lyginamas užšaldytų modų artinys su tikslu skaitiniu sprendiniu bei trikdžių teorijos sprendiniu keičiant parametrų vertes plačiuose intervaluose. Nustatyta, jog užšaldytų modų artinys gali ženkliai patikslinti trikdžių teorijos sprendinį įvairioms λ vertėms. Patikslinto sprendinio pavyzdys yra pateikiamas 1 pav.



1 pav.: Užšaldytų modų artinio palyginimas su tikslu skaitiniu sprendiniu ir kelių skalių metodo sprendiniu. Čia $\lambda = 0.1$, $\omega_c = 0.1$, užšaldyta 8% modų.

Reikšminiai žodžiai: užšaldytos modos, trikdžių teorija, klasikinė osciliatorių sistema.

Literatūra

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



Lietuvos
Nacionalinė
Fizikos
Konferencija

STENDINIAI PRANEŠIMAI

SESIJA 2

Vandens kiekio naftos dujinėje ir skystoje būsenose įvertinimas terahercų laikinės spektroskopijos metodu.

Evaluation of water content in gaseous and liquid phases of petroleum using terahertz time-domain spectroscopy.

Ihor Krapivin, Ramūnas Adomavičius

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

Ihor.Krapivin@ftmc.lt

Recent advancements have seen the application of terahertz time-domain spectroscopy in measuring water content in crude oil and petrochemicals [1,2]. The accuracy of this method rivals the distillation technique but boasts a much faster measurement speed. In this study, we delve deeper into the potential of the terahertz time-domain spectroscopy technique for gauging water content in oil. To ensure accuracy, we supplemented absorption measurements with refractive index studies. Furthermore, we introduced a novel methodology for assessing the gas phase of petroleum using terahertz pulses (Fig.1).

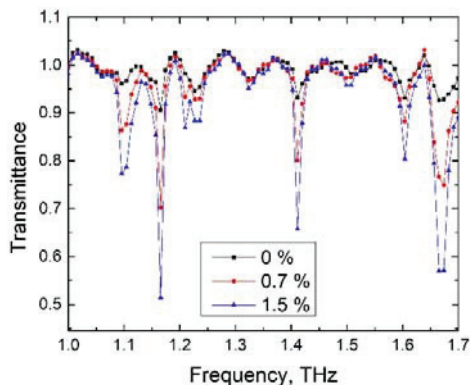


Fig. 1. Transmittance of gaseous petroleum samples to terahertz radiation. Higher water concentration leads to more intense water vapor absorption lines

Oil samples underwent measurements in a transmission geometry setup. Within the range studied, a linear correlation between the terahertz pulse amplitude and the water content in petroleum was evident (Fig. 2). The absorption coefficient of petroleum samples ascended with frequency, yet the imaginary part of the complex refractive index remained unaltered by frequency for oils with low water content. However, for samples with higher water content, a decline in the refractive index was noted with increasing frequency. The real part of the refractive index is influenced by frequency, but its magnitude is mostly unaffected by the water content. In contrast, the magnitude of the imaginary part of the refractive index scales with water content.

Our findings underscore the versatility of the terahertz time-domain spectroscopy technique, marking

its potential for both laboratory assessments and real-time monitoring in oil production and transportation facilities.

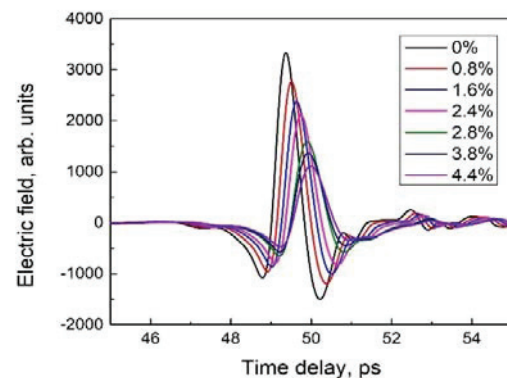


Fig. 2. THz pulses passed through liquid petroleum samples. Higher amplitude terahertz pulses pass through samples with lower water concentration.

Reikšminiai žodžiai:

terahercų spektroskopija, teraherciniai impulsai.

Literature

- [1] M. Yin, S. Tang and M. Tong, Applied Spectroscopy Reviews, v.5, 379-396 (2016).
- [2] Z. Jun, R. Xin, L. Xiaoming, L. Tao, Z. Lin, Z. Yanshun, Z. Zheng, AIP Advances 9, 035346 (2019).

Netiesinė terahercų spinduliuotės detekcija su grafeno lauko tranzistoriniais detektoriais

Non-linear terahertz detection with graphene field-effect transistor terahertz detectors

Domantas Vizbaras¹, Kęstutis Ikamas^{1,2}, Ignas Nevinskas³, A. A. Generalov⁴, Alvydas Lisauskas¹

¹Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus Universitetas, LT-10257, Vilnius, Lietuva

²Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo 5A, 10322, Vilnius, Lietuva

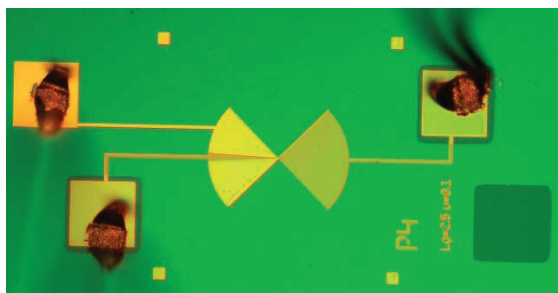
³Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

⁴VTT Technical Research Centre of Finland LTD, P.O. Box 1000, FI-02044 VTT

domantas.vizbaras@ff.vu.lt

Viena iš naujų, terahercų (THz) srityje dideles perspektyvas turinčių medžiagų – vieno atomų sluoksnio anglies alotropas – grafenas. Literatūroje pademonstruota, kad grafeno tranzistoriuose (GFET) pasiekiamas elektronų judris gali būti labai aukštas ($2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$), o jų sotes greitis yra artimas Fermi greičiui (10^6 m/s) [1]. Taip pat grafenas, nors ir neturintis draustinių energijų tarpo, pasižymi stipriu netiesiškumu infraraudonos ir optinės spinduliuočių diapazonuose. Šis reiškinys siejamas su tarpjuostinių elektronų dinamika [2]. Literatūroje pademonstruota net 7-os harmonikos generacija, kai grafeno sluoksnis yra apšvitinamas intensyvia THz spinduliuote [3]. Šiame darbe parodyta, kad stiprų elektrinio atsako į THz spinduliuotę netiesiškumo pasireiškimą galima stebėti ir grafeno lauko tranzistoriuose.

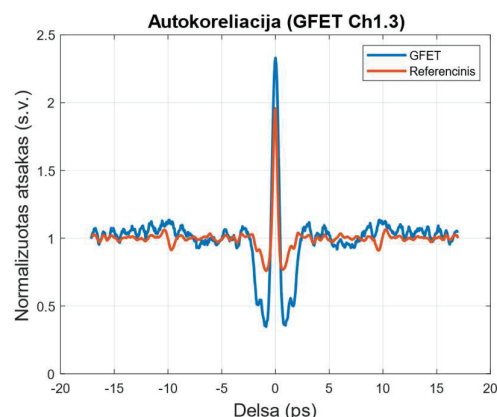
Tirtos GFET struktūros pagamintos iš vienasluoksnio, nusodinto iš cheminės garų fazės, grafeno. Elektromagnetinės sąveikos plačiajuostiškumui užtikrinti įdiegtos peteliškės tipo antenos (jų skersmuo 240 μm , 1 pav.). Detektoriai priklijuoti prie laikiklių (PCB), kuriuose paliktas Si langas, kad būtų galima realizuoti THz spinduliuotės įvedimą iš padėklo pusės. Spinduliuotės fokusavimui į anteną naudojamas 6,8 mm aukščio ir 12 mm skersmens hiperhemisferinis Si lęšis. Detektorių darbinės įtampos parinkimui ir detektuoto signalo stiprinimui naudota savadarbė maitinimo plokštė su žematriukšmiu stiprintuvu. Daugiau informacijos apie grafeno detektorius galima rasti darbe [4].



1 pav. GFET THz detektorius.

Ekspimento metu detektorius buvo apšvitinamas trumpais THz impulsais. Jie generuoti raudonos spalvos (780 nm), 80 fs trukmės lazeriu žadinamos žematemperatūrio GaAs fotoantenos. Atsako spektro matavimams naudotas Michelson'o interferometras. Referenciniai matavimai padaryti su „Tydex“ Golėjaus narveliu.

Netiesinio atsako grafeno detektoriuose matavimai atlikti keičiant įtaiso darbo tašką – tranzistoriaus užtūros įtampą, ir THz impulsų galią. Vienas iš gautų rezultatų pateiktas 2-ame paveiksle. Interferograma demonstruoja didesnį nei du kartus signalo padidėjimą ties nuline delsa, bei netiesinius iškraipymus šoniniuose minimumuose. Tai rodo, kad grafeniniuose įtaisuose pasireiškia ne tik sotinimo, bet ir aukštesnės nei 2 laipsnio momentinio atsako į THz spinduliuotės galią charakteristikos. Tokio paties pobūdžio netiesiškumai stebėti prie kelių tranzistoriaus užtūros įtampų (tiek neigiamų, tiek teigiamų, $\pm 1,5 \text{ V}$ diapazone) ir spinduliuotės galios (antenos įtampa parinkta nuo 20 V iki 100 V intervale). Šis reiškinys gali įtakoti ir aukštesnių harmonikų generaciją, bei būti panaudotas THz spinduliuotei generuoti.



2 pav. Išmatuotos GFET THz detektoriaus (ties 1,4 V užtūros įtampa) ir Golėjaus narvelio atsako į THz impulsą (antenos įtampa – 64 V) interferogramos.

Reikšminiai žodžiai: grafenas; netiesiniai reiškiniai; terahercai; jutikliai; lauko tranzistoriai

Literatūra

- [1] J.-H. Chen et al., Nat Nanotechnol, 3, 4, 2008.
- [2] H. A. Hafez et al., Advanced Optical Materials, t. 8, nr. 3, 2019.
- [3] H. A. Hafez et al., Nature, t. 561, nr. 7724, 2022
- [4] D. Vizbaras, et al., LPJ, vol. 62, no. 4, Dec. 2022.

250 GHz detektoriaus apertūros didinimas panaudojant 3x3 masyvą

Enhancement of 250 GHz detector aperture using a 3x3 array

Kęstutis Ikamas^{1,3}, Dmytro B. But², Domantas Vizbaras¹, Cezary Kołaciński², Alvydas Lisauskas¹

¹Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus Universitetas, LT-10257, Vilnius, Lietuva

²Center for Terahertz Research and Applications, Institute of High Pressure Physics PAS, 01-142 Warsaw, Poland

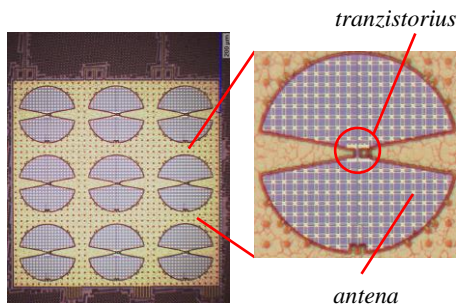
³Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo 5A, 10322, Vilnius, Lietuva

kestutis.ikamas@ff.vu.lt

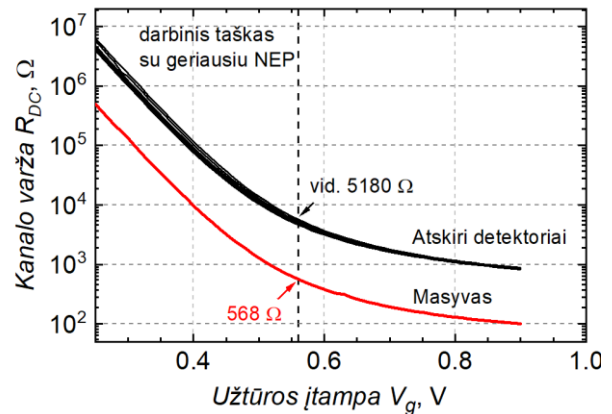
Per paskutiniuosius du dešimtmečius stebimas vis didėjantis terahercų (THz) dažnių ruože veikiančių įtaisų plėtojimo intensyvumas bei jų pritaikymas įvairiose srityse, tokiose kaip vaizdinimas, medicina ar saugumas [1]-[2]. Per šį laikotarpį pasiekta pažanga būtų neįmanoma be naujų kompaktiškų, pigių ir greitų komponentų, kurie leidžia efektyviai valdyti THz spinduliuotę. Komplementari metalo oksido-puslaidininkio (KMOP) technologija įgalina tokių komponentų kūrimą. Vienas didžiausių šios silicio technologijos privalumų – galimybė masiškai gaminti didelius detektorių ir šaltinių masyvus. Jie gali būti naudojami THz vaizdinimo sistemose, pavyzdžiui, didelės spartos realaus laiko kameros [3] arba artimo lauko vaizdavimo sistemose [4]. Šiame darbe pristatomas 3x3 elementų masyvas, kurio pagrindinė sudedamoji dalis – KMOP lauko tranzistorius su paviršine antena.

Devynių detektorių (3x3) masyvas pagamintas naudojant 180 nm silicio KMOP technologinį procesą. Kiekvienas detektorius yra sudarytas iš vieno 180 nm ilgio ir 2 μm pločio lauko tranzistoriaus, prijungto prie viršutiniuose metalo sluoksniuose suformuotos paviršinės plyšio tipo antenos (žr. 1 pav.). Dėl santykinai didelės silicio padėklo dielektrinės skvarbos, ši antena turi geriausią efektyvumą, kai elektromagnetinė spinduliuotė į ją patenka iš padėklo pusės. Detektorių gardelės periodas - 180 μm. Viso masyvo plotas - 540×540 μm². Tiek masyvas, tiek atskiri elementai optimizuoti 250 GHz dažniui [5]. Geresniam THz spinduliuotės surinkimui naudotas 6,8 mm aukščio ir 12 mm skersmens Si hiperhemisferinis lęšis, priglautas prie įtaiso iš padėklo pusės.

Lygiagriačiai sujungus matricos elementų išėjimus, bendra įtaiso varža sumažėja maždaug devynis kartus lyginant su vienu detektoriumi (2 pav.). Dėl to sumažėja įtampos triukšmas ir padidėja moduliacijos dažninės juostos plotis naudojant tą pačią nuskaitymo elektroniką.



1 pav. Detektorių matricos (kairėje) ir atskiro detektoriaus (dešinėje) nuotraukos



2 pav. Detektorių masyvo ir jį sudarančių atskirų elementų kanalo varžos priklausomybė nuo užtūros įtampos. Punktvyrine linija pažymėtas darbinis taškas, kuriame įtaisų NEP yra mažiausias

Palyginimui, išmatuota masyvo efektinė triukšmo galia (NEP) siekė 25 pW/√Hz, tuo tarpu, kai atskiro detektoriaus NEP buvo tik truputį mažesnis - 24 pW/√Hz, nors jautris buvo ženkliai didesnis (387 V/W – pavienio detektoriaus, 120 V/W - masyvo).

Dėl didelio jautrio ir žemo NEP, pasiūlytą masyvą galima sėkmingai taikyti įvairiose sistemose, jautriose THz pluošto fokusavimui, pavyzdžiui, THz artimojo lauko mikroskopijoje, duomenų ryšio sistemose. Visi masyvo elementai dalyvauja renkant THz spinduliuotę, todėl jis turi didesnę santykinę apertūrą lyginant su pavieniu detektoriumi. Atlikti matavimai, kuriuose buvo keičiamas atstumas tarp įtaiso ir fokusuojančio veidrodžio, rodo, kad matrica yra mažiau jautri atstumui iki židinio taško: atsako pusplotis (angl. FWHM) z-ašies kryptimi 3 mm didesnis. Krintančio į masyvą THz pluošto matavimai, nuskaitant atskirų elementų signalus, parodė, kad net ir nedidelė matrica gali būti naudojama spinduliuotės profilio Si lęšio viduje įvertinimui.

Reikšminiai žodžiai: teraherciai, detektorių masyvas, terahercų detektorius, CMOS

Literatūra

- [1] D. M. Mittleman, Opt. Express, 26, 8, pp. 9417–9431, Apr 2018.
- [2] G. Valušis, et. al. Sensors, 21, 12, p. 4092, Jan 2021.
- [3] J. Zdanevicius, et. al. J. Infrared Millim. Terahertz Waves, 36, 10, pp. 986–997, Oct 2015.
- [4] U. R. Pfeiffer, et. al. IEEE Microwave Magazine, 20, 9, pp. 32–46, 2019.
- [5] K. Ikamas, et. al., in 2022 47th IRMMW-THz. IEEE, Aug 2022.

Nuotėkio srovės tyrimas InGaN šviestuke dalyvaujant fononams

Research of phonon-assisted leakage current of InGaN light emitting diode

Tomas Grinys¹, Kristupas Karčemarskas¹, Kristupas Razas¹, Virginijus Bukauskas²

¹Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

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

tomas.grinys@tmi.vu.lt

Dauguma galio nitrido GaN epitaksinių struktūrų, taikomų šiuolaikiniams optoelektroniniams prietaisams, yra auginami ant pagrindų, tokių kaip safyras, silicis ar SiC. Šių pagrindų terminio plėtimosi koeficientas bei kristalinė gardelė nėra suderinti su formuojamu GaN sluoksniu, todėl kristalo viduje susidaro tūriniai defektai. Tūriniai defektai, tokie kaip sraigtinės dislokacijos gali skliti išilgai sluoksnio, sukurdami lokalizuotas krūvininkų būsenas. Manoma, kad šie defektai yra atsakingi už nuotėkio srovę p-n sandūros erdvinio krūvio srityje. Tyrimai rodo, kad krūvininkų transportavimo mechanizme dominuoja tuneliavimas per galias defektų būsenas draustinėje juostoje. Nuotėkio srovės mechanizmui analizuoti gali būti taikomi tiek atgalinės, tiek tiesioginės voltamperinės charakteristikos priklausomybės nuo temperatūros matavimai. P. Pipinio ir kt. [1] darbe pristatytas tuneliavimo modelis, kuriame yra įskaityta krūvininkų sąveika su fononais. Šio modelio skaičiavimai gana neblogai sutapo su galio nitrido Šotkio diodo struktūros atgalinėmis voltamperinėmis charakteristikomis plačiame temperatūrų diapazone.

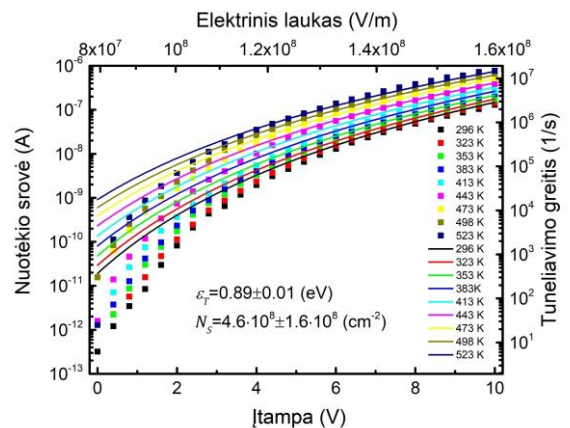
Savo darbe mes pritaikėme tuneliavimo modelį sudėtingesnei šviestuko struktūrai. Pirmiausia mes atlikome Holo matavimus ir nustatėme atskirų GaN sluoksnių, legiruočių n-tipo bei p-tipo priemaišomis, krūvininkų koncentraciją. Šie sluoksniai buvo naudojami kalibravimui cheminio nusodinimo iš metalo-organikos garų fazės metodu auginant visą šviestuko struktūrą. Vėliau mes atlikome voltafaradinės charakteristikos matavimus, siekdami nustatyti auginimo metu injekuotų priemaišų koncentraciją aktyviame šviesos diodo sluoksnyje. Visų šių matavimų tikslas buvo įvertinti elektrinio lauko pasiskirstymą p-n sandūros erdvinio krūvio srityje, bei rasti jo vidutinę vertę. Elektrinio lauko pasiskirstymą modeliavome skaitmeniniu būdu sprendami Puasono lygį. Gavome, kad suformuotoje šviestuko struktūroje elektrinio lauko pasiskirstymą galima aproksimuoti p-n sandūros elektrinio lauko pasiskirstymu.

Tuneliavimo modelyje yra naudojama vidutinė elektrinio lauko vertė. Mūsų atveju vidutinė elektrinio lauko vertė buvo apskaičiuota nustačius p-n sandūros erdvinio krūvio srities ilgį remiantis Šoklio teorija. Šios nuskurdintos srities priklausomybė nuo atgalinės įtampos neblogai sutapo su eksperimentiniais rezultatais gautais iš voltafaradinės charakteristikos matavimų, ypač prie didesnių nei 5 V įtampų. Skaičiuojant vidutinio elektrinio lauko vertę reikia žinoti potencialo skirtumą p-n sandūroje. Esant neigiamai įtampai potencialo vertė yra lygi kontaktinio potencialo skirtumo ir pridėtos įtampos

sumai ($U_k + U$). Darbe mes laikėme, kad kontaktinis potencialų skirtumas nekinta ir yra lygus 3,3 V. Reikėtų pastebėti, kad įvedus šias aproksimacijas elektrinio lauko vertė tampa proporcinga potencialo skirtumui p-n sandūroje: $E \sim \sqrt{U_k + U}$.

Kaip matyti iš 1 pav. pateiktų voltamperinių šviestuko charakteristikų, tuneliavimo modelis neblogai aprašo nuotėkių sroves prie didesnių nei 5 V įtampų. Esant mažesnėms įtampoms, stebimas nuokrypis nuo modelio. Paskaičiavome, kad tuneliavimo barjero ilgis 5-10 V intervale sumažėja nuo 5,3 iki 4,5 nm. Šios vertės yra pakankamos, kad vyktų tuneliavimo procesas. Krintant įtampai tuneliavimo ilgis didėja ir šis procesas tampa mažai tikėtinas.

Sutapatinant teorines kreives su eksperimentiniais rezultatais buvo varijuojama dviem parametrais būsenų tankiu N_s ir barjero aukščiu ϵ_T . Mes nustatėme, kad defektų būsenų tankis, gautas iš atgalinės voltamperinės charakteristikos skirtingose temperatūrose, gali būti tiesiogiai susijęs su sraigčių dislokacijų tankiu, nes jų vertės neblogai sutampa. Sraigčių dislokacijų tankis darbe buvo įvertintas šalia pagaminto diodo struktūros taikant katodoliuminescenciją.



1 pav. InGaN šviestuko agalinių voltamperinių charakteristikų priklausomybė nuo temperatūros. Eksperimentiniai duomenys pavaizduoti taškais, teoriniai rezultatai - išsinešimis kreivėmis. Laikėme, kad krūvininkų tuneliavimo procese vyrauja sąveika su optiniais fononai, kurių energija 0,07eV.

Reikšminiai žodžiai: nuotėkio srovė, InGaN šviestukas, fononai.

Literatūra

[1] P. Pipinys and V. Lapeika, J. Appl. Phys. 99, 093709 (2006).

Moduliavimas amplitudės ir fazės THz spektrų su 2D plazmonais AlGaIn/GaN heterostrukčiūrose veikiamose nuolatine įtampa

Amplitude and Phase THz Spectra Modulation by 2D Plasmons in AlGaIn/GaN Heterostructures under Applied dc Bias

Daniil Pashnev¹, Justinas Jorudas¹, Liudvikas Subačius¹, Vytautas Janonis¹

Andrzej Urbanowicz¹, and Irmantas Kašalynas¹

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

daniil.pashnev@ftmc.lt

It is assumed that complementary to graphene, the nitride semiconductors possess unrevealed potential in the THz range suitable for the development of room-temperature plasmonic devices. [1], [2]. Resonant excitation of two-dimensional (2D) plasmons in AlGaIn/GaN high electron mobility transistor (HEMT) structures were observed from cryogenic up to room temperatures [3]. Plasmon resonant frequency was found to be proportional to the square root of electron density which is controlled in such devices by external DC voltage applied to gate electrodes [4].

In this work, we investigated modulation of amplitude and phase spectra of 2D plasmons in AlGaIn/GaN HEMT structures under DC voltage applied either between gate electrodes (G) and source (S) or between drain (D) and S terminals of grating-coupled plasmonic sample. Time-domain spectroscopy (TDS) system was used to measure THz pulse transmission through the sample at liquid nitrogen temperature. Grating electrodes were fabricated by using e-beam lithography, making a periodic pattern over an area of 2x2mm². Grating electrodes with 560 nm width and 1020 nm periodicity were sufficient for resonant 2D plasmon excitation at frequency of 1.5 THz [5]. Ohmic contacts to 2D electron gas (2DEG) channel laying under grating were also processed to implement HEMT configuration.

First, THz spectra were measured by applying external DC voltage between G and S/D terminals (both S and D were shortcut). Spectra of amplitude and phase signals are shown in Fig. 1 (a) and (b), respectively. At zero bias, 2D plasmon resonance was at around 1.5 THz frequency, demonstrating peak amplitude of up to 15% and change of phase as large as 10 degrees. When negative or positive voltage of 1V was applied to the G terminal, the 2D plasmon resonance experienced peak shift to 1.33 THz or 1.63 THz frequencies. It is worth to note that amplitude of peak and phase modulation do not change with applied DC voltage. Such large (0.3 THz) peak position modulation was attributed to 50% change of 2DEG density under gate electrodes. Moreover, the modulation of transmission amplitude and phase spectra by applied voltage was also observed in the spectrum ranging below 0.8 THz, which could be modeled by Drude conductivity[6].

Very similar trend of the position shift of 2D plasmon resonance as well as change of Drude conductivity slope was found biasing the plasmonic sample via S and D terminals, without usage of G terminals. Short-pulse-

characterization of plasmonic sample revealed a capacitive-coupling between G and S and D terminals resulting in additional density modulation of gated 2DEG channel in nanosecond time scale. The modulation amplitude was found to be smaller than that for a case of G to S/D biasing, due to number of reasons: (i) charge accumulation on G electrodes, (ii) sufficient leakage currents, (iii) non-uniform internal field distribution.

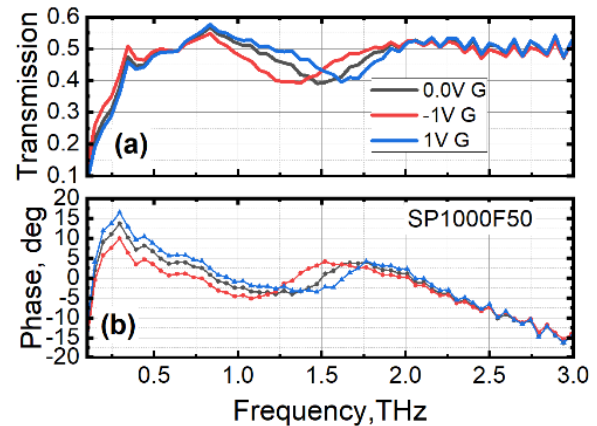


Figure 1. Measured spectra of power (a) and phase (b) transmission through plasmonic AlGaIn/GaN structures with grating gate coupler dc-biased at different voltage.

This work in a frame of “T-HP” project was funded by LMT through the European Regional Development Fund (grant no. 01.2.2-LMT-K-718-03-0096).

Key words: 2D plasmons, THz TDS, amplitude and phase spectra modulation, AlGaIn/GaN heterostructures.

References

- [1] T. Otsuji et al., *Nanophotonics*, **11**(9), 1677 (2022).
- [2] M. S. Shur, *IEEE Sens. J.*, **21**(11), 12752. (2021)
- [3] D. Pashnev et al., *Appl. Phys. Lett.*, **117**(16), 162101, (2020).
- [4] A. V. Muravjov et al., *Appl. Phys. Lett.*, **96**(4), 042105, (2010).
- [5] D. Pashnev et al., *Appl. Phys. Lett.*, **117**(5), 051105, (2020)
- [6] D. Pashnev et al., *IEEE Trans Electron Devices*, **69**(7), 3636, (2022).

Artimosios infraraudonosios srities lazerinių diodų žemo dažnio triukšmo charakteristikos

Low-frequency noise of near-infrared laser diodes

Justinas Glemža¹, Sandra Pralgauskaitė¹, Jonas Matukas¹, Aivaras Špokas², Andrius Bičiūnas², Bronislovas Čechavičius², Evelina Dudutienė², Renata Butkutė²

¹Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

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

sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt

Artimosios infraraudonosios srities lazeriniai diodai plačiai naudojami šviesolaidinėse ir belaidžio ryšio sistemose, jutikliuose mokslo ir medicinos srityse ir kt. [1,2]. Skirtingose srityse naudojamų lazerinių diodų charakteristikoms (spinduliuotės galia, spinduliuotės profilis, modų skaičius ir šuoliai ir kt.) keliami skirtingi reikalavimai. Tačiau tokios ypatybės kaip stabili ir ilgaamžė veika, signalo ir triukšmo santykis yra svarbios visiems lazerinės spinduliuotės šaltiniams. Todėl nuolat ieškoma naujų infraraudonosios srities lazeriniams diodams naudojamų medžiagų ir kvantinių darinių. Šiame darbe pristatome artimosios infraraudonosios srities lazerinių diodų žemo dažnio optinių ir elektrinių fliktuacijų tyrimus plačiame temperatūros intervale. Gauti rezultatai leis nustatyti fizikinius procesus, vykstančius skirtingų medžiagų ir skirtingų kvantinių darinių pagrindu pagamintuose lazeriniuose dioduose. Žemo dažnio triukšmo charakteristikos atskleidžia nestabilaus puslaidininkinių įtaisų veikimo bei jų senėjimo priežastis, leidžia įvertinti puslaidininkiniuose dariniuose esančių defektų (krūvininkų pagavimo centrų) parametrus ir prigimtį.

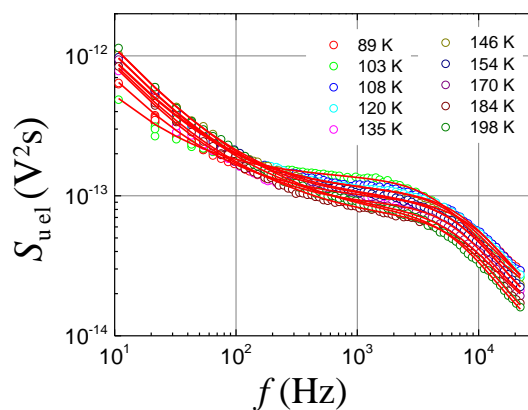
Darbe buvo tirti lazeriniai diodai, kurių aktyvioji sritis sudaryta iš vienos ar daugiau kvantinių duobių. Buvo naudojamos skirtingos aktyviosios srities darinio medžiagos: GaAs, AlGaAs, GaAsBi. Taip pat buvo tiriami lazeriniai diodai su skirtingo profilio kvantinėmis duobėmis: įprastomis stačiakampėmis ir parabolinėmis. Tirtųjų lazerinių diodų slenkstinė srovė buvo (40-120) mA intervale. GaAsBi aktyviosios srities spinduliuotės bangos ilgis – (1030-1060) nm, AlGaAs – (780-827) nm, GaAs – (780-805) nm.

Optinių (išėjusios šviesos galios) ir elektrinių (diodo įtampos) fliktuacijų matavimai buvo atlikti žemo dažnio srityje: nuo 10 Hz iki 20 kHz, temperatūrai kintant intervale nuo 71 K iki 290 K. Atlikus vienalaikius optinio ir elektrinio triukšmo signalo matavimus, apskaičiuotas abipusės koreliacijos tarp šių signalų faktorius. Triukšmo charakteristikų matavimai buvo atlikti specialioje ekranuotoje laboratorijoje, kuri leido išvengti pašalinės elektromagnetinės spinduliuotės.

Tirtųjų lazerinių diodų optinių ir elektrinių fliktuacijų spektrai yra sudaryti iš $1/f^\alpha$ ir Lorencio tipo komponentų. Lorencio tipo spektrai yra būdingi krūvininkų generacijos ir rekombinacijos vyksmams, stebimiems esant tam tikroms lazerių veikimo sąlygoms (temperatūrai ir injekcinei srovei).

Elektrinio triukšmo spektrai buvo gerai aproksimuojami $1/f$, $1/f^\alpha$ ir dviem Lorencio tipo spektrais,

kurių būdingosios relaksacijos trukmės siekė kelis šimtus nanosekundžių (1 pav.). Lorencio tipo spektrą lemia laisvųjų krūvininkų skaičiaus lazerio darinyje fliktuacijos dėl atsitiktinių krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų. Tirtųjų lazerių triukšmo charakteristikose tam tikroje temperatūroje buvo stebimi aktyvūs krūvininkų pagavimo centrai, kurių aktyvacijos energijos vertės buvo 16,0 meV ir 20,4 meV.



1 pav. Lazerinio diodo su GaAs parabolinėmis kvantinėmis duobėmis elektrinio triukšmo įtampos fliktuacijų spektrai esant skirtingai temperatūrai tekant 10 mA injekcinei srovei: taškai – eksperimentiniai rezultatai, išsitiesinė linija – aproksimacija.

Rezultatų analizė atskleidė, kad lazerinių diodų su stačiakampėmis GaAsBi kvantinėmis duobėmis elektrinio triukšmo įtampos spektrinis tankis yra maždaug dviem eilėmis didesnis nei lazerių su GaAs kvantinėmis duobėmis (stačiakampio ar parabolinio profilio). Šis rezultatas rodo, kad arseno keitimas bismutu padidina kvantinio darinio defektingumą. Taip pat buvo pastebėta, kad kvantinės duobės profilis tam įtakos neturi.

Reikšminiai žodžiai: elektrinis triukšmas, fliktuacijos, lazerinis diodas, optinis triukšmas, parabolinės kvantinės duobės, stačiakampės kvantinės duobės.

Literatūra

- [1] Z. Peng, Y. Du, and Y. Ding, *Sensors*, **20**, 681, 2020.
- [2] C. Palade, I. Stavarache, T. Stoica, and M. L. Ciurea, *Sensors*, **20**, 6395, 2020.

Antenomis susieti AlGaIn\GaIn didelio elektronų judrio tranzistoriai THz dažnio bangoms detektuoti

Antenna-coupled AlGaIn\GaIn high electron mobility transistors for detection of THz frequency waves

Miroslav Saniuk^{1,2}, Maxim Moscotin¹, Justinas Jorudas¹ ir Irmantas Kašalynas¹

¹Terahercinės fotonikos laboratorija, Fizinių ir technologijos mokslų centras (FTMC), Saulėtekio al. 3 LT-10257 Vilnius

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

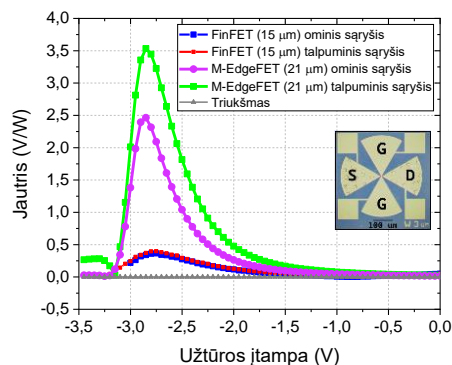
miroslav.saniuk@ftmc.lt

Terahercinio (THz) dažnio elektromagnetinių bangų panaudojimą praktikoje riboja pigių, greitaveikių, kambario temperatūroje veikiančių THz jutiklių stoka. Minėtus reikalavimus gali patenkinti puslaidininkiniai jutikliai, tokie kaip AlGaIn\GaIn didelio elektronų judrio lauko tranzistoriai (HEMT) su integruotomis THz antenomis, literatūroje kartais pavadinami TeraFET. Šie jutikliai gali veikti plačiame dažnių ruože nerezonansiniu THz detektavimo režimu, kuris riboja jautrį, arba rezonansiniu, kuriame tikimasi didesnio TeraFET jautrio [1,2]. Siekiant realizuoti rezonansinio TeraFET veikimą, reikalinga tiksliai apibrėžta geometrija, kur kanalo ilgis yra apribojamas nanometrinių matmenų [3].

Vienas iš būdų, leidžianti sumažinti geometrinius reikalavimus skirtinguose dažniuose, tai elektrinio lauko pagalba kontroliuoti kanalo plotį ir ilgį [4]. Tai įgyvendinama EdgeFET tipo lauko tranzistoriuje, kuriame greta kanalo simetriškai suformuojami planariniai užtūros elektrodai, kurie kitaip nei FinFET topologijoje, pilnai neperdengia kanalo [4]. Tokia lauko elektrodų topologija leidžia kontroliuoti tranzistoriaus kanalo plotį, pridėdam užtūros įtampą prie užtūros elektrodų. Mūsų grupė pasiūlė EdgeFET jutikliuose santakos ir ištakos elektrodus prijungti prie vienos petiliškės-tipo (BT) antenos, taip realizuoti omini ryšį su kanalu, o du simetriškai kanalo atžvilgių išdėstytus užtūros elektrodus prijungti prie kitos BT antenos, kuri per AlGaIn barjerą (dielektrikas) yra atskirta nuo kanalo (talpuminis sąryšis) [5].

Ištirti trijų dydžių EdgeFET'ai, pagaminti iš AlGaIn\GaIn HEMT struktūrų, užaugintų ant SiC padėklo. Tirtuose bandiniuose kanalo plotis buvo vienodas, 3 μm , tačiau skyrėsi kanalo ilgis, kuris buvo 21 μm , 13,5 μm , arba 9 μm . Papildomai buvo modifikuota užtūros elektrodų topologija, užtūra uždengiant nedidelę kanalo dalį (iki 1 μm) iš abiejų pusių. Modifikuotą dizainą pavadino M-EdgeFET, jų jautrio tyrimo rezultatus palyginome su FinFET tipo jutiklių, kuriame užtūros elektrodas pilnai perdengia 15 μm ilgio ir 5 μm pločio kanalą. Matavimai atlikti naudojant tiesiškai poliarizuotą, 150 GHz dažnio, 14 mW galios pluoštelį, sufokusuotą paraboliniu veidrodžio (OAP) pagalba. Skenuojant bandinį OAP židinio plokštumoje buvo išmatuota jautrio priklausomybė nuo užtūros įtampos. M-EdgeFET darbo režimai (ominis ir talpuminis) buvo ištirti tranzistorių su sumontuotu Si lęšiu orientuojant išilgai poliarizacijos vektoriui.

Nustatyta, kad M-EdgeFET'ų jautris padidėjo nuo 0.3 mV/W iki 11 mV/W, sumažinus kanalo ilgį nuo 21 μm iki 9 μm . Be to, tokie jutikliai pasižymėjo apie 40% didesniu jautriu 150 GHz dažnio spinduliuotei kai pasirinkamas talpuminis THz antenos sujungimas su kanalu (žr. 1 pav.). Pastebėta, kad M-EdgeFET jautris yra apie 8 kartus didesnis už analogiškos geometrijos FinFET jautrį.



1 pav. FinFET (15 μm) ir EdgeFET (21 μm) jautrio priklausomybių nuo užtūros įtampos palyginimas, esant ominiui ir talpuminiui jutiklio darbo režimui (sąryšiu). S – ištaka, D – santaka, G – užtūra.

Reikšminiai žodžiai: THz jutikliai, AlGaIn\GaIn HEMT struktūros, TeraFET, EdgeFET, FinFET.

Dėkojame LMT, kuri finansavo T-HP projektą (01.2.2-LMT-K-718-03-0096)

Literatūra

- [1] M. S. Vitiello *et al.*, "Room-Temperature Terahertz Detectors Based on Semiconductor Nanowire Field-Effect Transistors," *Nano Lett.*, 12(1), pp. 96–101 (2012), doi: 10.1021/nl2030486.
- [2] M. Dyakonov and M. Shur. "Detection, mixing, and frequency multiplication of terahertz radiation by two-dimensional electronic fluid." *IEEE transactions on electron devices* 43(3) pp. 380-387 (1996), DOI: 10.1109/16.485650
- [3] S. Boppel *et al.*, "0.25- μm GaIn TeraFETs Optimized as THz Power Detectors and Intensity-Gradient Sensors," *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, 6(2), pp. 348 – 350 (2016), doi: 10.1109/TTHZ.2016.2520202.
- [4] G. Cywinski *et al.*, "Electrically controlled wire-channel GaIn\AlGaIn transistor for terahertz plasma applications," *Appl. Phys. Lett.*, 112(13), p. 133502 (2018), doi: 10.1063/1.5023391.
- [5] M. Moscotin *et al.*, "THz detection optimization of antenna coupled AlGaIn\GaIn high electron mobility transistors," Proc of 48th IRMMW-THz conference, Sep. 17 – Sept. 22, 2023, Montreal, Canada.

Silicon-Based Quarter Waveplates (QPWs) for Wide Range of THz Spectrum

Plataus THz spektrų ruožo Silicio ketvirčio bangos plokštės

Surya Revanth Ayyagari¹, Simonas Indrišiūnas², Daniil Pashnev¹, Vytautas Janonis¹, Andreas Kurt Klein-Schuster³, Guillaume Ducournau⁴ and Irmantas Kašalynas¹

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

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

³Department of Optoelectronics, University Duisburg-Essen, Forsthausweg 2, 47057, Duisburg, Germany

⁴Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), UMR CNRS 8520, Université de Lille 1, 59652, Villeneuve d'Ascq CEDEX, France

surya.revanth@ftmc.lt

Critical need of reduced complexity waveplates and phase retarders developed to manipulate the polarization state of light is ever-increasing process in the fields of optical imaging, spectroscopy and communication [1]. Waveplates introduce a controlled phase delay between two orthogonal polarization components, enabling modulation of EM wave properties. The main feature that exhibits a phase delay between two orthogonal polarization components in these optical devices is called birefringence. Artificial birefringence can be created either by producing electromagnetic structures or by creating subwavelength gratings which makes the material to obtain high anisotropy because of the spatial asymmetry of structures[2][3].

In this work we developed a monolayer-dielectric-based silicon grating waveplates for operation as quarter waveplate (QWP) in wide frequency range from 0.3 THz to 0.5 THz. In addition, the proposed Si waveplates exhibits anti-reflective behavior with the inclination of grating walls along the Transverse Electric (TE) mode by reducing the reflection losses caused by Silicon-air interfaces. The phase retardance of $90^\circ \pm 10^\circ$ between orthogonal Transverse Magnetic (TM) and TE polarizations within operational bandwidth of ~ 200 GHz was confirmed both experimentally and numerically.

Three samples were designed and fabricated of a subwavelength periodic silicon-air interfaces with a period of $p = 100 \mu\text{m}$ and the ridge height $g = 50, 100,$ and $200 \mu\text{m}$, i.e the height of grating ridge from the groove on top of a HRFZ-Si silicon wafer with a overall thickness of $t = 250 \mu\text{m}$. For data discussion, a TM (TE) polarization was oriented perpendicularly (parallel) to grating ridges as it is shown in Fig.1 inset. The Finite Difference Time Domain (FDTD) simulations and THz Time Domain spectroscopy (TDS) were used to develop and assess the performance via analysis of waveplate transmission and phase spectra under varying conditions.

Direct laser ablation (DLA) was employed to fabricated the three grating samples on Si wafer having different depth and shape of the ridges. The transmission spectra of gratings with $g = 50, 100,$ and $200 \mu\text{m}$ were measured by THz-TDs measurements. Phase spectra are shown in Fig.1. Among three samples, the sample with ridge height of $200 \mu\text{m}$ showed a clear plateau region at

level of $90^\circ \pm 10^\circ$ for a bandwidth of ~ 200 GHz centered at frequency of 0.4 THz. All experimental spectra were numerically modeled to confirm QWP performance with a good accuracy and possibility to scale grating ridges in order to change the operation frequency in THz range.

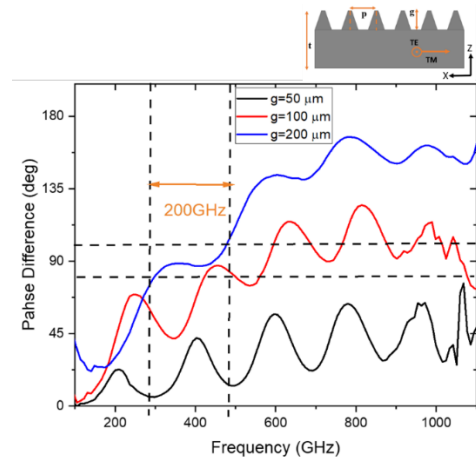


Fig.1. Phase spectra of fabricated Si waveplate samples with grating ridge height of 50, 100, and 200 μm . Inset: schematic representations of waveplate along XZ-axis with a design parameters.

ACKNOWLEDGMENT

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

References

- [1] T. Kürner, D. M. Mittleman, and T. Nagatsuma, Eds., *THz Communications*, vol. 234. Cham: Springer International Publishing, 2022.
- [2] M. Chen, F. Fan, S. T. Xu, and S. J. Chang, "Artificial high birefringence in all-dielectric gradient grating for broadband terahertz waves," *Sci. Rep.*, vol. 6, no. December, pp. 2–11, 2016, doi: 10.1038/srep38562.
- [3] P. Birgit, N. Passilly, J. Pietarinen, P. Laakkonen, M. Kuittinen, and J. Tervo, "Low-cost fabrication of form-birefringent quarter-wave plates Abstract :," vol. 16, no. 21, pp. 2939–2943, 2008.

Purino pagrindu susintetintų D–A ir D–A–D' cheminių fluorescencinių jutiklių lyginamoji analizė

Comparative analysis of purine-based D–A and D–A–D' chemical fluorescence sensors

Kamilė Tulaite¹, Justina Jovaišaitė¹, Irina Novosjolova², Maris Turks², Gediminas Jonušauskas³ and Saulius Juršėnas¹

¹Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 3, Vilnius University, Lithuania

²Institute of Technology of Organic Chemistry, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University, Latvia

³Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine, Bordeaux University, France

kamile.tulaite@ff.vu.lt

Purines as nitrogen heterocycles are starting materials widely available in the natural product pool and are readily accessible for chemical modifications that can alter their photophysical properties dramatically. The electron donating functional groups may be coupled at the C2, C6 or C8 positions of the purine core.

A comprehensive photophysical study of a series of purines, decorated at C2 and C6 positions with different polar fragments was performed. Here we compare fluorescence sensing properties of single branched donor–acceptor (D–A) and double branched donor–acceptor–donor' (D–A–D') systems. Moreover, the inherent property of coordination of metal ions by purines was enriched due to a presence of nearby triazoles used as spacers for donor or acceptor fragments. New molecules present a multiple coordination mode, which makes the assembly of several ligands with one metal cation possible. This property was exploited to create chemical fluorescence sensor utilizing single and two branch configurations.

Single branched D–A compounds demonstrate high fluorescence quantum yield of charge transfer states and pronounced sensitivity to transition metal ion (Fe^{2+} , Cu^+ , Zn^{2+}) quenching. The combination of two chemically identical electron donating branches at the purine C2 and C6 positions allowed the creation of unique D–A–D' systems with two distinct electron transitions from each of the electron donating branches. The latter molecular design results in dual fluorescence in polar aprotic solvents that is altered by the strength of the electron donating properties of the substituents. The close proximity of D–A–D' molecules upon complexation with metal ions enables the intermolecular interbranch photoinduced electron transfer with subsequent complete quenching of a blue side band of dual fluorescence. This allows demonstrating a new concept of a ratiometric fluorescence sensor.

Key words: dual fluorescence, ratiometric fluorescence sensors, metal ion sensing, purine based compounds.

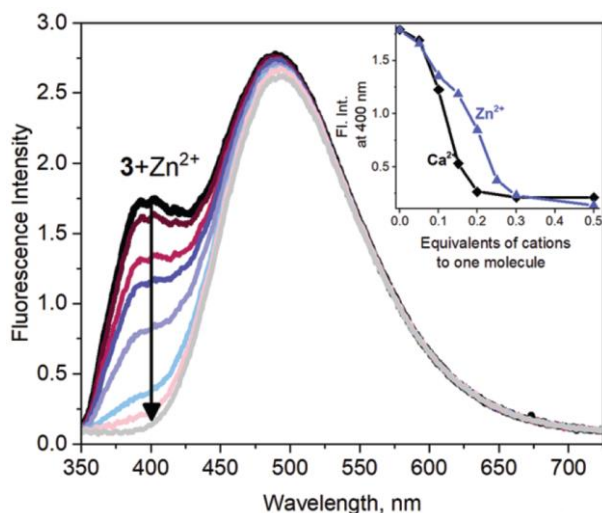


Fig. 1 The fluorescence titration experiment of D–A–D' compound (10^{-5} M) upon addition of Zn^{2+} metal ion from 0 to 5 equivalents in ACN; inset – the dependence of the fluorescence intensity at 400 nm on the equivalents of Ca^{2+} and Zn^{2+} metal ions.

Mikrobangų plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu suformuotų grafeno/n-tipo Si(100) prietaisų fotovoltinės savybės

Photovoltaic properties of directly synthesized graphene/n-Si(100) devices using microwave plasma-enhanced chemical vapor deposition technique

Šarūnas Jankauskas¹, Rimantas Gudaitis¹, Andrius Vasiliauskas¹, Asta Guobienė¹, Šarūnas Meškiniš¹
¹Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas
sarunas.jankauskas@ktu.lt

Grafenas, viena iš 2D nanomedžiagų, pasižyminti išskirtinėmis mechaninėmis, šiluminėmis, elektrinėmis bei optinėmis savybėmis, kurios puikiai dera itin sparčioje elektronikoje, diodų bei tranzistorių technologijose bei saulės elementuose [1]. Būtent fotovoltaiikoje, grafenas galėtų pakeisti metalus, siekiant formuoti Šotkio kontaktus, derinant šią medžiagą su puslaidininkiais, kaip antai, siliciu. Šiuo metu, didžiausias grafeno/silicio saulės elementų galios konversijos efektyvumas siekia 16,61% [2], o tai rodo didelę šios konfigūracijos fotovoltinių prietaisų perspektyvą. Vis dėlto, nepaisant išvardintų ypatybių, grafeno taikymas įvairiose srityse, įskaitant ir grafeno/silicio saulės elementų technologijas yra genėtinais ribotas, dėl komplikuočių medžiagos formavimo galimybių.

Šiuo metu, plačiausiai paplitęs grafeno auginimo metodas, tai cheminio nusodinimo iš garų fazės metodas. Formuojant grafeną šiuo būdu naudojami kataliziniai pagrindai (Cu ar Ni), ant kurių vyksta pirminis grafeno nusodinimas. Toliau struktūra yra pernešama nuo šių pagrindų ant reikiamų paviršių, įskaitant silicį. Tokiu būdu grafenas yra užteršiamas organiniais adsorbatais, struktūra ima raukšlėti [3]. Toks sudėtingas pernešimo procesas, neigiamai veikia grafeno/silicio sandūrą bei apsunkina įrenginio savybių valdymą [4].

Siekiant pašalinti pernešimo trūkumus, grafenas gali būti auginamas tiesiogiai ant dielektrinių ar puslaidininkinių pagrindų, nenaudojant katalizinių vario ar nikelio folijų [5]. Tokia grafeno sintezė įmanoma plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu.

Šiame darbe suformuoti grafeno/Si(100) fotovoltiniai prietaisai, naudojant mikrobange plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės sistemą (IPLAS Innovative Plasma Systems GmbH). Grafeno augimui naudotas vandenilio bei metano dujų mišinys. Tinkamam prietaiso veikimui, buvo suformuoti Cr/Cu kontaktai grafeno pusėje, bei aliuminio kontaktas silicio pusėje. Taip pat formuotas ir dvisluoksnis grafenas, bei grafenas ant tekstūruoto silicio, siekiant išsiaiškinti paviršiaus konfigūracijos ir geometrijos įtaką fotovoltinėms savybėms.

Grafeno struktūra tirta Ramano sklaidos spektroskopija (Renishaw inVia system) naudojant 532 nm lazerį bei atominių jėgų mikroskopija ir Kelvino zondo mikroskopija (JPK Instruments, Bruker Nano GmbH, Berlynas, Vokietija). Taip pat tirtos ir fotovoltinės suformuotų saulės elementų savybės.

Tyrime nagrinėta fotovoltinių savybių priklausomybė nuo grafeno struktūros. Nustatyta, kad natūraliai susiformavęs SiO₂ pasluoksnis lemia grafeno n-tipo savilegiravimą, o tai neigiamai veikia atbulinę srovę ir trumpojo jungimo srovę (I_{ts}). Visais atvejais, grafeno išlaisvinimo darbas buvo panašus (4.820 – 4.826 eV). Paviršiaus morfologijos bei defektų įtaka elektrinėms bei fotovoltinėms savybėms neaptikta.

Ištyrus grafeno/n-Si(100) darinių voltamperines charakteristikas nustatyta, kad padidinta grafeno sintezės temperatūra (800 arba 900 °C), suderinta su 0.7 kW plazmos galia skatina ominių grafeno/n-Si kontaktų susidarymą. Taip pat nustatyta, kad dvisluoksnio legiruoto grafeno/n-Si(100) heterosandūrų atviros grandinės įtampa ir trumpo jungimo srovė gali būti didesnė nei vienasluoksnio nelegiruoto grafeno/n-Si(100) heterosandūros.

Atlikus grafeno tiesioginės sintezės ant tekstūruoto silicio paviršiaus bandymus nustatyta, kad po proceso optimizavimo grafeno/tekstūruoto silicio heterosandūros trumpo jungimo įtampa gali tapti sulyginama su geriausių grafeno/plokščio Si(100) bandinių atviros grandinės įtampa. Tačiau trumpojo jungimo srovė lieka ženkliai mažesnė.

Padėka. Projektas Nr. 09.3.3-LMT-K-712-01-0183 finansuojamas Europos socialinio fondo pagal priemonę „Mokslininkų kvalifikacijos tobulinimas vykdant aukšto lygio MTEP projektus“, administruojamą Lietuvos mokslo tarybos.

Reikšminiai žodžiai: grafenas, fotovoltaiika, tiesioginė sintezė.

Literatūra

- [1] E. P. Randviir et al, Mater Today, **17(9)** p. 426-432 (2014).
- [2] D.H. Shin et al, J Alloy Compd, **773**, 913–918, (2019).
- [3] S. J. Haigh et al, Nat Mater **11**, p. 764–767 (2012).
- [4] Š. Jankauskas et al, Nanomaterials, **12**, 1640, (2022).
- [5] A. Khan et al, Adv Sci, **5**, 1800050 (2018).

Poliarizacijos perjungimo mechanizmai van der Waals sluoksniniuose kristaluose

Polarization Switching Phenomena of van der Waals layered single crystal

Iłona Zamaraitė¹, Andrius Džiaugys¹, Yulian Vysochanskii², Juras Banys¹

¹Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio a. 9, Vilnius, Lithuania

²Uzhgorod National University, Institute for Solid State Physics and Chemistry, Pidgrina str. 46, Uzhgorod, Ukraine

ilona.zamaraitė@ff.vu.lt

In addition to graphene and graphite, some of the best known layered materials are the layered thiophosphates with common chemical composition of CuInP_2Q_6 ($Q=\text{S}, \text{Se}$). This class of materials has been studied extensively for a long time. A comprehensive study of polarization switching in a ferroelectric copper indium thiophosphate CuInP_2S_6 (CIPS) has been reported both in nanoscale as well as bulk crystals [1], [2]. It was confirmed stable ferroelectric polarization in an intrinsically layered CIP (below ~ 50 nm thickness). Anomalous polarization switching was found in a ferroelectric CIPS in bulk crystalline. Such anomalous behaviour were found to correlate with its ionic conductivity. The sulfur and selenium compounds have similar structure. Despite this structural similarity, the physical properties are quite different as evidenced by dielectric, ultrasonic, caloric etc. characterization [3]. It was proposed that this anomaly is evidenced for the coexistence of ferroelectric and antiferroelectric ordering [4]. In this report, switching dynamics of $\text{CuInP}_2\text{Se}_6$ single crystals are presented over wide ranges of temperature and electric field.

The single crystals $\text{CuInP}_2\text{Se}_6$ were grown from gas phase by chemical transport reactions. All samples were measured in the form of parallel plate capacitors with silver electrodes. Ferroelectric hysteresis loops were carried out using a commercial ferroelectric test system (TF Analyzer 2000E, AixACCT Germany). Dielectric data were collected using LCR meter HP4284 from 20 Hz to 1 MHz.

polarization switching behavior by thermally activated hopping of copper ions in the lattice of CuInP_2S_6 .

Keywords: van der Waals crystals, polarization, electrocaloric effect

References

- [1] A. Belianinov *et al.*, "CuInP₂S₆ Room Temperature Layered Ferroelectric," *Nano Lett.*, vol. 15, no. 6, pp. 3808–3814, 2015.
- [2] S. Zhou *et al.*, "Anomalous polarization switching and permanent retention in a ferroelectric ionic conductor," *Mater. Horizons*, vol. 7, no. 1, pp. 263–274, 2020.
- [3] S. Zhou, L. You, H. Zhou, Y. Pu, Z. Gui, and J. Wang, "Van der Waals layered ferroelectric CuInP₂Se₆: Physical properties and device applications," *Front. Phys.*, vol. 16, no. 1, pp. 13301–1–30, 2021.
- [4] A. Džiaugys *et al.*, "Piezoelectric domain walls in van der Waals antiferroelectric CuInP₂Se₆," *Nat. Commun.*, vol. 11, no. 1, pp. 1–7, 2020.

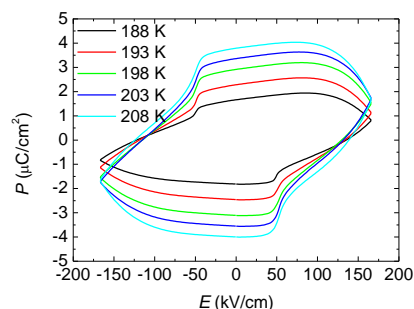


Figure 1. Temperature dependent polarization switching characteristics of $\text{CuInP}_2\text{Se}_6$

Ferroelectric switching is usually difficult to experimentally demonstrate in these materials, mostly due to an intrinsic high conductivity and low-temperature ferroelectric behaviour. Through comprehensive polarization switching (Figure 1) and dielectric spectroscopy studies in both temperature and frequency domains, we reveal that the ionic conductivity influences

Katodoluminescencijos dinamika skirtingos sudėties granatiniuose scintiliatoriuose

Cathodoluminescence Dynamics in Garnet-Type Scintillators with Different Composition

Gabija Soltanaite, Žydrūnas Podlipskas

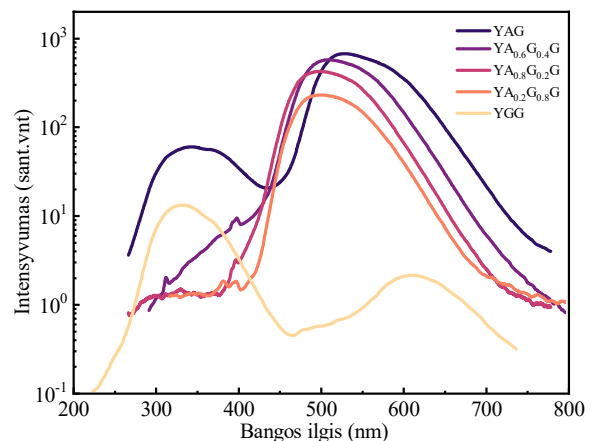
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
gabija.soltanaite@ff.stud.vu.lt

Scintiliatoriai pradėti naudoti aukštų energijų fizikoje, medicinos diagnostikoje bei detektoriuose dėl reliatyviai mažų pagaminimo kaštų, netoksiškumo ir optinių savybių. [1] Visgi didėjant granato struktūros scintiliatorių taikymo perspektyvoms, atsiranda poreikis didinti šviesos išeigą, gerinti laikines scintiliacijos charakteristikas. Tai galima pasiekti keičiant scintiliatorių sudėtį, į grynas medžiagas įterpiant kitų medžiagų atomų. Pakaitiniai atomai, pakeičiantys medžiagos kristalinę struktūrą yra vienas iš būdų optimizuoti scintiliatorių liuminescencijos savybes pagal medžiagų taikymo sritį – nuo apšvietimo technologijų ar medicininės įrangos (PET), iki naujos kartos detektoriai.

Šiame darbe tiriama granatinių scintiliatorių sudėties įtaka liuminescencijos savybėms, aliuminio atomus YAG:Ce (Itrio aliuminio granate) keičiant Ga atomais. Penki bandiniai: YAG:Ce, YAGG:Ce (Itrio aliuminio galio granatas) (su Ga atomų koncentracija nuo 20% iki 80%) bei YGG:Ce (Itrio galio granatas) buvo tirti katodoluminescencijos spektroskopijos su erdvine skyra metodu. Liuminescencijos intensyvumo priklausomybės nuo bangos ilgio, pavaizduotos 1 pav. rodo, jog dalis bandinių pasižymi dviejų spektrinių ruožų forma, kurių trumpabangis apima spektrinę dalį tarp 250 ir 450nm bei antrasis, į ilgabangę spektro sritį pasislinkęs ir apimantis 450 – 700nm spektrinį ruožą. Tokia liuminescencijos spektro forma yra nulemta scintiliatoriuose vykstančios energijos konversijos. Smailės, pasireiškiančios ties trumpesniais bangos ilgiais dažniausiai rodo cerio lygmenų šuolį iš $5d_2$ į $4f_{1,2}$ lygmenis, ilgesniais - $5d_1$ $4f_{1,2}$. [1] Taigi skirtingos priemonių dalys daro įtaką liuminescencijos centrų sužadimui ir scintiliacijos trukmei, išeigai. Spektro smailės padėtis didėjant galio koncentracijai slenkasi į trumpesnių bangos ilgių sritį. Taip yra dėl to, jog galis, turintis mažesnę joninį spindulį nei aliuminis, įterpiamas į medžiagą užima aliuminio jonų padėtis, pasikeičia joninių jungčių tarpatominiai atstumai, sąveika tarp elektroninių jonų lygmenų. To pasekoje energijų tarpas tarp gretimų elektroninių lygmenų siaurėja. Liuminescencijos centruose gali pasireikšti ir kristalinio lauko efektas, kuris lemia, jog pasikeičia vibroninė legiranto jonų lygmenų struktūra ir nespindulinė rekombinacija vyksta nebūtinai iš aukščiausio vibroninio lygmens į žemiausią, esantį arti laidumo juostos, tačiau galimai tarpiniuose lygmenyse. [2]

Didžiausias liuminescencijos intensyvumas matomas gryname itrio aliuminio granate (YAG:Ce) ir sparčiausiai (esant pokyčiui iš 0% iki 20% Ga) mažėja didinant galio atomų kiekį kristalinėje matricijoje. Liuminescencijos intensyvumo kritimas galimai yra nulemtas pakaitinių defektų formavimosi, dėl kurių atsiranda seklis elektronų gaudyklės apatiniame laidumo juostos krašte, o didesniems Ga kiekiams esant medžiagoje pradeda dominuoti šuoliai tarp skirtingų cerio energijos lygmenų, kas galimai rodo cerio jonų elektroninių lygmenų užpildymą ir išsiskyrimą.

Šio darbo rezultatai rodo, jog didėjant galio kiekiui medžiagoje pasireiškia mažesnis liuminescencijos centrų efektyvumas, stebimas poslinkis į trumpabangę spektro dalį šuoliams iš $5d_2$ į $4f_{1,2}$ cerio lygmenis, todėl norint taikyti granatinius scintiliatorius dėl jų liuminescencinių savybių svarbu optimizuoti šių medžiagų sudėtį.



1 pav. Skirtingos sudėties granato struktūros scintiliatorių liuminescencijos intensyvumo priklausomybė nuo bangos ilgio.

Reikšminiai žodžiai: granatiniai scintiliatoriai, katodoluminescencija, pakaitiniai defektai

Literatūra

- [1] Mikhail Korzhik, et al. *Physics of Fast Processes in Scintillators*. Springer Nature, 9 Mar. 2020.
 [2] Anthony Mark Fox. *Optical Properties of Solids*. Oxford, Oxford University Press, 2012

Hibridiniai kompozitai su vario nanodalelėmis padengtais anglimi ir daugiasieniais anglies nanovamzdeliais elektromagnetiniams taikymams

Carbon-coated copper nanoparticles and MWCNT based hybrid composites for electromagnetic applications

Dzmitry Tsyhanok¹, Jan Macutkevici¹, Sergejs Gaidukovs², Juras Banys¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

²Institute of Polymer Materials, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University, P.Valdena 3/7, LV-1048 Riga, Latvia
dzmitry.tsyhanok@ff.stud.vu.lt

The swift advancement of electronic devices and communication systems has given rise to the substantial proliferation of electromagnetic pollution. Electromagnetic interference (EMI) shielding materials hold the capacity to effectively mitigate the deleterious consequences arising from EMI, thus serving as a potent countermeasure[1].

Traditionally, metal or metal alloy coatings that primarily reflect electromagnetic radiation were used for EMI shielding purposes.

In this work, we investigated a series of samples containing carbon-coated copper nanoparticles(Cu@C, 99.8%, 25nm, USNano) at different volume fractions A (A equals 5%, 10%, 15%, 20%) and/or MWCNT(>95%, OD: 10-20 nm, USNano) at volume fractions B (B equals 0.05%, 0.10%, 0.25%, 0.50%, 0.75%, 1.00%), introduced into the epoxy matrix.

The electromagnetic properties of prepared composites were investigated in the 20 Hz – 1 MHz frequency range by means of an HP 4284A LCR-meter. The properties of the investigated materials were calculated using standard techniques [2].

Samples containing only Cu@C in the epoxy matrix depict increase in the real and imaginary parts of dielectric permittivity with increasing volume fraction A. Conductivity value increases from 1.2×10^{-3} S/m up to 1.8 S/m at 1.2 kHz.

In turn, samples containing MWCNT in the epoxy matrix exhibit similar behavior, and the conductivity value increases from 1.2×10^{-8} S/m to 2.0×10^{-5} S/m at 1.2 kHz with increasing volume fraction B.

Hybrid composites containing both MWCNT and Cu@C particles were prepared with volume fractions A = 5% and B = 0.05%, 0.10%, 0.25%, 0.50%, 0.75%, 1.00%. Surprisingly, in that case we observed the peak conductivity value of 1.3×10^{-2} S/m in the case of sample with A = 5% and B = 0.10%. Further increase of A value resulted in a decrease of conductivity value.

Conductivity values (1.2 kHz) of the MWCNT/Epoxy and MWCNT/Cu@C/Epoxy samples are presented in Figure 1.

MWCNT/Cu@C/Epoxy (A = 5%) samples' thermal conductivity measurements results at room temperature are presented in the Table 1.

λ values are an order of magnitude higher than that of the air and are similar to that of pure Poly(dimethylsiloxane) (PDMS).

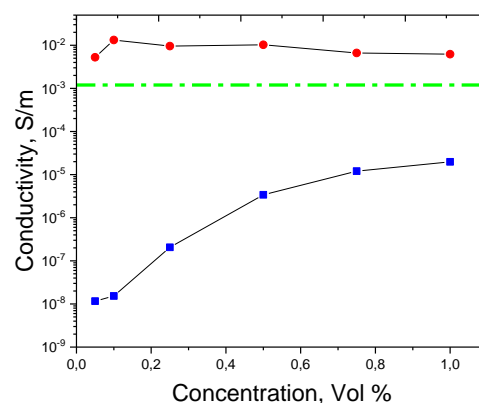


Figure 1. MWCNT/Cu@C/Epoxy (red) and MWCNT/Epoxy (blue) conductivity values versus the concentration of MWCNT. Green line represents conductivity value of Cu@C/Epoxy (A = 5%) sample at 1.2 kHz.

Table 1. Thermal conductivities of the MWCNT/Cu@C(5%)/Epoxy samples.

MWCNT Concentration, vol %	λ , $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
0.05	0.244
0.10	0.245
0.25	0.230
0.50	0.254
0.75	0.239
1.00	0.259

Despite low thermal conductivity values such samples can be used for various electromagnetic coatings preparation.

Keywords: hybrid composites, electromagnetic interference, conductivity, dielectric permittivity.

Acknowledgments. This work was conducted within the framework of EsSENce COST Action CA19118.

References

- [1] Z. Xiangyu, Z. Haiwei, L. Zhihao, J. Rijia, Z. Xing, Functional composite electromagnetic shielding materials for aerospace, electronics and wearable fields, *Materials Today Communications*, Vol. 33, 2022.
- [2] Baker-Jarvis, J., Geyer, R. G. & Domich, P. D. A nonlinear least-squares solution with causality constraints applied to transmission line permittivity and permeability determination. *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 41, 646–652,1992

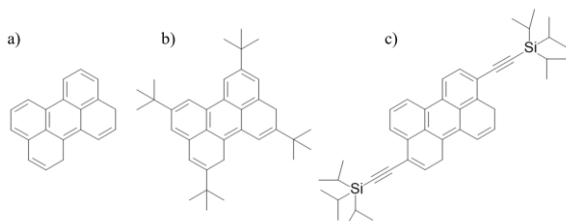
Funkcionalizuotų perileno darinių taikymas fotonų konversijoje

Functionalized perylene derivatives for photon upconversion

Manvydas Dapkevičius¹, Steponas Raišys¹, Karolis Kazlauskas¹

¹Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
manvydas.dapkevicius@ff.stud.vu.lt

Tripletinių eksitonų anihiliacija (TTA) yra procesas kuomet du mažesnės energijos eksitonai yra panaudojami vieno didesnės energijos eksitono (singuletinio eksitono) generacijai, tačiau tik nedidelė dalis organinių junginių gali efektyviai vykdyti tripletinių eksitonų anihiliaciją, nors šių medžiagų taikymų galimybės yra labai plačios. Fotonų konversiją galima pritaikyti saulės celių efektyvumui gerinti, konvertuojant saulės celės nesugertą (mažesnės energijos fotonų nei puslaidininkio draustinis tarpas) šviesą į fotonus patenkančius į celės sugerties sritį [1]. Šios technologijos taikymas leistų prisidėti prie augančio globalaus energijos poreikio tenkinimo, tačiau sukurti sistemą, kuri vykdo našią fotonų konversiją (ypač sluoksniuose) yra sudėtinga, nes ją turi sudaryti mažiausiai dvi molekulės: ilgabangę šviesą sugerianti (sensibilizatorius) ir trumpabangę šviesą spinduliuojanti (emiteris) molekulės. Šių molekulių struktūra ir, atitinkamai, energiniai lygmenys turi būti optimizuoti tarpusavyje, kad emiteris neprarastų TTA savybių, o energijos pernaša vyktų tik į vieną pusę (nebūtų atgalinės pernašos atgal į sensibilizatorių). Nors energijos pernašos procesus galima iš dalies valdyti keičiant tarpmolekulinius atstumus (optimizuojant molekulių koncentraciją), vieną iš svarbiausių anihiliatoriaus parametrų – statistinį faktorių, kuris nusako tikimybę kuomet du tripletiniai eksitonai anihiliacijos proceso metu sudarys vieną singuletinį eksitoną, t.y. pačio TTA proceso našumą keisti yra gana sudėtinga. Literatūroje nėra žinoma daug junginių, kurių statistinis faktorius būtų didelis, tačiau perilenas išsiskiria iš jų tuo, kad jo statistinė tikimybė sudaryti singuletinį eksitoną tripletų anihiliacijos metu yra praktiškai 100% [2]. Tuo tarpu nemodifikuoto perileno trūkumas, ribojantis jo panaudojimą praktiniuose taikymuose, yra stiprus jo polinkis į agregaciją, o susiagregavęs praranda TTA savybes. Siekiant praplėsti našių TTA emiterių spektrą, kurie pasižymėtų sumažėjusia agregacija, šiame darbe buvo tiriami du funkcionalizuoti perileno dariniai (ir perilenas kaip etalonas, 1 pav.).



1 pav. Fotonų konversijos molekulių cheminės struktūros: a) perilenas b) tetra-tert-butil (tb) perilenas c) 2,5-bis((triizopropilsilil)etininil (TIPS) perilenas.

Tyrimo metu buvo paruošti trys tetrahidrofurano tirpalai naudojant paladžio tetrafenil-tetrabenzoporfiriną kaip sensibilizatorių (0.01 mM) ir perileną, tb-perileną ir TIPS-perileną kaip emiterį (0.1 mM).

Integruojančios sferos pagalba buvo nustatytas šių TTA tirpalų fluorescencijos (Φ_{FL}) ir fotonų konversijos kvantiniai našumai (Φ_{UC}), taip pat išmatuota fotonų konversijos gyvavimo trukmė ir apskaičiuotas tripletinių eksitonų pernašos efektyvumas (Φ_{TET}). Nustačius fotonų konversijos slenkstį (I_{th}) buvo įvertinta tripletinių eksitonų dalis dalyvaujanti TTA procese (Φ_{TTA}) ir naudojantis formule

$$\Phi_{UC} = \frac{1}{2} f \Phi_{ISC} \Phi_{TET} \Phi_{TTA} \Phi_{FL} \quad (1)$$

apskaičiuota statistinio faktoriaus tikimybė f .

1 lentelė. Perileno ir jo funkcionalizuotų darinių fotofizikiniai parametrai.

	Φ_{FL}	Φ_{UC}	f
Perilenas	0.53	0.04	0.18
tb-perilenas	0.59	0.02	0.07
TIPS-perilenas	0.79	0.06	0.18

Apskaičiuotas 5 kartus mažesnis perileno statistinis faktorius nei pateikiama literatūroje [2], tikėtina dėl naudotų skirtingų kvantinio našumo nustatymo metodikų: palyginamojo kvantinio našumo matavimo [2], ir šiame darbe naudoto absoliutaus kvantinio našumo matavimo. Tuo tarpu skirtingų funkcinių grupių jungimas prie perileno kamieno leido padidinti fluorescencijos kvantinį našumą dėka sumažėjusios molekulių agregacijos, tačiau nevienodai keitė statistinį faktorių – tert-butil grupės bene dvigubai sumažino f iki vos 7%, nors TIPS grupės f nepakeitė. Taip galėjo nutikti dėl pasikeitusių perileno energetinių lygmenų arba dėl nevienodos molekulių orientacijos viena kitos atžvilgiu TTA vyksmo metu.

Reikšminiai žodžiai: fotonų konversija, statistinis faktorius, perilenas, perileno dariniai.

Literatūra

- [1] J. Zhou, Q. Liu, W. Fang, Y. Sun and F. Li, Chem. Rev. 115, 1, 395 (2015)
[2] S. Hoseinkhani, R. Tubino, F. Meinardi and A. Monguzzi, Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 4020 (2015)

Periodiškai moduluotų fotoninių struktūrų taikymas lazerinės spinduliuotės valdymui

Periodically modulated photonic structures for light manipulation

Julianija Nikitina¹, Ceren Babayigit², Kęstutis Staliūnas^{3,4}, Lina Grinevičiūtė¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

²University of California, Irvine, 92697 California, JAV

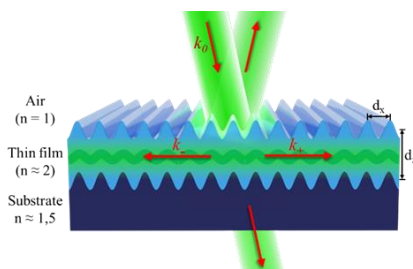
³ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010 Barcelona, Ispanija

⁴UPC, Rambla Sant Nebridi 22, 08222 Barcelona, Ispanija

julianija.nikitina@ftmc.lt

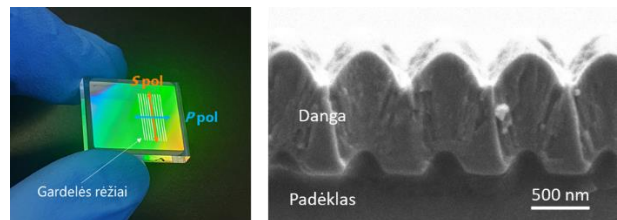
Lazerinės spinduliuotės valdymui optinėse sistemose naudojami įvairūs optiniai elementai ir jų kombinacijos, pvz., intensyvumo arba spektriniai filtrai, fazinės plokštelės, poliarizatoriai, lęšiai ir t.t. Tačiau kai siekiama sumažinti lazerinių sistemų fizinių dydį iki mili- arba net mikro- skalės, standartiniai sprendimai ne visada yra tinkami. Pavyzdžiui, interferencinių dangų ir kubiniai poliarizatoriai nuneša lazerio spindulį nuo sklaidimo krypties, kas reikalauja papildomo sistemos perkalibravimo. Erdviniam filtravimui skirtos konfokaliųjų lęšių sistemos užima daug vietos, todėl mikrolazeriuose naudoti netinka. Tokios priežastys nulemia naujų kompaktiškų optinių elementų poreikį bei vystymą.

Tobulėjant ęsdinimo ir litografijos technologijoms, vis dažniau bandoma pritaikyti įvairių medžiagų periodinį mikro- arba nano- struktūrizavimą funkcinių optinių komponentų formavimui. Ypač dielektrinių struktūrų patrauklumą lemia aukštas atsparumas lazerinei spinduliuotei, lyginant su metalinėmis ar polimerinėmis medžiagomis. Tačiau tokių elementų formavimas yra technologiškai sudėtingas ir nėra iki galo išdirbtas. Vienas iš galimų tokių struktūrų gamybos būdų yra optinių dangų tolygus nusodinimas ant periodiškai struktūrizuoto padėklo [1]. Tokioje fotoninėje struktūroje, kurios schematinė iliustracija pateikta 1 pav., pasireiškia Fano tipo rezonansas, kuris nulemia ryškių asimetrinės formos pralaidumo/atspindžio smailių atsiradimą spektruose [2]. Tuo labiau, linijinės struktūros atveju, rezonanso sąlygos nėra vienodos statmenoms poliarizacijoms. Abi šios savybės gali būti išnaudotos norint formuoti šviesos valdymui skirtus optinius elementus, tinkančius valdyti nulinio laipsnių kampų krintančią spinduliuotę.



1 pav. Fotoninės struktūros, kurioje tenkinamos sąlygos Fano tipo rezonanso atsiradimui, schematinė iliustracija [2]

Šiame darbe tiriamos vienasluoksnės architektūros fotoninės struktūros, sudarytos iš aukšto lūžio rodiklio metalo oksido dangos, tolygiai nusodintos ant periodiškai moduluoto padėklo. Plonų sluoksnių nusodinimui buvo naudojama jonapluoščio dulkinimo technologija (*angl.* Ion Beam Sputtering). Pirmiausia buvo siekiama įvertinti skirtingų metalo oksidų tolygaus nusodinimo kokybę (struktūrizuoto padėklo formos atkartojimą nusodintame sluoksnyje, kaip parodyta 2 pav.). ~1 μm storio dangų topografijos charakterizavimas parodė, kad struktūrizuoto padėklo formos atkartojimas priklauso nuo dangos medžiagos: hafnio, niobio ir tantalio oksidų storų sluoksnių paviršiaus moduliacijos sumažėjo atitinkamai ~6.7 %, ~10 %, ~7.2 %. Silicio oksido dangos paviršiaus moduliacija sumažėjo net 35 %.



2 pav. (a) Fotoninės struktūros nuotrauka; (b) Plono sluoksnio, nusodinto ant struktūrizuoto padėklo, skerspjūvio SEM nuotrauka [3]

Taip pat buvo atliktas suformuotų struktūrų optinis charakterizavimas, kuris parodė Fano tipo rezonansinio reiškinio atsiradimą, kai dangos lūžio rodiklis yra didesnis nei naudojamo padėklo. Ši sąveika pasireiškia žemo pralaidumo rezonansinėmis linijomis (θ , λ) spektriniuose žemėlapiuose, kas demonstruoja potencialius tokių periodiškai moduluotų struktūrų taikymus: pluošto erdvinį filtravimą ir statmenų poliarizacijų išskyrimą.

Reikšminiai žodžiai: optinės dangos, plonų sluoksnių nusodinimas, erdvinis filtravimas, poliarizatoriai.

Literatūra

- [1] L. Grinevičiūtė, C. Babayigit, D. Gailevičius, M. Peckus, M. Turduev, T. Tolenis, M. Vengris, H. Kurt, K. Staliūnas, *Adv. Optical Mater.* 2001730, 2021
- [2] L. Grinevičiūtė, J. Nikitina, C. Babayigit, K. Staliūnas, *Applied Physics Letters* 118, 131114, 2021
- [3] I. Lukosiunas, L. Grinevičiūtė, J. Nikitina, D. Gailevičius, K. Staliūnas, *Phys. Rev. A*, L061501, 2023

Relaksacijos trukmių pasiskirstymo funkcijos in situ stebėjimas Na₃VTi(PO₄)₂F₃ stiklo kristalizacijos metu

Crystallization of Na₃VTi(PO₄)₂F₃ glass: In situ observation of the function of distribution of relaxation times

Edvardas Kazakevičius¹, Algimantas Kežionis¹, M. Nowagiel², T. Płociński³, T.K. Pietrzak²

¹ Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

² Faculty of Physics, Warsaw University of Technology, Koszykowa 75, PL-00-662 Warsaw, Poland

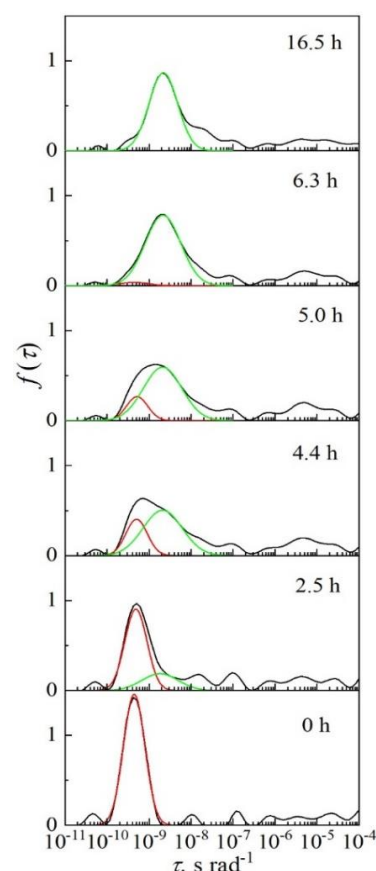
³ Faculty of Materials Science and Engineering, Warsaw University of Technology, Wołoska 141, PL-02-507 Warsaw, Poland

edvardas.kazakevicius@ff.vu.lt

NASICON tipo (Na₃M₂(PO₄)₂F₃, kur M = V, Ti, Fe) mišrūs joniniai-elektroniniai laidininkai yra laikomi perspektyviais Na-jonų baterijų katodams gaminti [1–3]. Siekiant padidinti šių junginių elektrinį laidumą, buvo pasiūlyta jų stiklo fazės terminė kristalizacija [4, 5]. Optimalių terminio apdorojimo sąlygų nustatymas yra gana daug laiko užimantis procesas, todėl norint jį supaprastinti, gali būti naudojamas įvairių nanokristalizacijos proceso ypatybių in situ stebėjimas. Tokį stebėjimą galima atlikti pilnutinės elektrinės varžos spektroskopijos pagalba, t. y. stebint pilnutinės varžos $\tilde{Z}(\omega) = Z'(\omega) + jZ''(\omega)$ spektro kitimą kristalizacijos proceso metu. Kad atskirti keletą elektrinių krūvininkų relaksacijos procesų, gauti spektrai yra analizuojami įvairiais metodais. Analizei gali būti naudojamas gerai žinomas ekvivalentinių grandinių metodas, tačiau kai kuriais atvejais apskaičiuojamus vadinamąją relaksacijos trukmių pasiskirstymo funkciją (DRT, $f(\tau)$) gaunama geresnė skiriamoji geba. Būtent šiame darbe buvo naudojamas DRT metodas, kuris pilnutinės varžos spektrą nusako kaip elementų su individualiomis relaksacijos trukmėmis sumą.

Taigi in situ buvo stebimas Na₃M₂(PO₄)₂F₃ stiklo placiajuosčio pilnutinės varžos spektro kitimas, termiškai apdorojant bandinį virsmo temperatūros ($T_g = 740$ K) aplinkoje. Spektuose buvo stebimi keli krūvininkų relaksacijos procesai, o jų analizei panaudotas DRT metodas. Vienintelė vidutinio pločio DRT varpo formos smailė buvo stebėta tyrimo pradžioje, ir tai reiškė vienintelį relaksacijos procesą pradinėje stiklinėje fazėje (1 pav.). Kristalizacijos metu, smailė slinkosi ilgesnės relaksacijos trukmės τ kryptimi, plėtėsi ir suskilo į dvi smailes. Taip pat trumpesnės τ srityje atsirado ir trečioji platesnė smailė. Po 7 valandų dviguba smailė susijungė į varpo formos kreivę ir buvo laikoma, kad yra pasiekta kristalinė fazė. Gauta DRT raida per 7 valandas buvo aproksimuojama dviem Gauso varpais (1 pav.). Stiklinės ir kristalinės fazių mišinio sudėties laikinė priklausomybė buvo nustatyta pagal minėtų Gauso kreivių parametrus. Trečioji smailė buvo priskirta relaksacijos procesui tarpkristalitinėse erdmėse [6].

Reikšminiai žodžiai: pilnutinė varža, relaksacijos trukmė, kristalizacija.



1 pav. DRT funkcijos raida terminio apdorojimo metu. Stiklo ir kristalinės fazės aproksimacijos Gauso varpais yra parodytos atitinkamai raudonai ir žaliai.

Literatūra

- [1] I.L. Matts, S. Dacek, T.K. Pietrzak, R. Malik, G. Ceder, Chem. Mater. **27**, 6008 (2015).
- [2] R.A. Shakoor, D.-H. Seo, H. Kim, Y.-U. Park, J. Kim, S.-W. Kim, H. Gwon, S. Lee, K. Kang, J. Mater. Chem. **22**, 20535 (2012).
- [3] T.K. Pietrzak, P.E. Kruk-Fura, P.J. Mikołajczuk, J.E. Garbarczyk, Int J Appl Glass Sci. **11**, 87 (2020).
- [4] T.K. Pietrzak, M. Wasiucioneck, J.E. Garbarczyk, Nanomaterials **11**, 1321 (2021).
- [5] T.K. Pietrzak, M. Wasiucioneck, P.P. Michalski, A. Kaleta, J.E. Garbarczyk, Materials Science and Engineering: B. **213**, 140 (2016).
- [6] E. Kazakevičius, A. Kežionis, M. Nowagiel, T. Płociński, T.K. Pietrzak, J. Power Sources **580**, 233409 (2023).

Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{1.95} kietųjų elektrolitų keramikų sintezė, kepinimas ir impedanso spektroskopija

Synthesis, sintering and impedance spectroscopy of Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{1.95} solid electrolyte ceramics

Theo Grivois¹, Gustas Levickis², Algimantas Kežionis², Anthony Rousseau¹, Vilma Kavaliukė², Tomas Šalkus², Maud Barre¹

¹Le Mans University, Institute of Molecules and Materials, Olivier Messiaen av., 72085 Le Mans Cedex 9, France

²Vilnius university, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 3, 10257 Vilnius, Lithuania

vilma.kavaliuke@ff.vu.lt

Solid oxide fuel cells (SOFC) are characterized by high overall efficiency (up to 90 %) as they directly convert chemical energy of fuel gas to electrical energy. The working temperature of SOFC is mainly determined by thickness and electrical conductivity of solid electrolyte. Yttria-stabilized zirconia (YSZ) is a classic example of oxygen vacancy conductive solid electrolyte used in SOFC. The ionic conductivity of 8YSZ (zirconia doped by 8mol% yttria) is about 1 S/m at 800-900°C. Therefore, the working temperature of YSZ based SOFC reaches 800-1000°C. In order to reduce the working temperature of SOFCs, solid electrolytes with higher ionic conductivity are sought. Gadolinia doped ceria (GDC) reaches the ionic conductivity of 1 S/m at 600°C and is considered as one of the alternative materials to replace YSZ in SOFCs [1-2].

Electrical properties of GDC ceramics depend on stoichiometry, synthesis process, sintering condition, etc. Different synthesis processes affect the size and shape of crystallites, distribution of particle size, defect concentration and lattice parameters. Sintering conditions and powder morphology affect density and homogeneity of ceramic, silica phase formation in grain boundaries [4]. The total electrical conductivity in ceramic is determined by grain and grain boundary conductivities. The level of densification and homogeneity of composition will mostly affect grain conductivity. Impurities, morphology and space charge layers will mostly affect grain boundary conductivity [4].

The aim of this work was to investigate electrical properties dependence on different powder synthesis methods.

Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{1.95} powders were synthesized by solid state reaction (heating at 1200°C for 12 hours) and co-precipitation (heating at 850°C for 2 hours) methods. The synthesized powders were analyzed by X-ray diffraction (XRD) and lattice parameters (cubic symmetry) were determined to be 5.4147(2) Å and 5.4249(2) Å for powders synthesized by solid state reaction and co-precipitation methods respectively. The pellets were sintered at 1400°C for 2 hours. The obtained ceramics were shaped into cylindrical samples and Pt electrodes were applied. Electrical properties of the samples were investigated by impedance spectroscopy in the temperature range from 300 to 800 K and in the 10 Hz - 10 GHz frequency range with impedance spectrometer developed in Nanoionics laboratory [5]. Three semicircles can be visible in a typical Nyquist plot of a ceramic. Low frequency semicircle can be attributed to

electrode polarization processes. The medium and high frequency semicircles can be attributed to ion relaxation processes in grain boundaries and grains. The Nyquist plots for both samples were fitted with ZView program and grain and total conductivities were determined. The grain and grain boundary conductivities were increasing with temperature according to Arrhenius law. The activation energies were determined from total and grain conductivities dependences on reciprocal temperature.

Keywords: gadolinia doped ceria, impedance spectroscopy, ionic conductivity, solid state reaction, co-precipitation.

Literature

- [1] E. Ivers-Tiffée, J. Weber, J. Eur. Ceram **21**, 1805 (2001).
- [2] O. Yamamoto, Electrochim. Acta **45**, 2423 (2000).
- [3] S. Anirban, A. Dutta, Int. J. Hydrog. Energy **45**, 25139 (2020).
- [4] G. Kim, N. Lee, K.-B. Kim, B.-K. Kim, H. Chang, S.-J. Song, J.-Y. Park, Int. J. Hydrog. Energy **38**, 1571 (2013).
- [5] A. Kežionis, E. Kazakevičius, T. Šalkus, A.F. Orliukas, Solid State Ion. **188**, 110 (2011).

This work has received financial support from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-LZ-23-4.

NIR fotonų konversija TES-ADT molekulinėje sistemoje

Investigation of TES-ADT based NIR-to-Vis photon upconversion system

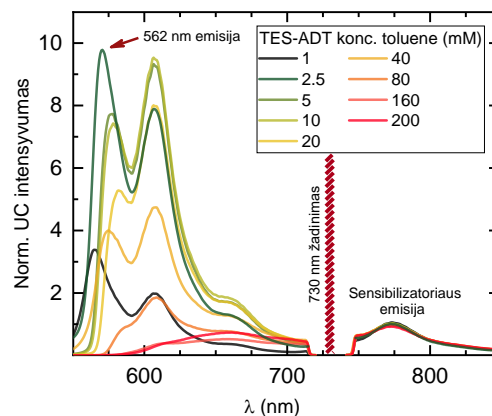
Justas Lekavičius¹, Edvinas Radiunas¹, Steponas Raišys¹, Karolis Kazlauskas¹

¹Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
justas.lekavicius@ff.stud.vu.lt

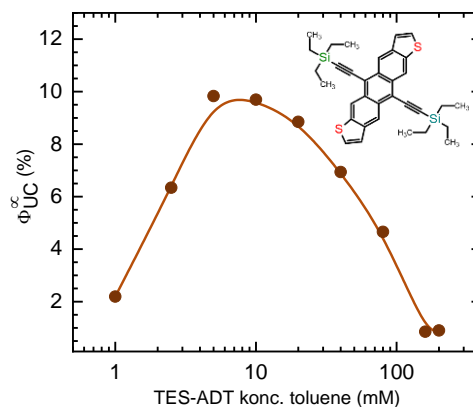
Tripletinės anihiliacijos mechanizmu paremta infraraudonųjų (NIR) fotonų konversija į regimąją šviesą (TTA-UC) yra fotofizikinis procesas, kurio metu iš dviejų NIR žadinimo fotonų yra sukuriama vienas didesnės energijos šviesos kvantas [1]. Šis procesas gali vykti naudojant mažo galios tankio nekoherentinį žadinimo šaltinį, todėl gali būti pritaikytas saulės elementų našumo didinimui, fotopolimerizacijos proceso iniciavimui, naktinio matymo įrangoje bei kitose mokslo ir pramonės srityse [1-3]. Bendroju atveju TTA-UC sistemą sudaro dviejų tipų molekulės – sensibilizatorius ir anihiliatorius. Pirmojo tipo molekulės turi pasižymėti efektyvia NIR šviesos sugertimi ir našia interkombinacine konversija. Sensibilizatoriuje sugeneruotas tripletinis sužadintimas yra perduodamas į anihiliatoriaus molekules (dažnai atliekančias ir emiterio funkciją), kurios vykdo tripletinių eksitonų anihiliaciją (TTA) ir sugeneruoja aukštesnės energijos singuletinį eksitoną. Šiuo metu plačiausiai naudojamas anihiliatorius konvertuojantis iš NIR į regimąją sritį yra tetraceno kamieną turinti rubreno molekulė. Tačiau dėl fotonų konversijai trukdančios agregacijos kietame būvyje ir kitų nepalankių molekulių parametrų [2], būtina ieškoti naujų emiterio molekulių. Fotonų konversijai iš NIR srities tinkamas emiteris turi pasižymėti aukštu fluorescencijos kvantiniu našumu sluoksniuose bei žemu tripletiniu lygmeniu. Šiomis savybėmis pasižymi naujas emiteris – modifikuotas antraditiofenas (TES-ADT), tačiau siekiant įvertinti jo tinkamumą fotonų konversijai, būtina atlikti nuoseklius fotofizikinius tyrimus.

Šio darbo metu buvo tiriamos TES-ADT emiterio savybės tirpaluose. Tiriamam emiteriui buvo parinktas paladžio ftalocianino (PdPc) sensibilizatorius bei paruošti 9 tirpalai su skirtinga TES-ADT koncentracija (1 – 200 mM intervale). Remiantis emisijos spektrais (1 pav.) bei fotonų konversijos kvantinio našumo Φ_{UC} vertėmis (nustatytomis naudojant integruojančią sferą, 2 pav.), nustatyta, jog optimali emiterio koncentracija šviesą konvertuojančiuose tirpaluose yra 5 – 10 mM. Atlikus papildomus matavimus buvo rasta, jog pagrindinę įtaką Φ_{UC} turi emiterio fluorescencijos bei tripletinės energijos pernašos našumų priklausomybė nuo koncentracijos. Didinant emiterio koncentraciją dėl mažėjančio tarpmolekulinio atstumo gerėja tripletinė energijos pernaša, tačiau dėl emiterio agregacijos krenta fluorescencijos kvantinis našumas. Optimali emiterio koncentracija yra šių dviejų procesų balanso rezultatas. Taip pat tyrimo metu buvo nustatyta, kad augant emiterio koncentracijai dėl besikeičiančių energinių lygmenų kinta ir statistinė tikimybė (f), jog TTA metu bus sugeneruota singletinė būseną. Aptarti rezultatai (aukštas

fotonų konversijos našumas ir kintanti f faktoriaus vertė) motyvuoja tolimesnius fundamentinius TES-ADT emiterio tyrimus sluoksniuose bei jų taikymą.



1 pav. Sunormuoti TTA-UC tirpalų su skirtinga TES-ADT koncentracija emisijos spektrai išmatuoti esant 730 nm žadinimui.



2 pav. Fotonų konversijos kvantinio našumo priklausomybė nuo TES-ADT koncentracijos toluene.

Reikšminiai žodžiai: Fotonų konversija, TTA, organiniai spinduoliai, TES-ADT.

Literatūra

- [1] Murakami, I., Kamada, K., Kinetics of photon upconversion by triplet-triplet annihilation: a comprehensive tutorial. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 18268-18282 (2021).
- [2] Radiunas, E. et al., Impact of t-butyl substitution in a rubrene emitter for solid state NIR-to-visible photon upconversion. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 7392-7403 (2020).
- [3] Nishimura, N. et al., Photon upconversion utilizing energy beyond the band gap of crystalline silicon with a hybrid TES-ADT/PbS quantum dots system. *Chem. Sci.* 10, 4750 (2019).

Grūdo dydžio poveikis fosfatais suklijuotų magnetoelektrikų dielektrinėms savybėms

Grain size effect on dielectric properties of phosphate-bonded magnetoelectrics

Žygimantas Logminas¹, Artyom Plyushch¹, Šarūnas Svirskas¹, Daniil Lewin², Vladimir Shvartsman², Doru Lupascu², Algirdas Selskis³, Jūras Banys¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

²Institute for Materials Science and Center for Nanointegration Duisburg-Essen (CENIDE), University of Duisburg-Essen, Universitätsstraße 15, 45141 Essen, Germany

³Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius
zygimantas.logminas@ff.stud.vu.lt

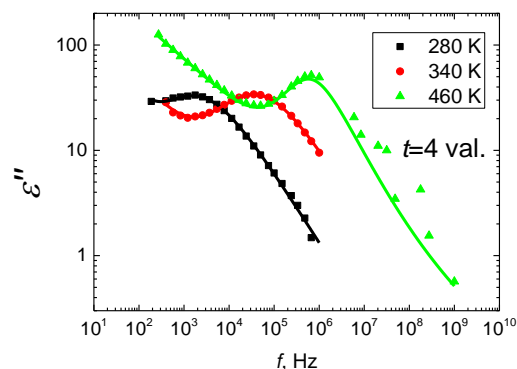
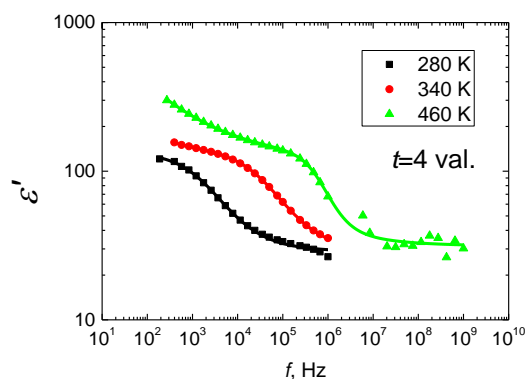
Multiferoikai yra medžiagos, kurios turi dvi arba daugiau ferinių savybių – feroelektrika, feromagnetizmas, feroelastika. Dėl mechaninės grūdų sąveikos šios savybės yra priklausomos viena nuo kitos – pavyzdžiui: medžiaga gali būti poliarizuojama magnetiniu lauku arba įmagnetinama elektriniu. Tai – magneto elektrinis efektas. Šios medžiagos turi perspektyvų būti panaudotos tokiuose įrenginiuose, kaip magnetinio lauko jutikliai, srovės jutikliai, energijos surinkėjai, keitikliai, atmintis, spintroninė logika ir mikrobangų ekranavimo medžiagos.

Literatūroje yra nemažai prieštaravimų: pvz. Yao ir kt. ištyrė tiek ME, tiek MF fazių grūdelių dydžio poveikį BFO / PZT kompozitui ir parodė, kad didžiausias sujungimo efektas buvo pastebėtas nano-nano kombinacijoje [1]. Priešingai, Pattanayak ir kt. ištyrė keturis FE-FM kompozito grūdelių dydžių derinius ir parodė, kad smulkiagrūdis FE/stambiagrūdis FM derinys yra geresnis už kitus, kai FM fazės koncentracija yra 10 %. [2].

Šiame darbe buvo tirti keturi bandiniai. Šie bandiniai buvo pagaminti lygiomis dalimis iš pjezoelektriko bario titanato (BaTiO₃) ir magnetostriktoriaus kobalto ferito (CoFe₂O₄), tačiau skirtinguose bandiniuose kobalto ferito grūdai buvo kepinami skirtingą laiką – 2 val., 4 val., 6 val. ir 8 val. 1100 °C temperatūroje. Šie grūdai tuomet buvo sumalami ir fosfatinių klijų pagalba suklijuoti su bario titanatu.

Šio darbo tikslas yra: nustatyti sąryšį tarp kobalto ferito grūdų kepinimo laiko ir grūdų dydžio, bei sąryšį tarp kepinimo laiko ir Maksvelo relaksacijos laiko bei aktyvacijos energijos.

Bandiniai buvo tirti plačiajuostės spektroskopijos metodais 100 Hz – 1 GHz diapazone, 150 K – 500 K temperatūrų intervale.



1 pav. Bandinio su 4 valandas kepintais kobalto ferito grūdais realiosios (viršuje) ir menamosios (apačioje) dielektrinės skvarbos priklausomybės nuo elektrinio lauko dažnio, aproksimuota pagal (1) formulę.

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{1 + (i\omega t)^{1-a}} \quad (1)$$

Čia ε_s ir ε_{∞} yra vertės prie žemiausių ir aukščiausių dažnių atitinkamai, t yra mūsų ieškoma Maksvelo relaksacijos trukmė, $i^2 = -1$, o a yra parametras, parodantis priklausomybės pločio dinamiką.

Reikšminiai žodžiai: multiferoikai, magnetoelektrikai, fosfatai, grūdų dydis

Literatūra

- [1] Yao, Minghai, et al. Journal of Alloys and Compounds 948 (2023): 169731. (2004).
- [2] Pattanayak, Ranjit, et al. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 444 (2017): 401-409.

Relaksoriaus savybių tyrimas BaTiO₃ pagrindu pagamintuose kietuosiuose tirpaluose

Relaxor properties of BaTiO₃-based solid solutions

Šarūnas Svirskas¹, Eglė Šlinkšytė¹, Vytautas Klimavičius¹, Eriks Birks², Stanislav Kamba³, Jūras Banys¹

¹ Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Kengaraga 8, LV-1063, Riga, Latvia

³ Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic

sarunas.svirskas@ff.vu.lt

Barium titanate (BTO) is a first inorganic material where the ferroelectricity was discovered. Barium titanate has a perovskite structure in which ferroelectricity occurs due to the off-centering of Ti ions in oxygen octahedral cage. The material undergoes three consecutive phase transitions [1]. The high temperature phase is paraelectric which transforms to the tetragonal, orthorhombic and rhombohedral ferroelectric phases when the temperature decreases.

Barium titanate can be considered as multifunctional materials for different applications. The largest application area of BTO is multilayered ceramic capacitors due to its large weakly temperature dependant permittivity in the vicinity of room temperature. Unfortunately, the loss and energy storage density of such capacitors are strongly dependent on the domain structure of the ferroelectric phase of BTO. In order to maximize the energy storage density and decrease the loss which arises due to domain wall motion, it is necessary to modify BTO to pin the domains or reduce their density.

Isovalent substitutions such as Ce⁴⁺, Zr⁴⁺, Hf⁴⁺ or Sn⁴⁺ instead of titanium ion modifies the phase transitions of barium titanate. Some of these ions can be substituted throughout all the concentration range. The material undergoes crossover from ferroelectric properties to a relaxor properties.

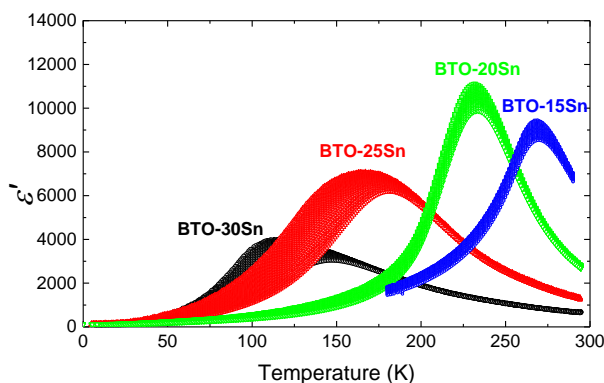


Fig 1. Temperature dependence of permittivity for BaTi_{1-x}Sn_xO₃ solids solutions.

In this contribution we will focus on the Sn⁴⁺ substituted barium titanate (BaTi_{1-x}Sn_xO₃) in the crossover region (i. e. $0.15 \leq x \leq 0.3$) between ferroelectric and relaxor behavior. The dynamics of the

crossover will be studied by broadband dielectric spectroscopy methods from milihertz to terahertz range. Low frequency (<1 MHz) dielectric spectroscopy data is depicted in figure 1. It is clearly seen that the increase of tin in BTO results in diminishing sharp phase transitions to one broad dielectric anomaly. This anomaly shifts to lower temperature region and broadens. The compositions with the largest compositions ($x > 20\%$ Sn) clearly exhibit relaxor features.

Also, the NMR studies of tin and titanium ions will be presented. Such experimental technique will provide some insights about different displacements of a titanium ions surrounding tin. The titanium NMR spectra is depicted in figure 2.

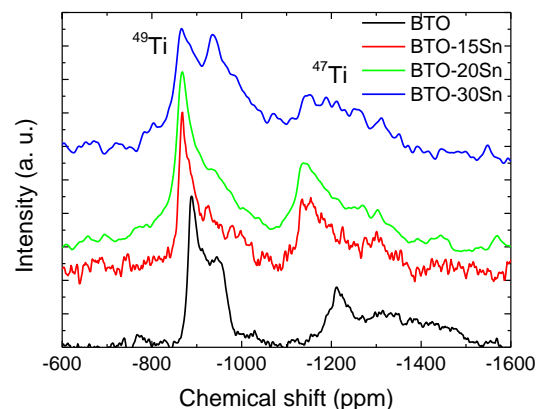


Fig 2. ^{47,49}Ti NMR spectrum for all investigated compositions at room temperature.

Keywords: dielectric spectroscopy, relaxors, polar nano regions.

Literature

- [1] P. W. Forsbergh, Domain Structures and Phase Transitions in Barium Titanate, Phys. Rev. 76, 1187 (1949).

Fotofizikinių procesų tyrimas fosfino oksido tipo fotoiniatoriuose

Photophysical processes in phosphine oxide photoinitiators

Marius Navickas¹, Edvinas Skliutas¹, Mangirdas Malinauskas¹, Mikas Vengris¹

¹Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223, Vilnius, Lietuva
marius.navickas@ff.vu.lt

Fotopolimerizacija yra procesas, sulaukęs ypatingo mokslinio ir technologinio susidomėjimo dėl galimybes sparčiai ir preciziškai kurti itin mažų matmenų objektus, kurių pritaikymas apima mikroelektronikos įtaisų bei medicininių medžiagų gamybą [1,2]. Norint preciziškai gaminti sudėtingus tridimensinius mažų matmenų darinius, būtina kontroliuoti fotopolimerizacijos sąlygas. Šiam tikslui yra naudojami fotoiniatoriai—molekulės, kurias apšvietus konkretaus bangos ilgio spinduliuote, yra sukuriama laisvieji radikalai, galintys prisijungti prie monomero molekulių ir taip inicijuoti tinklinimo reakciją [3].

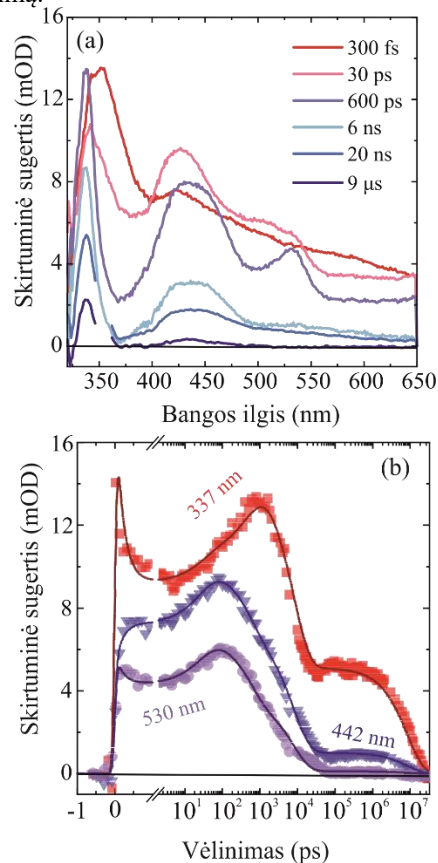
Viena iš populiariausiai naudojamų tokių medžiagų klasių yra fosfino oksido tipo junginiai, iš kurių dažniausiai naudojami fenilbis(2,4,6-trimetilbenzoi)-fosfino oksidas (BAPO) ir (2,4,6-trimethylbenzoi)difenilfosfino oksidas (TPO). Paveikus BAPO junginį UV spinduliuote, jame nutrūksta C-P jungtis, dėl to atsiranda benzoiilo ir fosfinoilo radikalai.

Antrasis, TPO junginys, taip pat pasižymi įdomiomis fotofizikinėmis ir fotocheminėmis savybėmis. Apšvietus šį fotoiniatorių, susidaro trimetilbenzoiilo ir difenilfosfinoilo radikalai, sugeriantys artimojoje UV ir regimojoje srityse.

Siekiant suprasti reaktyviųjų centrų fotodinamiką šiuose junginiuose, buvo atlikta nemažai eksperimentų, tačiau dauguma jų tiria radikalų aktyvumą, maišant juos su skirtingais prepolimerais. Dėl šios priežasties minėtų fotoiniatorių fotofizikinės ir fotocheminės savybės vis dar lieka nesuprastos. Taigi, šiame darbe yra pristatomi išsamūs BAPO ir TPO fotoiniatorių fotofizikinių procesų tyrimai, naudojant ultrasparčiąją ir mikrosekundinę žadinimo-zondavimo spektroskopiją.

1 (a) pav. pavaizduoti BAPO žadinimo-zondavimo spektrai, užregistruoti skirtingais zondavimo laiko momentais. Iš pradžių, praėjus 300 fs po sužadavimo, matome labai plačią indukuotos sugerties juostą, apimančią UV ir regimojo spektro sritis. Ši juosta atitinka molekulės sužadimą į Franko-Kondono būseną, iš kurios ir vystosi tolimesnė fotodinamika. Pirmiausiai, per keletą dešimčių pikosekundžių po sužadavimo, molekulė patiria virsmą į tripletinę būseną, o praėjus dar keletai nanosekundžių, įyksta jos skylimas į radikalus. Tą patvirtina indukuotos sugerties spektrai, rodantys tam būdingus spektrinius pokyčius šioje laiko skalėje. Molekulės virsmą į tripletus įrodo ir eksperimentai, atlikti pašalinus deguonį iš tirpalo, kuris gęsina tripletines būsenas. Šių eksperimentų metu buvo pastebėtas indukuotos sugerties gyvavimo trukmės pailgėjimas, kuris atsistato tirpale atkūrus pradinę deguonies koncentraciją.

Vykstantys dinaminiai procesai geriau vizualizuoti kinetinėmis kreivėmis, pavaizduotomis 1 (b) pav. Pažvelgus į šias kinetikas, galima pastebėti labai įdomią savybę—indukuota sugertis ties 337 nm, 442 nm ir 550 nm, užauga skirtingais laiko momentais. Taip pat akivaizdu yra tai, jog indukuotos sugerties, ties 550 nm, gyvavimo trukmė skiriasi nuo kitų juostų, todėl tai rodo skirtingų centrų susiformavimą ir jų spektrinių juostų persiklojimą.



1 pav. BAPO radikalų (a) žadinimo-zondavimo spektrai ir (b) kinetinės kreivės, išmatuotos ties indukuotos sugerties maksimumais.

Reikšminiai žodžiai: fotopolimerizacija, fotoiniatoriai, skirtuminė sugertis.

Literatūra

- [1] W. Tomal and J. Ortyl, *Polymers* **12**, 1073 (2020).
- [2] K. Ikemura, K. Ichizawa, M. Yoshida S. Ito, T. Endo, *Dent. Mater. J.* **27**, 765–774 (2008).
- [3] A. Alberti, M. Benaglia, D. Macciantelli, S. Rossetti, M. Scoconi, *Eur. Polym. J.* **44**, 3022–30 (2008).

Struktūrinio fazinio virsmo $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ hibridiniame perovskite tyrimas EPR spektroskopija

EPR spectroscopy of structural phase transition in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ hybrid perovskite

Gediminas Usevičius¹, Michael Allan Hope², Justinas Turčak¹, Jūras Banys¹, Mantas Šimėnas¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio av. 9, 10222 Vilnius, Lithuania

²Institute of Chemical Sciences and Engineering, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland

gediminas.usevicius@ff.vu.lt

Recently, hybrid organic-inorganic compounds have attracted an immense attention of the scientific community due to their diverse physical and chemical properties. The most interesting and researched subgroup of hybrid perovskites is methylammonium lead halides $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ (where X = I, Br, Cl), due to their potential applications in efficient and low-cost solar cells, LEDs, and photodetectors [1]. Such properties of these materials is a result of multiple physical attributes such as a suitable band gap and a low carrier recombination [2]. The latter is related to the dynamics of methylammonium cations, whose motion is tightly connected to the structural phase transitions in the material.

Here, we use electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy to study the dynamics of methylammonium cations and structural phase transitions in methylammonium lead chloride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$. In this work, we employ temperature dependent multifrequency continuous-wave (CW) and pulsed EPR spectroscopy to characterize paramagnetic Mn^{2+} probe ions in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$.

The temperature dependent CW spectra reveal the first order phase transition at ~ 175 K. By simulating the experimental CW spectra, we are able to determine the temperature dependence of the zero-field splitting (Fig. 1). It shows a rapid increase with decreasing temperature below 175 K, indicating deformation of the inorganic framework at the tetragonal-orthorhombic phase transition.

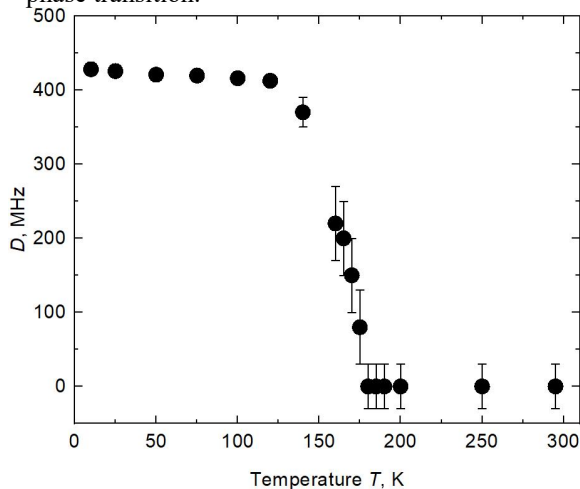


Fig. 1. Temperature dependence of the zero-field splitting.

Using pulsed EPR spectroscopy, we measure relaxation time T_1 and decoherence time T_2 of the Mn^{2+} center in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$. The former is explained by the first-order Raman effect due to optical phonons and the direct relaxation, as depicted in Fig. 2. We relate the obtained phonon energy of $61(4) \text{ cm}^{-1}$ to the dynamics of the inorganic framework.

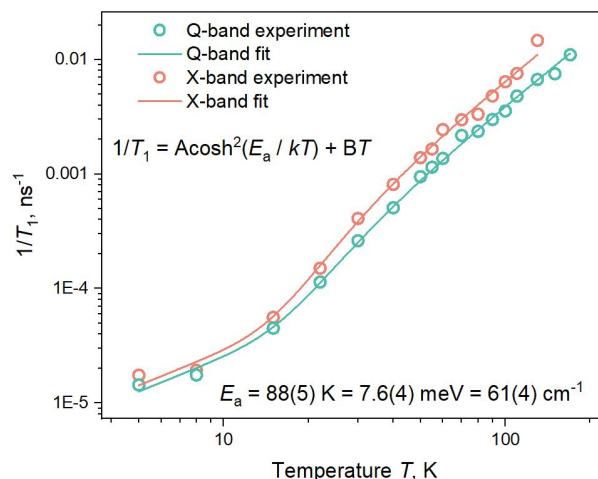


Fig. 2. Temperature dependence of the T_1 relaxation time measured with X- (9.5 GHz) and Q- (35 GHz) band EPR. The experimental data was fitted using the Raman mechanism involving optical phonons.

Keywords: EPR, perovskite, lead halides, phase transition.

This project has been funded by the Research Council of Lithuania (LMTLT) (agreement No. S-MIP-22-73).

Literature

- [1] Adinolfi, V., et al., *Fast and Sensitive Solution-Processed Visible-Blind Perovskite UV Photodetectors*. Adv. Mater. **28**, 7264–7268 (2016).
- [2] Sun, S., et al., *The Origin of High Efficiency in Low-Temperature Solution-Processable Bilayer Organometal Halide Hybrid Solar Cells*. Energy Environ. Sci. **7**, 399–407 (2014).

Amonio cinko formiato, legiruoto šarminiais metais, dielektrinės savybės

Dielectric characteristics of the ammonium zinc formate with alkali metal doping

Barbora Škėlaitė¹, **Sergejus Balčiūnas**¹, Mantas Šimėnas¹, Jūras Banys¹, Mirosław Mączka²

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, P.O. Box-1410, PL-50-950 Wrocław 2, Poland

sergejus.balciunas@ff.vu.lt

Recently, the scientific community has shown significant interest in $[\text{NH}_4][\text{Zn}(\text{HCOO})_3]$ metal-organic framework. Guan-Cheng Xu et al. reported a phase transition from a paraelectric phase ($P6_322$) to a ferroelectric phase ($P6_3$) at a temperature of 181 K [1]. Additionally, metal organic frameworks (MOFs) hold promise for magnetism, given the flexibility to modify metal centers, making them potential candidates for single crystal multiferroic materials. Our initial investigations indicated a propensity for alkali metals to diffuse into the $[\text{NH}_4][\text{Zn}(\text{HCOO})_3]$ structure. Consequently, this study aims to explore the impact of potassium impurities on the dielectric properties within the crystal structure of $[\text{NH}_4][\text{Zn}(\text{HCOO})_3]$.

Dielectric measurements were conducted within the temperature range of 130 K to 300 K and a frequency range of 10 Hz to 1 GHz, utilizing an HP 4284A LCR meter and Agilent 8714ET vector network analyzer. The crystals were carefully oriented to ensure the electrical field was aligned with the z-axis during measurements. Experiments were conducted at cooling/heating rates of 1 K/min. Figures 1 and 2 display temperature and frequency dependence of dielectric permittivity. The preliminary investigation demonstrated a subtle shift in the phase transition temperatures from 180 K to 161 K. Furthermore, the results revealed a noticeable relaxation below the phase transition temperature, likely associated with domain wall motion.

Finally, the experimental data was fitted using a superposition of several Cole-Cole functions. The obtained relaxation times were then approximated using the Arrhenius law. The calculated activation energies for the low-temperature relaxation were found to be $EA=0.15 \pm 0.02$ eV for the pure sample and $EA=0.34 \pm 0.02$ eV for the sample containing 5% potassium impurities. The considerable increase in activation energies could be attributed to the pinning of domain walls to point defects induced by potassium, hindering the motion of domain walls.

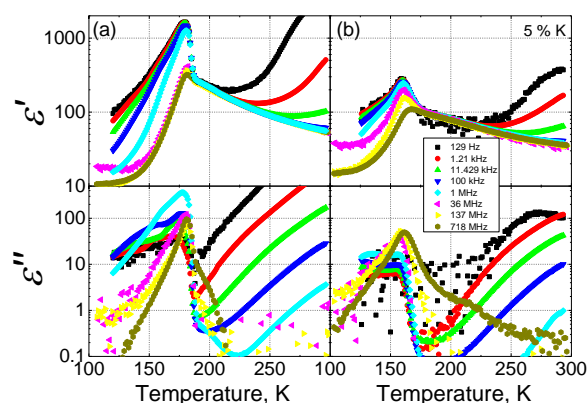


Figure 1 Temperature dependence of the real (top) and imaginary (bottom) parts of dielectric permittivity of $[\text{NH}_4][\text{Zn}(\text{HCOO})_3]$ crystal along the c – axis. (a) pure (b) with 5 % potassium.

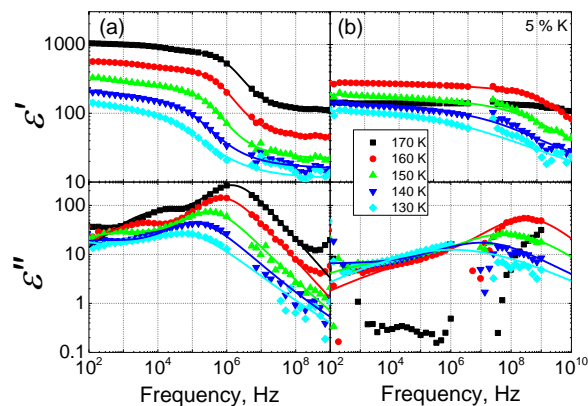


Figure 2 Frequency dependence of the real (top) and imaginary (bottom) parts of dielectric permittivity of $[\text{NH}_4][\text{Zn}(\text{HCOO})_3]$ crystal along the c – axis. (a) pure (b) with 5 % potassium.

Key words: dielectric permittivity, MOFs, perovskites, phase transitions.

Literature

[1] Xu, Guan-Cheng, et al. Journal of the American Chemical Society 133.38 (2011): 14948-14951.

Chromo oksido ir Cr₂O₃ kompozito dangų tribologinių savybių tyrimai

Investigation of tribological properties of chromium oxide and Cr₂O₃ composite coatings

Lukas Bastakys¹, Liutauras Marcinauskas¹, Mindaugas Aikas², Mitjan Kalin³, Romualdas Kėželis²

¹Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų 50, LT-51368 Kaunas, Lietuva

²Lietuvos energetikos institutas, Plazminių technologijų laboratorija, Breslaujos 3, LT-44403 Kaunas, Lietuva

³Laboratory for Tribology and Interface Nanotechnology, Faculty of Mechanical Engineering, University of Ljubljana, Bogišičeva 8, 1000 Ljubljana, Slovėnija.

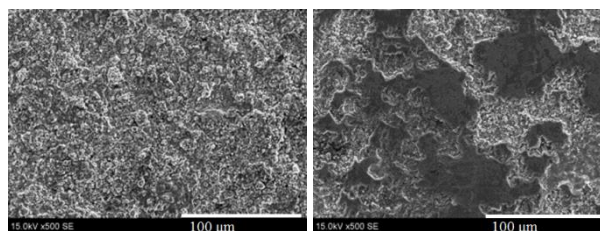
liutauras.marcinauskas@ktu.lt

Chromo oksido dangos yra plačiai naudojamos apsauginių sluoksnių formavimui tribologinėse porose, dėka didelio kietumo ir atsparumo dilimui bei metalinių paviršių apsaugai nuo korozijos [1-3]. Vienas iš dažniausiai taikomų metodų Cr₂O₃ dangų formavimui yra plazminis purškimas. Keičiant plazminio purškimo parametrus (galia, atstumą, miltelių įvedimo vietą ir t.t.) galima valdyti formuojamų Cr₂O₃ dangų mechanines ir tribologines savybes. Nors chromo oksido dangos ir pasižymi reikiamomis tribologinėmis savybėmis, tačiau yra sąlyginai trapios ir dažnai veikiant mechaniniam poveikiui nepakankamos adhezijos [1-4]. Siekiant pagerinti chromo oksido dangų fizikines savybes papildomai įmaišoma nedidelis kiekis TiO₂, Al₂O₃, anglies nanovamzdelių, SiC, CeO₂ ar kitų medžiagų [2, 4-5]. Pagrindinis darbo tikslas buvo suformuoti Cr₂O₃, Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂ ir Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂-grafito dangas ir įvertinti plazmotrono galios bei naudojamų užpildų įtaką gautų dangų tribologinėms savybėms.

Dangų formavimui buvo naudojamas nuolatinės srovės linijinis plazmos generatorius. Formavimui buvo naudoti Cr₂O₃, Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂ ir grafito milteliai. Grafito milteliai buvo įmaišomi į Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂ miltelius santykiu vienas su devyniais pagal masę. Dangų formavimas buvo atliekamas ant plieno padėklų, atmosferos slėgyje, naudojant oro ir vandenilio dujų mišinį [5]. Atstumas tarp plazmos generatoriaus ištekėjimo tūtos ir bandinio paviršiaus buvo 70 mm, o plazmotrono galia buvo ~38,0 kW, ~41,0 kW ir ~44,5 kW. Suformuotų dangų paviršiaus morfologija buvo tiriama skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM). Elementinė sudėtis nustatyta Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija (EDS), o paviršiaus šiurkštis matuotas Mitutoyo SurfTest SJ-210 matuokliu. Fazinė dangų sudėtis tirta Rentgeno spindulių difrakcijos (RSD) metodu. Tribologinės savybės buvo tiriamos naudojant CETR-UMT-2 tribometrą. Tyrimui naudotas Al₂O₃ rutuliukas (10 mm skersmens), 1 N ir 3 N jėgos apkrovos, o dilimo trukmė buvo 120 min.

Elementinės sudėties tyrimai, parodė, kad grafito koncentracija dangose buvo nuo 1 % iki 2 %. Atlikti tyrimai parodė, kad dangų paviršiaus šiurkštumas kito nuo ~2 μm iki ~4 μm priklausomai nuo naudojamos galios ir užpildo rūšies. Didėjant galiai, paviršiaus šiurkštumas nežymiai sumažėjo. Grafito įvedimas leido chromo oksido kompozitų dangų šiurkštumą sumažinti net iki 25 %. Cr₂O₃ dangose dominuoja Cr₂O₃ eskolaito fazė. Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂ ir Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂-grafito dangų rentgenogramose nepavyko užfiksuoti kristaliniam

grafitui, TiO₂ ar SiO₂ junginiams būdingų smailių. Didinant plazmos generatoriaus galią nežymiai keitėsi tik Cr₂O₃ fazei būdingų smailių intensyvumas.



1 pav. Cr₂O₃ dangų paviršiaus vaizdai, prieš (kairėje) ir po (dešinėje) tribologinių tyrimų, naudojant 3 N jėgą.

Nustatyta, kad dangų trinties koeficientas kito nuo 0,30 iki 0,52, priklausomai nuo naudojamos galios, užpildo rūšies ir naudotos jėgos dydžio. Tyrimai parodė, kad naudojant 1 N jėgą, Cr₂O₃, Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂ ir Cr₂O₃-SiO₂-TiO₂-grafito dangų paviršius yra tik nežymiai pažeistas ir nustatyti santykinio dilimo greičio nepavyko, nors plieno padėklo dilimo greitis buvo $6,68 \times 10^{-5} \text{ mm}^3/(\text{Nm})$. Dangų paviršiuje susiformuoja dalinai nutrintos zonos, kontakto vietose, naudojant 3 N jėgą (1 pav.). Cr₂O₃ dangos suformuotos esant ~41 kW galiai, santykinis dilimo greitis buvo $\sim 1,83 \times 10^{-6} \text{ mm}^3/(\text{Nm})$, naudojant 3 N apkrovą. Papildomai naudojant TiO₂-SiO₂ užpildus dangos dilimo greitis siekė $\sim 1,27 \times 10^{-6} \text{ mm}^3/(\text{Nm})$, o įvedus grafito miltelius sumažėjo iki $\sim 0,95 \times 10^{-6} \text{ mm}^3/(\text{Nm})$. Atlikti tyrimai parodė, kad suformuotų dangų trinties koeficientas yra iki 40 % mažesnis lyginant su plieno trinties koeficientu, o santykinis dilimo greitis sumažėja net iki 45 kartų, priklausomai nuo naudotos purškimo galios ir miltelių užpildo rūšies.

Reikšminiai žodžiai: plazminis purškimas, chromo oksido dangos, tribologija, trinties koeficientas.

Literatūra

- [1] V. Ratia, D. Zhang, J. Daure, P. Shipway, D. McCartney, D. Stewart, *Wear*, **426**, 1466–1473 (2019).
- [2] P. Zamani, Z. Valefi, K. Jafarzadeh, *Ceram. Int.*, **48**, 1574–1588 (2021).
- [3] J. Kiilakoski, R. Trache, S. Björklund, S. Joshi, P. Vuoristo, J. Therm. Spray Technol., **28**, 1933–1944 (2019).
- [4] P. Bagde, S. Mehar, S. Sapate, A. Rathod, *Mater. Today Proc.* **56**, 2365–2370 (2022).
- [5] L. Bastakys, L. Marcinauskas, M. Milieška, M. Kalin, R. Kėželis, *Coatings*, **13**(2), 408 (2023).

Nb jonais legiruotų keramikų BiFeO₃-BaTiO₃ dielektriniai tyrimai

Broadband dielectric investigation of Nb-doped BiFeO₃-BaTiO₃ relaxor ceramics

V. Haronin¹, R. Grigalaitis¹, J. Banys¹, Z. Yang², Y. Li², D.A. Hall²

¹Faculty of Physics, Vilnius University, LT-10226 Vilnius, Lithuania,

²Department of Materials, University of Manchester, Manchester, M13 9PL, UK

vadzim.haronin@ff.stud.vu.lt

Electrically active ceramics are widely employed nowadays in electronics, robotics, energy storage, and other fields. [1] A large subset of these are ferroelectric materials that are actively used as piezoelectric sensors and actuators, tunable microwave elements, varactors, etc.

The pseudo-binary solid solution of bismuth ferrite (BiFeO₃, BF) with barium titanate (BaTiO₃, BT) is a potential substitute for PZT, particularly for high-temperature applications. Pure BF has a high ferroelectric-paraelectric phase transition temperature, however it is unsuitable for practical applications due to substantial leakage current and strong coercive field. In contrast, the BF-BT combination has lower electrical conductivity and dramatically better ferroelectric characteristics, particularly with moderate doping of Mn or Nb ions.

Here we present a broadband dielectric study of Nb-doped BF-BT ceramics. The main goal was to explore the low-temperature relaxor-like dispersion to complement the dielectric data published earlier [2].

Dielectric spectra of 0.7BiFe_{0.95}Nb_{0.05}O₃-0.3BaTiO₃ ceramics were measured over a broad frequency range from 20 Hz to 36 GHz, and at temperatures from 200 to 500 K.

The temperature dependences of complex dielectric permittivity of BF-BT-0.5Nb ceramics are shown in Fig. 1. In the imaginary part of the dielectric permittivity this anomaly can be seen as a frequency-dependent maximum, which shifts toward higher temperatures on the increase of the frequency, superimposed on a bigger maximum which arises from the ferroelectric phase transition occurring around 740 K.

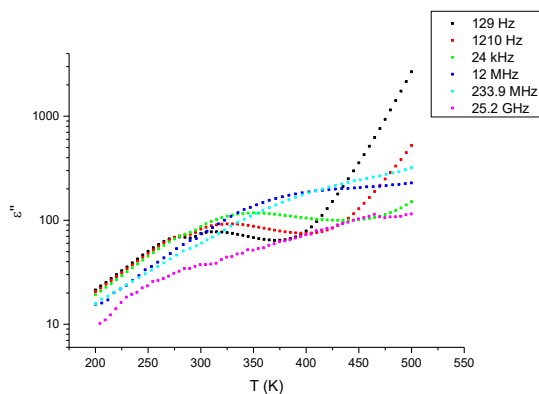


Fig. 1. Temperature dependencies of the imaginary part of a complex dielectric permittivity of 0.5Nb-BiFeO₃-BaTiO₃ ceramics at different frequencies.

At temperatures above 400 we see the qualitatively the same dispersion – both low-frequency and high-frequency dispersions remain active, their temperature evolution shows the same trend and we can use the same procedure for the fitting of their frequency dependencies. However, more careful analysis has indicated weak imperfections of the fit from 0.01 MHz to 1 MHz frequency range (in the vicinity of the minimum of the dielectric losses) and the best fits were obtained including a 3rd Cole-Cole process.

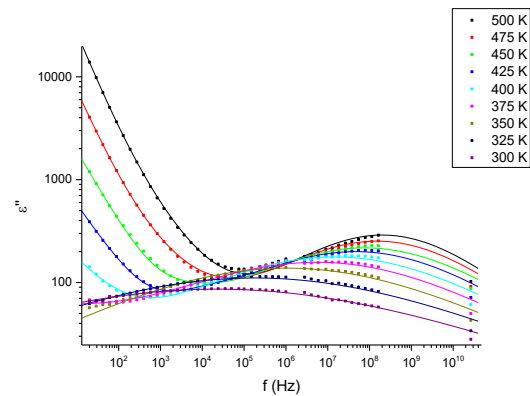


Fig. 2 Frequency dependencies of the imaginary part of a dielectric permittivity data of 0.5Nb-BiFeO₃-BaTiO₃ ceramics at different temperatures.

For analysis of the dielectric spectra, we used an empirical Cole-Cole equation to model the experimental permittivity data, to estimate the dielectric parameter values. Simultaneously, the Levenberg-Marquardt algorithm based non-linear least square method was used in the fitting procedure. OriginLab software implementing these algorithms was used to fit the experimental data with the following formula:

$$\varepsilon^*(\omega) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_{\infty i} + \frac{\Delta \varepsilon_i}{1 + (i\omega\tau_i)^{1-\alpha_i}}, \quad (1)$$

Keywords: BF-BT, dielectric measurement, Cole-Cole equation.

References

- [1] N. Setter and R. Waser, "Electroceramic materials," *Acta mater.*, vol. **48**, pp. 151–178, 2000
- [2] Z. Yang et al., "Re-entrant Relaxor Ferroelectric Behaviour in Nb-Doped BiFeO₃-BaTiO₃ Ceramics", *J. Mat. Chem. C* (in press), 2023.

PbHf_{1-x}Sn_xO₃ kristalų dielektriniai tyrimai

Broadband dielectric measurements of PbHf_{1-x}Sn_xO₃ single crystal

V. Haronin¹, Irena Jankowska-Sumara², Andrzej Majchrowski³, Olga Suvorova¹, Robertas Grigalaitis¹, Juras Banys¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio al. 3, 10257, Vilnius, Lithuania

²Faculty of Exact and Natural Sciences, Pedagogical University of Cracow, Podchorążych 2, 30-084 Krakow, Poland

³Institute of Applied Physics, Military University of Technology, ul. Gen. Kaliskiego 2, 00-908 Warsaw, Poland
vadzim.haronin@ff.stud.vu.lt

The lead-based perovskite oxides are chemically disordered compounds that have attracted considerable scientific interest due to their ferroelectric, antiferroelectric, and relaxor properties [1]. PbHf_{0.92}Sn_{0.08}O₃ exhibit phonon spectra near the center of Brillouin zone that is dominated by a soft transverse optic (TO) mode that reaches a minimum frequency on cooling and then hardens at lower temperatures [2]. Concurrent with the decrease in frequency, the frequency range of this mode broadens in energy until it becomes heavily damped, but only for wave vectors near the zone center.

PbHfO₃, a well-known antiferroelectric material, undergoes a first-order structural phase transition from a high-temperature paraelectric phase to a low-temperature antiferroelectric phase. Doping with different elements, such as tin (Sn), has shown promise in modifying the electrical properties and inducing the appearance of new intermediate phases.

In this study, we present a comprehensive investigation of the electrical properties of PbHf_{0.92}Sn_{0.08}O₃ using dielectric spectroscopy. The aim of this work is to characterize mode softening during the phase transition in microwave frequency range.

Dielectric spectra of PbHf_{0.92}Sn_{0.08}O₃ (later PHS) ceramics were measured in a broad frequency range from 20 Hz to 3 THz at temperatures 300 – 500 K.

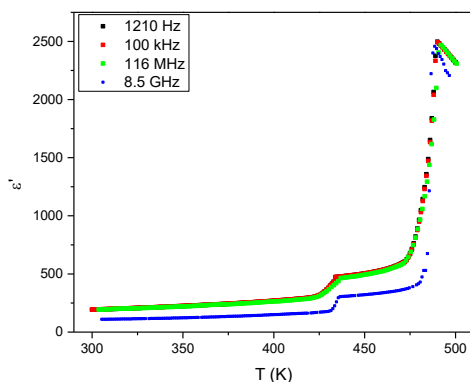


Fig. 1. Temperature dependencies of the real part of a complex dielectric permittivity of PHS ceramics at different frequencies.

The frequency dependences of complex dielectric permittivity (Fig. 2) reveal three separated processes. Based on this graph we see a rise of some peak near 1

GHz when temperature coming close to the Curie temperature. That peak due to its sharpness couldn't be explained by Debye or Cole-Cole type of dispersion.

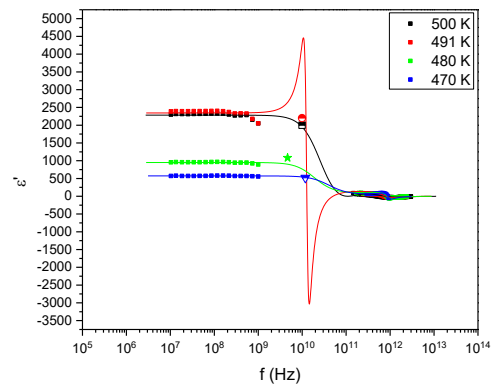


Fig. 2 Frequency dependencies of the real part of a dielectric permittivity data of PHS ceramics at high temperatures. Lines shows the best fits of experimental data points by formula (1).

So, to analyze that peak we could use the resonance dispersion formula as a superposition of 2 fitted peaks, one of them in GHz region and another in THz region.

$$\varepsilon(\omega) = \sum_{n=1}^2 \frac{A_n}{\omega_{0n}^2 + \omega_n^2 + i\omega_n g_n} \quad (1)$$

The first part of the equation is used to describe the rise of imaginary part of dielectric constant, that we see in end of spectrum of our coaxial measurement (around 1 GHz) and beginning of waveguide measurements (from 0.15 THz). The second part of an equation describes a much smaller peak in THz region of measurement.

Keywords: PHS, lead-based ceramics, dielectric measurements, resonance frequency.

References

- [1] G. A. Samara, "The relaxational properties of compositionally disordered ABO₃ perovskites," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. **15**, no. 9, 2003.
- [2] I. P. Swainson et al., "Soft phonon columns on the edge of the Brillouin zone in the relaxor PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O₃," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. **79**, no. 22, 2009.

Impulsinio lazerinio garinimo būdu užaugintų PZT epitaksinių sluoksnių elektrinės savybės

Electrical properties of epitaxial Lead Zirconate Titanate grown by Pulsed Laser Deposition

V. Haronin^{1,2}, M. Alexe², R. Grigalaitis¹, J. Banys¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, LT-10226 Vilnius, Lithuania

²Department of Physics, University of Warwick, Coventry CV4 7AL, UK

vadzim.haronin@ff.stud.vu.lt

Due to their high dielectric constant, piezoelectric and pyroelectric coefficients, ferroelectric materials are already being utilized in various applications such as high-k dielectric materials, transducers, actuators, and sensors [1]. Among many types of ferroelectric materials, lead zirconate titanate (PZT) is well known as a world-leading ferroelectric material for piezoelectric applications [2].

Still, thick PZT films with electrical characteristics comparable to the bulk equivalent are difficult to achieve, owing to crack formation lead and lead oxide volatility and a number of other flaws in thin film processing.

To solve those issues the technique of Pulsed Laser Depositions (PLD) was employed. PLD is a promising technique for PZT-film fabrication because it offers a high deposition rate (usually > 100 nm/h), high crystalline quality, and unaltered stoichiometry, as well as very good surface morphology which eases the fabrication of high-quality test structures devices such as plan-parallel capacitors.

The aim of this work is to investigate the dielectric and piezoelectric properties of PZT film by fabricating metal-ferroelectric-metal structures of epitaxial PZT films on a lanthanum strontium manganite (LSMO) with a top copper and gold contacts.

The polarization reversal (ferroelectric switching) within the sample is indicated by the positive and negative notable peaks of the measured current. A shift toward the positive side of the loop suggests that there is an internal field (E_{in}) directed toward the top electrode.

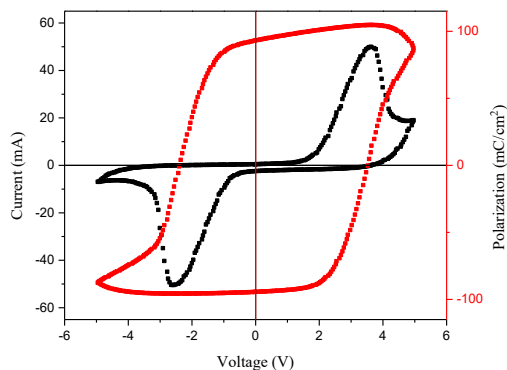


Fig. 1. Polarization and current hysteresis loops obtained for a LSMO/PZT/Cu/Au ferroelectric capacitor by applying a triangular voltage pulse with a frequency of 1 kHz.

The observed dispersions in high-frequency tails can be accurately modeled by the classical Cole-Cole functions. However, these functions fail to predict the low-frequency plateaus of ϵ and σ , and instead, a function of the constant phase-angle (CPA) type appears to provide a more accurate description of the data in the low-frequency region of the plots.

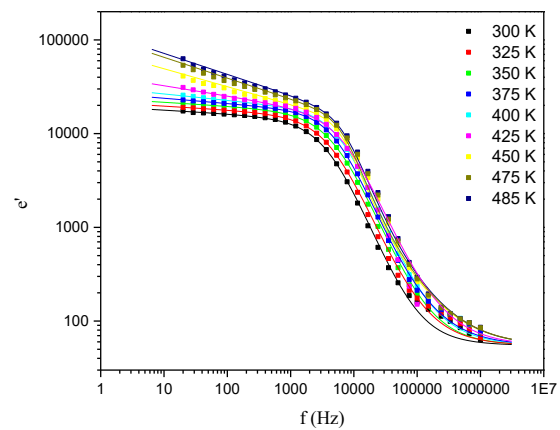


Fig. 2. Real part of the dielectric constant at different temperatures. The solid lines are fits of the data points with the Raicu relation (1).

Fit was made with this formula which also takes into account the contribution of dc conduction, which may be encountered experimentally at the low-frequency side, as proposed by Raicu.

$$\epsilon(j\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\sigma}{j\omega} + \frac{\epsilon(0) - \epsilon_{\infty}}{[(j\omega\tau)^{\alpha} + (j\omega\tau)^{1-\beta}]^{\gamma}} \quad (1)$$

Keywords: PZT, thin film, PLD, dielectric spectroscopy, piezoelectric measurement.

Reference

- [1] O. Auciello, "Science and technology of thin films and interfacial layers in ferroelectric and high-dielectric constant heterostructures and application to devices," *J. Appl. Phys.*, vol. **100**, no. 5, 2006,
- [2] L. P. Silva Neto, J. O. Rossi, and A. R. Silva, "Applications of PZT dielectric ceramics in high-energy storage systems," *Mater. Sci. Forum*, vol. **727–728**, pp. 505–510, 2012

Mikrobangų ekranavimo priklausomybė nuo temperatūros fosfatais surišiose CoFe_2O_4 - $x\text{BaTiO}_3$ keramikose

Microwave shielding efficiency as a function of temperature for phosphate-bonded CoFe_2O_4 - $x\text{BaTiO}_3$ multiferroic composite ceramics

Darya Meisak¹, Artyom Plyushch¹, Jan Macutkevici¹, Robertas Grigalaitis¹, Aliaksei Sokal², Konstantin Lapko², Algirdas Selskis³, Polina Kuzhir⁴, Juras Banys¹

¹Vilnius University, Faculty of Physics, Sauletekio al. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

²Affiliation-independent researchers

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

⁴University of Eastern Finland, Institute of Photonics, Department of Physics and Mathematics, Yliopistokatu st. 7, FI-80101 Joensuu, Finland

darya.meisak@ff.vu.lt

Development of the materials with high electromagnetic (EM) shielding ability is extremely necessary due to the existence of EM interference problems that could seriously affect the normal operation of electronic components.

For planar geometry, two microwave EM shielding cases are noted. The first mode is the non-reflective planar surface with a mirror behind, the so-called Salisbury screen geometry. While the second one is free-standing layers of the radar absorbing material, which would desirably provide as low transmission as possible in combination with high absorption. Both distinguished cases have already found a huge number of potential applications including antennas, radars, anechoic chambers, cloaking, imaging, etc. [1].

However, despite the significant efforts and valuable results in this direction, most of the work is devoted to room temperature region. While the temperature effect on EM shielding has been studied extremely rarely [2], although slight temperature changes might dramatically affect the electromagnetic response of the composite.

Primarily, carbon materials and their structures [3] are known as remarkable candidates for EM shielding applications, however, additionally, this list has been expanded by phosphate bonded inorganic materials [4], which also turned out to be prospective options for this purpose. Moreover, on the one hand, the hexaferrites or spinels (CoFe_2O_4 , or NiFe_2O_4) addition is interesting due to possible synergism between different phases. On the other hand, ferroelectrics (like BaTiO_3) have high dielectric permittivity and therefore are prospective for EM shielding in microwaves.

Current research is devoted to numerical and experimental studying of the effect of the temperature and composition on EM shielding efficiency for the case of CoFe_2O_4 - BaTiO_3 -based phosphate-bonded unsintered ceramics. A series of CoFe_2O_4 - $x\text{BaTiO}_3$ ($x=0.4$ – 0.9) composite ceramics will be prepared and studied both in 'Salisbury screen' geometry and as a free-standing layer in the frequency range of 25–54 GHz and temperature interval of 120–500 K. For instance, the average shielding efficiency of the free-standing layer (4 mm-thick) at room temperature in free space is presented in Fig. 1. The SE was evaluated using formulas $SE_R = -10\log_{10}(1 -$

$R)$, $SE_A = -10\log_{10}(1 - A_{eff})$, and $SE_T = SE_A + SE_R$, where $A_{eff} = (1 - R - T)/(1 - R)$, R is reflection, T is transmission and A is absorption. The dominant mechanism of SE is absorption. The total shielding efficiency reaches 30 dB for the CFO-0.9BTO sample layer. Therefore the composite system is promising for many applications.

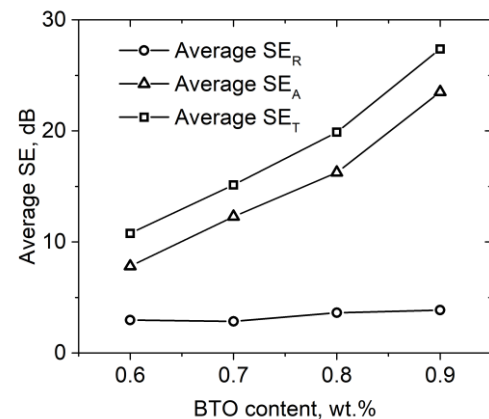


Fig. 1. Average reflection and absorption losses and total shielding efficiency over the 25–54 GHz frequencies (Ka and V bands) at room temperature

Besides, the sensitivity of the electromagnetic response of multiferroic composite ceramics in microwaves to small temperature variations (about 5–10 K) will be demonstrated and discussed.

Keywords: phosphate-bonded ceramics, barium titanate, cobalt ferrite, EMI shielding efficiency, microwaves.

Literature

- [1] R. Panwar, J.R. Lee, Functional composites and structures **1(3)**, 032001 (2019).
- [2] Z. Barani, et al, Advanced Electronic Materials, **6(11)**, 2000520 (2020).
- [3] L. Vovchenko, et al, Applied Nanoscience, **12(4)**, 1037-1049 (2022).
- [4] A. Plyushch, et al, Applied Physics Letters, **12(4)**, 1037-1049 (2022).

Dielektrinės ir triboelektrinės UIO-66/PEBA kompozitų savybės

Dielectric and triboelectric properties of UIO-66/PEBA composites

Martynas Kinka¹, Linards Lapčinskis³, Sergejus Balčiūnas¹, Robertas Grigalaitis¹, Gediminas Usevičius¹, Fa-Kuen Shieh², Andris Šutka³ and Jūras Banys¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

²Department of Chemical Engineering, National Taiwan University, Taipei 10617, Taiwan

³Institute of Materials and Surface Engineering, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University, P. Valdena str. 3/7, Riga LV-1048, Latvia
martynas.kinka@ff.vu.lt

In recent years, a search for materials possessing higher triboelectric performance has intensified. This interest stems from the desire to find materials suitable for enhancement of triboelectric nanogenerator (TEENG) device efficiency. TEENG devices, introduced in 2012, represent a pioneering concept to convert surplus mechanical energy into electricity, thereby allowing to power autonomous micro devices. This innovation shows significant promise to mitigate the environmental impact associated with the traditional energy production and battery usage.

Recently UIO-66 metal-organic frameworks (MOFs) with various linker modifications were identified as promising filler materials in mixed matrix membranes (MMM) for TEENG devices [1]. Such composites allow preservation of the original excellent properties and low preparation cost of polymers while the addition of functional fillers can effectively improve triboelectric properties of the membranes [2,3]. Energy harvesting is mainly affected by charge-inducing ability (surface properties) and charge-trapping capability (dielectric property) of triboelectric materials. MOFs contain metallic and organic counterparts thus different contact electrification mechanisms may coexist. In this study we have focused on broadband dielectric properties of several selected polyether block amide (PEBA)/UIO-66 mixed matrix membranes aiming at investigation of dynamic processes and filler/matrix interaction in these composites.

PEBA-based nanocomposite films were prepared with 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2 and 5 wt% UIO-66 and modified UIO-66-NH₂ concentrations. Dielectric properties of these MMM were measured in 150 K – 360 K and 1 Hz – 1MHz frequency range using computer controlled ModuLab XM MTS impedance measurement system and compared with the response of vanilla polyether block amide sample. This allowed us to identify the influence of the filler/matrix interaction on the glass transition and melting/crystallization relaxations of polyether (PE) and polyamide (PA) segments. Incorporation of UIO-66 crystallites increases glass transition temperature in PEBA matrix. On further heating Maxwell-Wagner relaxation process of interfacial polarization resulting from the existence of well separated phases involving ionic charge carriers was observed. Modification of UIO-66 linkers with -NH₂ groups showed much stronger

MOF-polymer interaction and increase in dielectric permittivity as compared with pure UIO-66 MMM.

Results of composite contact-separation show that at concentrations below 0.2 wt.% the addition and also the type of MOF makes no great influence on the triboelectric properties of the composite. However, when UIO-66 content reaches 0.5 wt.% the UIO-66/PEBA composites tend to obtain a negative charge while UIO-66-NH₂/PEBA composites remain positively charged. For UIO-66-NH₂/PEBA composite film content of 2 wt.% was found to yield the highest charge density, however the increase is small. At the same time, for UIO-66/PEBA the optimal content of MOF filler was seen at 1 wt.%. At this content the UIO-66/PEBA composite reached charge density of -3.0 nC cm⁻².

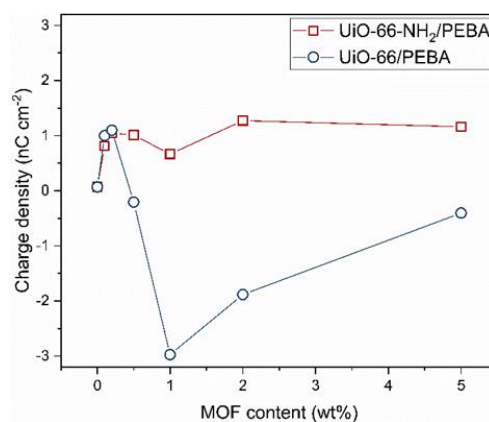


Figure 1. Charge density of UIO-66/PEBA and UIO-66-NH₂/PEBA composite based contact layers as a function of MOF content in them.

Keywords: dielectric, triboelectric, TEENG, MOF

References

- [1] Y.-M. Wang, *Nanotechnology*, 2022, 10.1088/1361-6528/ac32f8
- [2] A. Šutka *Adv. Mater. Technol.*, 2022, 10.1002/admt.202200162
- [3] Y. Hu, *Macromol. Mater. Eng.*, 2021, 10.1002/mame.202100128

Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} kietojo elektrolito impedanso spektrų modeliavimas ekvivalentine grandine ir analizė DRT metodu

Impedance spectra of Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} solid electrolyte analysed by DRT method and equivalent circuit modelling

Algimantas Kežionis¹, Tomas Šalkus¹, Magdalena Dudek², Dominika Madej³, Michał Mosiałek⁴, Bogna Daria Napruszewska⁴, Wiesław Łasocha⁴, Muhammad Bilal Hanif⁵, Martin Motola⁵

¹Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio 9-3, 10222 Vilnius, Lithuania

²AGH University of Science and Technology, Faculty of Fuels and Energy, Cracow al. Mickiewicza 30, Poland

³AGH University of Science and Technology, Faculty of Materials Science and Ceramics, Department of Ceramics and Refractories, al. A. Mickiewicza 30, 30-059, Krakow, Poland

⁴Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Niezapominajek 8, PL-30239 Krakow Poland

⁵Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Ilkovicova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia
tomas.salkus@ff.vu.lt

Zirconia based oxygen conductors are state of the art solid electrolytes for solid oxide fuel cell applications [1]. In order to achieve high ionic conductivity, the most promising doping of ZrO₂ is by Sc₂O₃ and Al₂O₃ [2, 3]. In the present work we focus our investigation on double doped zirconia by aluminum oxide and scandium oxide. The Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} electrolyte was prepared via Pechini method. In the temperature range 300-800 K, the structure of this material is cubic with some fraction of monoclinic modification, while above 800 K a phase transforms to purely cubic.

The Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} electrolyte in the form of ceramics was investigated by broadband impedance spectroscopy in the frequency range from 0.03 Hz to 8 GHz and in temperature interval from 300 to 980 K. The equivalent circuit analysis and distribution of relaxation times (DRT) techniques were used to analyze impedance spectra. Three kinds of relaxation processes are clearly distinguishable on impedance spectra. The first process is observed in low frequency range at lower temperatures (400 K) and it moves continuously through the entire frequency interval up to GHz range with temperature increase. This charge carriers relaxation process is located within ceramic grains. At high temperatures, in Hz diapason, the second very strong relaxation process is observed. This relaxation process of charge carriers is located at the sample - electrode interface. In frequencies in between of grain process and interface process a third relaxation process is observed, which is related to ceramics grain boundaries.

The DRT peaks were described by Gaussian probability density functions. The relaxation, which was attributed to the bulk relaxation process, was a dual peak at low temperatures, meanwhile it became a single relaxation process at higher temperatures. The complexity of high frequency relaxation process observed in the DRT representation of the spectra at temperatures up to 500 K was associated with two zirconia phases.

The temperature dependencies of conductivities and

relaxation times show interesting behaviour. The relaxation process, which was related to monoclinic phase, is governed by the relaxation process related to cubic phase above 500 K. Still the activation energy of grain relaxation process associated to cubic phase changes in the vicinity of phase transition, which points out, that cubic phase in the temperature region below and above 800 K (which is a phase transition temperature) is not the same. X-ray diffraction data shows some small change of crystal lattice size. This may be a reason for changing of potential relief and consequently the activation energy for mobile ions during this phase transition.

Our study shows that the activation energies, corresponding to the observed relaxation processes, can be determined more accurately from the DRT analysis as compared to equivalent circuit modelling of impedance data.

A laboratory fuel cell based on Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} as an electrolyte membrane (0.8 mm thick) was demonstrated. Ni-Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} cermet was used as the anode and two layers were used as cathode – the first one Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95}-LSM composite and the second one LSM. The fuel cell gives ~206 mW cm⁻² of power at 1123 K.

Keywords: solid electrolyte, impedance spectroscopy, ionic conductivity, distribution of relaxation times, solid oxide fuel cell.

Literature

- [1] M. B. Hanif, S. Rauf, Z. ul Abadeen, K. Khan, Z. Tayyab, S. Qayyum, and M. Motola, *Matter* **6**(6), 1782 (2023).
- [2] C. X. Guo, J.X. Wang, C.R. He, W.G. Wang, *Ceramics International* **39**(8), 9575 (2013).
- [3] M. Sriubas, D. Virbukas, N. Kainbayev, K. Bockute, G. Laukaitis, *Coatings* **11**(7), 800 (2021).

Padėklo įtaka bario cerato plonų dangų mikrostruktūrai ir elektrinėms savybėms

Influence of substrate on the microstructure and electrical properties of barium cerate thin films

Kristina Bočkutė, Monica Susana Campos Covarrubias, Giedrius Laukaitis

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

kristina.bockute@ktu.lt

Įvairiose elektrocheminėse sistemose, kaip jutikliai ir kietųjų oksidų elektrocheminiai elementai (SOEC), naudojamos plonasluoksnės dangos. Norint kurti ir gaminti tokias plonasluoksnės sistemas, pasižyminčias pageidaujamosiomis savybėmis, labai svarbu suprasti ir kontroliuoti dangų formavimo procesą. Iš daugelio plonų dangų formavimo technologijų, garinimas elektronų pluoštu yra gerai pritaikytas dangų formavimo metodas medžiagoms, kurių lydymosi temperatūra yra aukšta [1], pvz., tokiems metalų oksidams, kaip bario ceratai ir cirkonatai. Šio dangų formavimo metodo pranašumas - galimybė kontroliuoti augimo greitį ir difuziją, dėl kurios gaunama skirtinga morfologija. Taip pat, šis formavimo metodas gali būti tam tikrų struktūrinių defektų šaltinis. Bario cerio oksidas (BaCeO_3 , BCO) su priemaisomis yra plačiai tiriamas dėl savo pritaikymo protonams laidžių elektrinių sluoksnių gamybai. Bario cerato pagrindu pagamintų plonų dangų protoninis laidumas yra svarbi funkcinė savybė, susijusi su taškiniais defektais (pvz., vakansijomis, Frenkelio ar Šotkio defektais) ir 1D ar 2D defektais, įskaitant su dislokacijomis susijusį joninį laidumą [2].

Šiame darbe aptariamos ant įvairių padėklų suformuotų garinant elektronų pluoštu BCO plonų dangų savybės. Naudojantis Kurt J. Lesker EB-PVD 75 garinimo elektronų pluoštu sistema, buvo suformuotos BCO plonos dangos ant Inconel 600 lydinio, MgO (001), YSZ (001) ir Al_2O_3 (0001) padėklų, esant 500 °C, 600 °C ir 700 °C padėklo temperatūrai garinimo metu. Visų gautų dangų storis, išmatuotas Ambios Technology XP-200 profilometru, buvo maždaug 1,5 μm. Santykinis suformuotų BCO dangų tankis ant Inconel 600 ir MgO padėklų siekė 98 %, o YSZ ir Al_2O_3 padėklų - 97 %.

Plonų dangų struktūrinė analizė atlikta Bruker D8 Discover rentgeno spindulių difraktometru, o kristalinės gardelės parametrai apskaičiuoti TOPAS ir Le Bail metodais. Tekstūros koeficientai, apibūdinantys kristalinių orientaciją, apskaičiuoti pagal (1) lygtį.

$$TC_{(h_i, k_i, l_i)} = \frac{I_{(h_i, k_i, l_i)}}{I_{0(h_i, k_i, l_i)}} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{I_{(h_i, k_i, l_i)}}{I_{0(h_i, k_i, l_i)}} \right\}^{-1}, \quad (1)$$

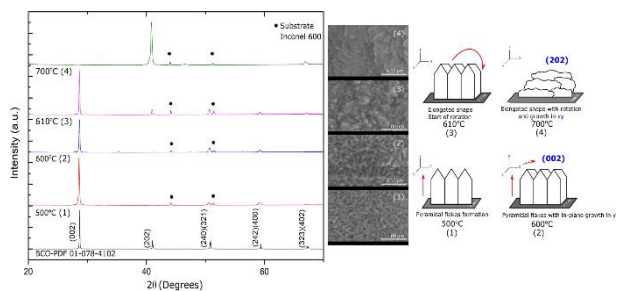
čia $I_{(h_i, k_i, l_i)}$ yra (h_i, k_i, l_i) smailės intensyvumas iš difraktogramos, o $I_{0(h_i, k_i, l_i)}$ atitinka PDF 01-078-4102 šaltinį, N – smailių skaičius difraktogramoje. Paviršiaus topografija ir skerspjūvio vaizdai gauti naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM) Hitachi S-3400N, elementinė sudėtis įvertinta naudojant Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrą (EDS)

Bruker XFlash QUAD 5040. Suformuotų dangų elektrinės savybės tirtos elektrocheminės impedanso spektroskopijos (EIS) metodu.

Šio tyrimo metu nustatyta, kad padėklo temperatūra turėjo įtakos BCO plonų dangų fazinei sudėčiai, morfologijai ir elektrinėms savybėms. BCO plonos dangos, suformuotos ant Inconel 600 padėklo 500 °C - 700 °C temperatūroje, turėjo vienfazę ortorombinę BCO kristalinę fazę. Norint gauti vienfazes plonasluoksnės BCO struktūras, suformuotas ant monokristalinių padėklų, padėklo temperatūra turėjo būti ne mažesnė negu 600 °C. Padėklų temperatūra taip pat turėjo įtakos kristalografinei orientacijai ir plonų dangų morfologijai.

Taip pat buvo nustatyta, kad priklausomai nuo padėklų rūšies ir dangų formavimo temperatūros, kinta BCO plonų dangų augimo mechanizmas, pvz., BCO danga ant Inconel 600 padėklo 500 °C temperatūroje auga dėl adatomų difuzijos kinetinio augimo proceso, o aukštesnėje temperatūroje vyksta grūdelių sukimasis ir tolesnis šoninis augimas; ant monokristalinių padėklų vyrauja šoninis augimas.

Nustatyta, kad laidumo vertės ir aktyvavimo energija labiausiai priklauso nuo plonos dangos mikrostruktūros, ypač nuo kristalografines grūdelių orientacijos, o laidumas mažėja dėl plonų dangų įtempių relaksacijos.



1 pav. BCO plonų dangų, suformuotų 500-700 °C temperatūroje ant Inconel 600 padėklo 2 Å/s greičiu XRD difraktogramos. Plonų dangų, nusodintų ant Inconel 600 padėklo esant skirtingoms temperatūroms, mikrostruktūros raidos modelis

Reikšminiai žodžiai: bario ceratai, mikrostruktūra, plonos dangos, garinimas elektronų pluoštu.

Literatūra

- [1] Y. Lin, X. Chen, Advanced nano deposition methods (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2016).
- [2] M.D. Armstrong, K.-W. Lan, Y. Guo, and N.H. Perry, ACS Nano 15(6), 9211 (2021).

Magnetoelktrinė sąveika fosfatais surištuose BaTiO₃ – xCoFe₂O₄ multiferoiniuose kompozituose.

Magnetolectric coupling in phosphate-bonded bulk BaTiO₃ – xCoFe₂O₄ multiferroic composites.

A. Plyushch¹, D. Lewin², R. Grigalaitis¹, V.V. Shvartsman², J. Macutkevič¹,
P. Kuzhir³, D.C. Lupascu² and J. Banys¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio Al. 9, Vilnius, LT-10222, Lithuania,

²Institute for Materials Science and Center for Nanointegration Duisburg-Essen (CENIDE), University of
Duisburg-Essen, Universitätsstraße 15, 45141 Essen,

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

artyom.plyushch@ff.vu.lt

Magnetolectric composite multiferroics are materials that can be polarized through the application of an external magnetic field or magnetized with an external electric field. Magnetolectric materials are promising for a wide range of practical applications in multifunctional devices such as AC and DC magnetic field sensors, current sensors, energy harvesters, transducers, memories and spintronic logics, and microwave interference shielding materials. In contrast to single-phase multiferroics, like BiFeO₃, composite multiferroics demonstrate an enhanced working temperature range and higher coupling coefficients. The coupling in two-phase composites usually occurs through the mechanical strain mediation at the interfaces. Therefore, the mechanical contact of the different phases is a factor the extreme importance in material design.

The critical step in the synthesis of the magnetolectric materials is the sintering of the ferroelectric and ferromagnetic (FE and FM) components into one material since their chemical and structural properties are very different. Due to interdiffusions and high-temperature reactions, the purity of the FE and FM phases drastically decreases [1,2]. This reduces possible combinations of FE and FM powders that can be sintered together, down to very few actually feasible, like BaTiO₃ - CoFe₂O₄ or BaTiO₃ - NiFe₂O₄. But even working with these material pairs, researchers encounter many difficulties.

The report delivers a novel approach to the synthesis of composite magnetolectrics. Phosphate binding of powders was utilised instead of the sintering. Such a method allows avoiding the unexpected reactions at interfaces, diffusion. At the same time, the absence of the sintering step means that grains of both phases remain of the same size. That allows to develop of composites with extremely high interface surface area. Bulk BaTiO₃-xCoFe₂O₄, x=0.1–0.6 magnetolectric composites were prepared using the phosphate bonded ceramics approach. XRD analysis proved the purity of both phases. The dielectric properties are governed by a series of composition-dependent Maxwell-Wagner relaxations and conductivity at lower frequencies and a phase transition-related anomaly at higher frequencies. A dielectric constant as high as 616 – 9387i is observed at

500 K for x=0.6. The measured direct magnetolectric coupling coefficient of 1.1 mV Oe⁻¹ cm⁻¹ is higher than that of the conventionally sintered ceramics and compatible with that of core-shell structures.

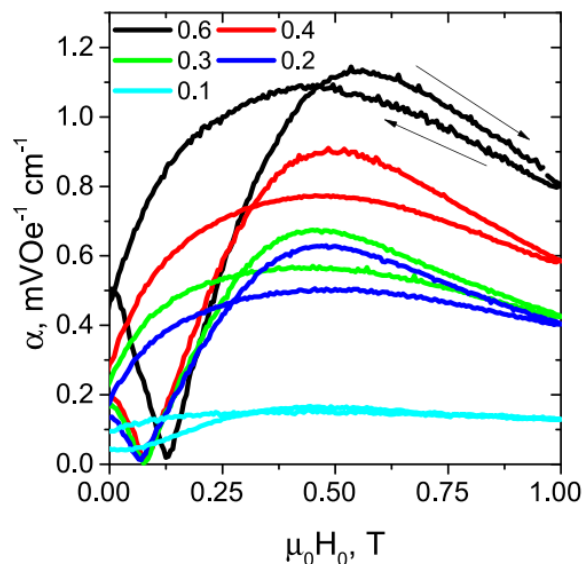


Figure 1: Amplitude of the magneto-electric coupling coefficient for the samples with different x.

Keywords: phosphate-bonded ceramics, barium titanate, cobalt ferrite, multiferroics, magnetolectrics, magnetolectric coupling.

Literature

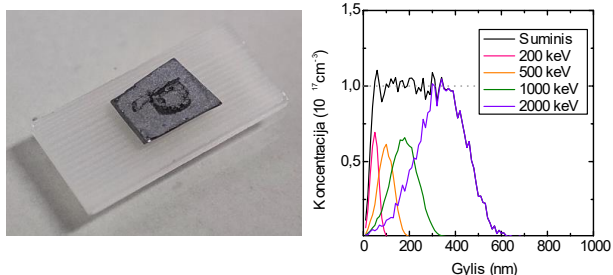
- [1] C. Gumiel, M.S. Bernardo, P.G. Villanueva, T. Jardiel, J. De Frutos, A.C. Caballero, M. Peiteado, *J. Mater. Sci.* **52**(7), 4042–4051, (2017).
- [2] M. Murakami, K.-S. Chang, M. Aronova, C.-L. Lin, M.H. Yu, J.H. Simpers, M. Wuttig, I. Takeuchi, C. Gao, B. Hu, et al., *Appl. Phys. Lett.* **87** (11), (2005).

^{171}Yb jonų, implantuotų į CaWO_4 paviršių, EPR tyrimai**EPR study of ^{171}Yb ions implanted in CaWO_4 surface**

Justinas Turčak¹, Vidmantas Kalendra¹, Jūras Banys¹, Mantas Šimėnas¹
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
justinas.turcak@ff.vu.lt

Viena perspektyviausių kvantinių technologijų platformų yra elektronų sukinių kietojo kūno matricose [1, 2]. Jie pasižymi pakankamai ilgu koherentiškumo laiku, bet taip pat ir galimybe būti valdomi mikrostruktūromis, tokiais kaip mikrorezonatoriai [3]. Siekiant užtikrinti efektyvią sąsają tarp sukinių ir tokios magistralės, elektronų sukiniai turi būti labai arti (iki kelių šimtų nanometrų gylyje) medžiagos paviršiaus. Tai gali būti pasiekama implantuojant paramagnetinius jonus į dielektrikų paviršius. Didelės energijos implantavimo metu sukuriama struktūriniai defektai, kurie mažina aktyvių paramagnetinių centrų kiekį ir trumpina koherentiškumo laiką. Šios problemos sprendžiamos medžiagas atkaitinant aukštoje temperatūroje, kuri leidžia gardelei nurelaksuoti į tvarkingą struktūrą. Visgi atkaitinimo tyrimai yra gana reti, todėl dažnai optimalūs įvairių medžiagų atkaitinimo parametrai nėra žinomi.

Čia pristatomas iterbio jonų, implantuotų į kalcio volframato (CaWO_4) paviršių, elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) spektroskopijos tyrimas. Iterbio paramagnetiniai centrai yra daug žadantys sukinių kubitai, kadangi iterbis, būdamas retųjų žemių metalu, turi ypač ilgą koherentiškumo laiką dėl apsaugotų f-lygmens elektronų [4]. CaWO_4 taip pat pasižymi puikiomis tokių kubitų matricos savybėmis – ši medžiaga turi itin mažą izotopų su branduolių sukiniiais kiekį. Iterbis buvo implantuojamas iki 500 nm gylio su pastovia 10^{17} cm^{-3} jonų koncentracija (žr. 1 pav.). Visas jonų kiekis ($\sim 10^{12}$) bandiniuose skiriasi priklausomai nuo jų dydžio.

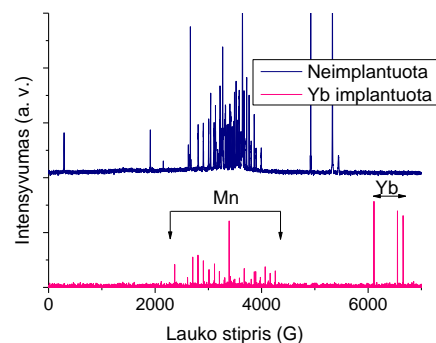


1 pav. CaWO_4 bandinys, kurio dydis 8 mm x 3.8 mm x 0.6 mm, ir silicio, legiruoto su fosforu, bandinys (kairėje). Kartu pateikiamas iterbio implantavimo profilis (dešinėje).

Atkaitinimo efektai buvo tiriami atliekant atkaitinimą su SNOL 0,2/1200 krosnimi: vienas iš bandinių buvo atkaitinamas 800 °C temperatūroje 1, 4 ir 13 valandų, suminiam 1, 5 ir 18 valandų atkaitinimui, o kitas bandinys buvo atkaitinamas 1250 °C temperatūroje su tais pačiais atkaitinimo laikais. Skirtingų atkaitinimo

procedūrų efektai buvo tiriami matuojant koherentiškumo laikus ir sukinių koncentraciją bandiniuose. Matavimai buvo atliekami X srities mikrobangų ruože ($\sim 9.5 \text{ GHz}$). Jautrumo pagerinimui, buvo naudojamas modifikuotas kriogeninis stiprintuvas [5] ir eksperimentai buvo atliekami bandinius atšaldant iki žemų temperatūrų ($< 10 \text{ K}$). Koherentiškumo laikas buvo nustatomas matuojant Hahn aido slopimo eksperimentą. Sukinių koncentracija buvo įvertinta lyginant EPR spektro intensyvumą su Si:P etalonu.

CaWO_4 kristalo EPR spektras yra pateiktas 2 pav. su ir be implantuoto iterbio. Atlikus spektrinį modeliavimą, buvo nustatytos iterbio linijos. Taip pat kartu buvo stebėti paramagnetiniai Mn^{2+} centrai, kurių prigimtis nėra aiški. Taip pat nustatyta, kad kartu su ^{171}Yb buvo implantuoti ir kiti iterbio izotopai.



2 pav. Iterbiu implantuoto (viršuje) ir neimplantuoto (apačioje) CaWO_4 spektrai.

^{171}Yb tyrimui buvo pamatuota temperatūrinė koherentiškumo laiko priklausomybė 4,5 – 15 K temperatūrų ruože. Naudojant EPR spektroskopiją nustatyti iki 0,3 ms koherentiškumo laikai ir iki 32 % sukinių aktyvacija.

Reikšminiai žodžiai: atkaitinimas, elektronų sukiniai, koherentiškumo laikas, EPR.

Literatūra

- [1] A. M. Tyryshkin et al., Electron spin coherence exceeding seconds in high-purity silicon, *New Materials*, 12, 143-147 (2012).
- [2] G. Wolfowicz et al., Atomic clock transitions in silicon-based spin qubits, *Nature technology*, 8, 561-564 (2013).
- [3] J. O'Sullivan et al., Spin-Resonance Linewidths of Bismuth Donors in Silicon Coupled to Planar Microresonators, 14, 064050 (2020).
- [4] U. Ranon and V. Voltera, Paramagnetic Resonance of Yb^{3+} in CaWO_4 , *Phys. Rev.* 134, A1483 (1964).
- [5] M. Šimėnas et al., A sensitivity leap for X-band EPR using a probehead with a cryogenic preamplifier, *Journal of Magnetic Resonance*, Volume 322, 106876 (2021).

Manganitų plonųjų sluoksnių elektrinių bei magnetinių savybių tyrimas Monte Karlo metodu

Investigation of the electrical and magnetic properties of thin manganite films using Monte Carlo method

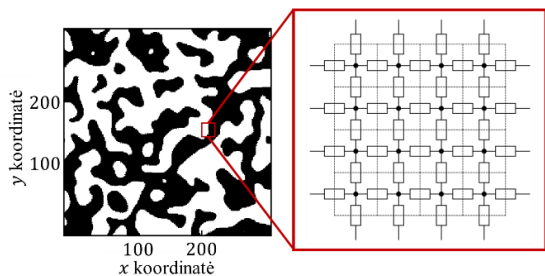
Jorūnas Dobilas^{1,2}, Voitech Stankevič², Nerija Žurauskienė², Evaldas Tornau², Skirmantas Keršulis²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
jorunas.dobilas@ff.stud.vu.lt

Po kolosalios magnetovaržos (angl. „colossal magnetoresistance CMR) atsiradimo manganitai tapo plačiai nagrinėjama medžiaga. Plonieji sluoksniai, pagaminti iš šių medžiagų, pasižymi didele magnetovarža (iki 99 %) stipriuose magnetiniuose laukuose (iki 100 T) ir plačiame temperatūrų ruože [1]. Keičiant šių sluoksnių auginimo sąlygas galima pasiekti didelį magnetinio lauko jautrį kambario temperatūroje, todėl manganitai taikomi magnetinio lauko jutiklių pramonėje [2]. Fizikinių procesų aprašymui buvo pateikta keletas modelių, tačiau kokybinis auginimo parametrų sąryšis su šiomis savybėmis vis dar tyrinėjamas [3][4].

Norint sumodeliuoti minėtųjų plonųjų manganitų sluoksnių elektrines ir magnetines savybes, buvo sukurtas Monte Karlo metodu pagrįstas modelis. Šis modelis susideda iš Ising'o ir varžų tinklo modelių (žr. 1 pav.). Ankstesnysis aprašo magnetines, o pastarasis – elektrines savybes.



1 pav. Ising'o gardelės konvertavimas į varžų tinklą

Ising'o modelio standartinis hamiltonianas vienam gardelės mazgui užrašomas tokiu būdu:

$$H_i = \mu_B g B_z S_{iz} - J S_{iz} \sum_{\langle i,j \rangle} S_{jz}, \quad (1)$$

čia μ_B – Bohr'o magnetonas, g – giromagnetinis santykis, B_z – magnetinio srauto tankio z projekcija, S_{iz} – i -tojo sukinių z projekcija ir J – pakaitinės sąveikos konstanta. Antrajame naryje sumuojama tik artimiausius kaimynus sukiniui i .

Norint pritaikyti Ising'o modelį polikristaliniams manganitų sluoksniams, jis buvo modifikuotas įvedant pakaitinės sąveikos konstantos funkcinę priklausomybę nuo koordinatės, t.y. $J = J(\mathbf{r})$. Tuomet kristaliniuose $J = J_G$ ir tarpkristalitinėje terpėje $J = J_{GB}(\mathbf{r}) \leq J_G$.

Ising'o gardelės varža taip pat skaičiuojama naudojant Monte Karlo metodiką. Iš vieno gardelės šono yra paleidžiama N elektronų. Elektronų tikimybė pereiti

iš vieno gardelės mazgo į kitą yra proporcinga to kelio laidumui. Kiekvieno kelio laidumas apibrėžiamas iš dviejų komponentų:

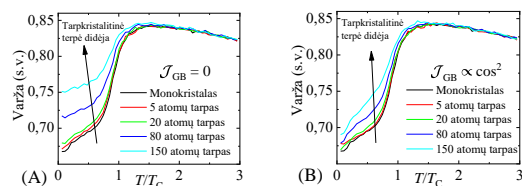
$$G_i = G(T) + G_1 S_i \cdot s, \quad (2)$$

čia $G(T) \propto \exp\left(\frac{a}{T}\right)$ yra savitasis laidumas, apibrėžiamas pagal Mott'o modelį, G_1 – sukinių sklaidos laidumas (dvigubos pakaitos mechanizmas), S ir s – atitinkamai mazgo ir elektrono sukinių projekcijos.

Sumodeliavus 300×300 matmenų Ising'o gardelę su keičiamu tarpkristalitinės terpės plokiumi, apskaičiuotos varžos ir magnetovaržos priklausomybės nuo temperatūros ir magnetinio lauko stiprio. Gauti rezultatai parodė panašias charakteristikas lyginant su realiomis medžiagomis.

Temperatūrinė varžos priklausomybė pasižymi eksponentiniu kitimu aukštesnėse negu Curie (T_C) temperatūrose. Tuo tarpu, dėl magnetinio fazinio virsmo, žemesnėse temperatūrose varža sumažėja. Šis sumažėjimas auga plonėjant tarpkristalitinei terpei (žr. 2 pav.). Nagrinėjant magnetovaržą nuo magnetinio lauko stebima histerzė, kurios maksimumo taškai yra ties įmagnetėjimo koercinio lauko vertėmis. Taip pat, didėjant tarpkristalitinei terpei šie maksimumai mažėja, kas stebima ir realiuose bandiniuose.

Tinkamai parinkus modelio parametrus galima įvertinti auginimo sąlygų įtaką plonųjų manganitų sluoksnių elektrinėms ir magnetinėms savybėms.



2 pav. Varžos priklausomybės nuo temperatūros, sunormuotos į T_C , esant skirtingiems tarpkristalitinės terpės plokiumams. Parinktos pakaitinės sąveikos terpėje funkcijos $J_{GB} = 0$ (A) ir $J_{GB} \propto \cos^2$ (B).

Reikšminiai žodžiai: Manganitai, magnetovarža, Monte Karlo metodai

Literatūra

- [1] N. Žurauskienė et. al. IEEE Transactions on Magnetism **50(11)** p. 1-4 (2014)
- [2] N. Žurauskienė Sensors **23** p. 2939 (2023)
- [3] S. Panwar et al. Solid-State Communications **223** p. 32-36 (2015)
- [4] J. E. Evetts et al. Philosophical Transactions of the Royal Society of London **356(1742)** p. 1593-1615 (1998)

Rentgeno spinduliuote paveiktų kalcio pirofosfatų polimorfų kietojo kūno BMR tyrimas

Solid state NMR study of X-ray exposed calcium pyrophosphate polymorphs

Aurimas Dubauskas¹, Vytautas Klimavičius¹, Diana Griesiūtė², Aivaras Kareiva², Andris Antuzevics^{2,3}, Aleksej Žarkov²

¹Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

²Vilniaus universitetas, Chemijos institutas, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius, Lietuva

³Latvijos universitetas, Kietojo kūno fizikos institutas, Kengaraga 8, LV-1063, Ryga, Latvija

aurimas.dubauskas@ff.stud.vu.lt

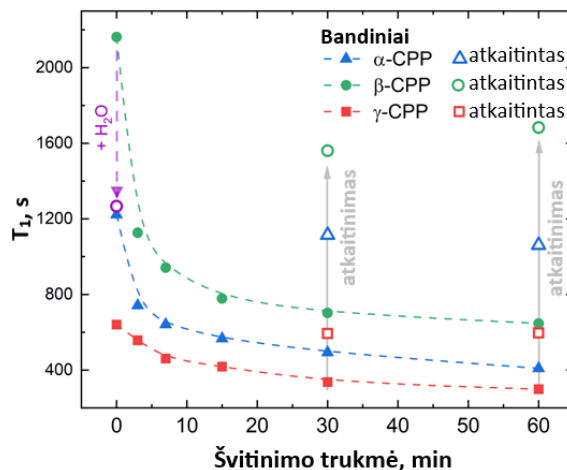
Kalcio fosfatai (CaP) yra plačiai naudojami ir tyrinėjama medžiagų grupė, kuri pasižymi savo biologiniu aktyvumu. CaP yra naudojami kaulų regeneracijoje, kaulinių implantų dengimui siekiant pagerinti jų biologinį aktyvumą [1], sunkiųjų metalų sugėrimui iš vandens [2], jutikliuose, skirtuose tiesioginiam fosfatų aptikimui vandenyje [3]. Labiausiai ištirti ir medicinoje daugiausiai naudojami kalcio ortofosfatai yra hidroksiapatitas (HA, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$), trikalcio fosfatas (TCP, $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$) ir oktakalcio fosfatas (OCP; $\text{Ca}_8\text{H}_2(\text{PO}_4)_6 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$).

Kalcio pirofosfatas (CPP, $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$) yra reliatyviai mažiau ištirta medžiaga pasižyminti biologinėmis ir optinėmis savybėmis. CPP turi tris polimorfus (α , β ir γ), kurie atsiranda kaitinant keramikas skirtingose temperatūrose, iš jų daugiausiai yra tiriamas β -CPP.

Norint taikyti CPP kaip biosuderinamas medžiagas svarbu įvertinti jų molekulinės/kristalines savybes ir sukurti molekulinės struktūros ir makroskopinių savybių sąryšius. Tam yra nemažai tinkamų metodų, pavyzdžiui, Rentgeno spindulių difrakcija (XRD), Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių (FTIR), termiškai sužadintos liuminescencijos (TSL) ar elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) spektroskopijos.

Šio darbo tikslas buvo ištirti skirtingų kalcio pirofosfatų polimorfų (α -CPP, β -CPP ir γ -CPP), paveiktų Rentgeno spinduliais, stabilumą ir patikrinti ar BMR spektroskopijos metodu įmanoma registruoti struktūrinius skirtumus, atsiradusius dėl Rentgeno spinduliuotės poveikio.

Švitintus bandinius Rentgeno spinduliais registruojamuose ^1H ir ^{31}P BMR spektruose nestebėjome smailių padėčių pokyčių, tai gardelės deformacijų detektavimui pasinaudojome ^{31}P branduolių sukinių-gardelės relaksacijos laiko T_1 matavimais. Sukinių-gardelės relaksacijos laikas T_1 buvo matuojamas naudojant įsotinimo-atgavimo metodą. Bandiniai buvo išsausinami juos palaikant vakuume kameroje vieną parą, nes laisvosios vandens molekulės yra papildomai atiduodama ^{31}P sukinių energija. Efektyvaus relaksacijos kanalo įtaką T_1 laikui stebime pirmajame paveiksle, kai sudrėkinto bandinio relaksacijos laikas sumažėja per pusę. Buvo pastebėtas relaksacijos laikų trumpėjimas kuo ilgiau bandinius švitinome Rentgeno spinduliais (1 pav.). Taip pat pastebėjome, kad polimorfų paramagnetinių centrų (radikalų) kiekį galima sumažinti šias medžiagas atkaitinant 600 °C temperatūroje.



1 pav. CPP polimorfų sukinių-gardelės T_1 laikų priklausomybės nuo bandinių Rentgeno spinduliais apšvitinimo laiko.

Stebėtas ^{31}P sukinių-gardelės dinamikas ir grįžtamumą į pirmines vertes galima išnaudoti gaminant naujos kartos sensorius ir detektorius, kurie yra suderinami su biologiniais audiniais.

Dėkojame Lietuvos mokslo tarybai (S-ST-23-125) už tyrimų finansavimą.

Reikšminiai žodžiai: CPP, branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektroskopija, sukinių-gardelės relaksacija.

Literatūra

- [1] J. Jeong, J.H. Kim, J.H. Shim, et al. Biomater. Res. 23, 4 (2019).
- [2] D. Griesiute, j. Gaidukevic, A. Zarkov, A. Kareiva. Sustainability 13, 7859 (2021).
- [3] S. Sun, Q. Chen, S. Sheth, G. Ran, Q. Song. ACS Sensors 5, 541–548 (2020).

Nusodinimo temperatūros įtaka bismuto ferito ir bismuto titanato plonų plėvelių feroelektrinėms savybėms

Influence of deposition temperature on ferroelectric properties of bismuth ferrite and bismuth titanate thin films

Andrejus Litvakas¹, Aleksandras Iljinas^{1,2}, Vytautas Stankus¹, Vytautas Čiapas²

¹Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

²Kauno kolegija, Technologijos fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas
andrejus.litvakas@ktu.edu

Bismuto titanatas (BIT) ir bismuto feritas (BFO) yra vienos perspektyviausių bešvinės feroelektrinės medžiagos. Šios medžiagos yra puikūs kandidatai į išliekamosios laisvosios kreipties atminties FRAM feroelektrinės ir MRAM magnetorezistinės laisvosios kreipties atminties gamybai. BIT ir BFO plėvelių feroelektrinės savybės priklauso nuo padėklo medžiagos savybių (gardelės parametru ir šiluminio plėtimosi koeficiento), nusodinimo būdo, fazinės struktūros, plėvelės storio ir kitų savybių. Nusėdimo sąlygos ir padėklo temperatūra yra svarbiausi veiksniai, turintys įtakos elektrinėms ir magnetinėms BIT ir BFO plonų plėvelių savybėms. Šiame darbe tirtos bismuto titanato ir bismuto ferito plėvelių struktūrinės, morfologinės ir feroelektrinės savybės.

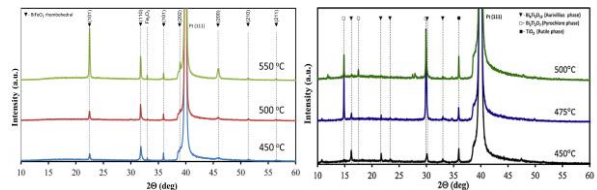
Plonos bismuto ferito ir bismuto titanato oksido plėvelės buvo nusodintos ant platinuoto silicio padėklo reaktyvaus magnetroninio sluoksnis po sluoksnio nusodinimo metodu deguonies dujų aplinkoje ($p = 1,33$ Pa slėgyje), esant įvairioms padėklo temperatūroms. Kaip padėklas buvo naudojama daugiasluoksnė sistema Pt/Ti/SiO₂/Si. Pt, Ti ir SiO₂ sluoksnių storis atitinkamai buvo 200 nm, 50 nm ir 1000 nm.

Plėvelių nusodinimas buvo atliekamas naudojant periodinį ir lygiagrečių padėklo judėjimą virš magnetronų. Siekiant užtikrinti maždaug vieno atominio sluoksnio Bi₂O₃ arba Fe₂O₃ ir TiO₂ plėvelių storį, buvo pasirinktas 3s judesio periodas. Buvo naudojami trijų colių skersmens Bi arba Fe ir Ti diskiniai taikiniai (Kurt J. Lesker Company, Bi ir Ti 99,999 % grynumo).

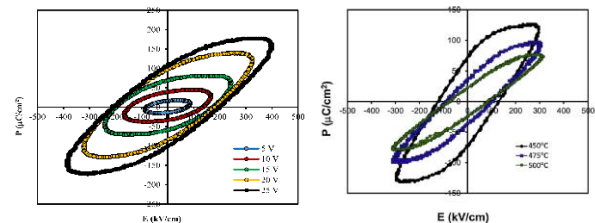
Šio magnetroninio nusodinimo metu mėginių temperatūra buvo keičiama nuo 400 °C iki 500 °C temperatūros. Magnetrono galia ir nusodinimo laikas (30 min.) buvo pasirinkti tokie, kad susidarytu 500 nm storio plėvelės. Mėginiai buvo analizuojami naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM) (RAITH-e-LiNE, Raith GmbH). Grūdelių dydis buvo nustatytas naudojant naudojant iSolution DT programinę įrangą.

Plonų plėvelių kristalografinė struktūra ištirta rentgeno spindulių difrakcija (XRD) (Bruker D8 serijos difraktometras naudojantis monochromatinę Cu K α spinduliuotę su Bragg-Brentano geometrija).

Histerezei matuoti buvo pritaikytas Sawyer ir Tower poliarizacijos-elektrinio lauko (P-E) metodas (1 k Ω varža ir 150 nF kondensatorius).



1 pav. Užaugintų dangų rentgenogramos. Kairėje - BFO (nusodintu 450 °C, 500 °C ir 550 °C temperatūroje), dešinėje - BIT (nusodintu 450 °C, 475 °C ir 500 °C temperatūroje).



2 pav. BFO dangos (kairėje) ir BIT (dešinėje) P-E histerezės kilpos

Histereze kilpų matavimai parodė, kad nusodintos BIT ir BFO plėvelės pasižymi feroelektrinėmis savybėmis. Taip pat, rezultatai parodė, kad šių medžiagų struktūra ir feroelektrinės savybės labai priklauso nuo auginimo temperatūros. BFO plėvelei, nusodintai 550 °C temperatūroje, buvo gautas didžiausias 210 kV/cm koercinis laukas ir 115 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ liekamoji poliarizacija. Tai lemia plonos plėvelės nuotėkio srovė, kurią sąlygoja erdvės krūvio riboto laidumo mechanizmas.

BIT plėvelei, nusodintai 450 °C temperatūroje, buvo gautas didžiausias 130 kV/cm koercinis laukas ir 73 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ liekamoji poliarizacija. Tyrimas parodė, jog feroelektrinės savybės yra labai jautrios plėvelių stochiometrijai.

Reikšminiai žodžiai: BIT, BFO, bismuto titanatas, bismuto feritas, feroelektrinės savybės.

Br₂I₂Py molekulių monomerinių, dimerinių ir polimerinių struktūrų modeliavimas

Modeling of Br₂I₂Py monomeric, dimeric and polymeric molecular structures

Andrius Ibenskas¹, Mantas Šimėnas², Evaldas Tornau¹

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

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

andrius.ibenskas@ftmc.lt

Halogeniniai (X···X) ryšiai tarp organinių halidų molekulių turi įdomių savybių ir yra tiriami greta kitų nekovoalentiųjų sąveikų dėl pritaikymo gaminant tvarkingas supramolekulines struktūras ant Au, Ag ir Cu paviršių [1]. X···X ryšys susidaro tarp vienos molekulės halogeno atomo elektroneigiamos srities ir kitos molekulės halogeną juosiančio elektroneigiamo žiedo.

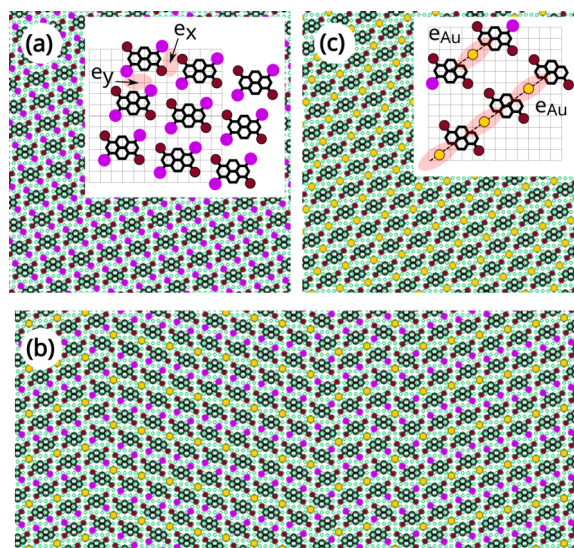
Organinių halidų ansambliai dažnai stabilizuojami bendrai X···X ir vandenilniais ryšiais. Vienas iš pavyzdžių yra 1,6-dibromo-3,8-dijodopireno (Br₂I₂Py) molekulių jungimasis lygiagrečiomis eilėmis į tvarkingą (monomerinę) struktūrą kambario temperatūroje [2]. Čia molekulė yra supama keturių tokių pat kaimynų, su kuriais ji suformuoja Br···I, Br···H ir I···H ryšius.

Dalis Br₂I₂Py molekulių jau kambario temperatūroje praranda vieną jodo atomą. Dvi vienąkart dejoduotos molekulės (Br₂I₂Py·) gali susijungti C–Au–C ryšiu per Au atomą į metalo-organinį dimerą. Tokie dimerai sudaro tvarkingą fazę, kuri koegzistuoja su monomerine faze ant Au(111) [2]. Pašildžius iki 100°C, nuo molekulių atskykla ir likęs jodo atomas. Gautas dukart dejoduotos molekulės (Br₂I₂Py··) rišasi su kaimynais iš dviejų pusių C–Au–C jungtimis. Taip susidaro vienmatės polimerinės grandinės, kurios išsidėsto lygiagrečiai viena kitai.

Šiame darbe tiriami Br₂I₂Py molekulių susitvarkymą į dvimates monomerines, dimerines ir polimerines struktūras bei jų koegzistavimą ir atsiskyrimą. Molekulių tvarkymasis valdomas pagal mūsų išplėtotą porinių tarpmolekulinių sąveikų modelį ant kvadratinės gardelės (1 pav., intarpai). Porinės sąveikos $e_x = -5.5$ ir $e_y = -6.8$ (kcal/mol) išilgai gardelės x ir y ašių apskaičiuotos optimizuojant molekulių dimerus ir tetramerus tankio funkcionalo teorijos metodais. Abi sąveikos gali būti smulkiau išskaidytos į X···X ir X···H ryšius. Dalis šių ryšių yra nutraukiami, kai molekulės praranda jodą, tada e_x ir e_y susilpnėja. Modelyje kaip variacinį parametą taip pat įvedame metalo-organinę sąveiką e_{Au} (C–Au–C) tarp dviejų dejoduotų molekulių.

MC skaičiavimuose su porinių sąveikų modeliu buvo imamos įvairios sveikų ir dejoduotų molekulių koncentracijos, tokiu būdu atsižvelgiant į temperatūros didinimo efektą. Kiekvienai koncentracijai gautas atitinkamas žemiausios energijos molekulių išsidėstymas. Kai sistemą sudarė tik sveikos molekulės (Br₂I₂Py), buvo stebimas susitvarkymas į monomerinę fazę (1a pav.), kas atitinka eksperimentą kambario temperatūroje. MC rezultatai taip pat patvirtino, kad vienąkart dejoduotos molekulės suformuoja dimerų fazę (1b pav.), o dukart dejoduotos – polimerinę struktūrą

(1c pav.). Tuo tarpu dvikomponenčių mišinių susitvarkymas labai priklauso nuo e_{Au} . Kai $e_{Au} \approx e_x \approx e_y$, sveikų ir vienąkart dejoduotų molekulių mišinys suformuoja vientisą salą, kuriame dimerų juostos įsiterpia į monomerinę fazę, arba atvirkščiai (priklausomai nuo dominuojančios komponentės). Ta pati tendencija būdinga vienąkart ir dukart dejoduotų molekulių mišiniui, kuriam tvarkantis persipina dimerinės ir polimerinės struktūrų fragmentai. Kai e_{Au} labai stipri ($e_{Au}/e_y > 2$), visuose mišiniuose vyksta fazių atsiskyrimas pagal komponentes, t. y. į monomerinę, dimerinę arba polimerinę struktūras. Stipri e_{Au} nulemia, kad dejoduotų molekulių domenuose prie struktūrinių defektų atsiranda neužpildytų erdmių. Kiekybiškai mišinių struktūra buvo analizuojama skaičiuojant polimerinių grandinelių ilgius. Nustatyta, kad ilgesnės grandinės susidaro stiprinant e_{Au} ir ypač didinant dukart dejoduotų molekulių skaičių mišinyje.



1 pav. (a) Sveikų, (b) vienąkart dejoduotų ir (c) dukart dejoduotų Br₂I₂Py molekulių tvarkingi dvimačiai išsidėstymai, atitinkantys kambario ir aukštesnę temperatūras. Spalviniai žymėjimai: violetinė (I), ruda (Br), geltona (Au), juoda (pireno žiedai).

Reikšminiai žodžiai: molekuliniai sluoksniai, pirenai, halogeninis ryšys, Monte Carlo metodas, tankio funkcionalo teorija.

Literatūra

[1] G. Cavallo, P. Metrangolo et al., Chem. Rev. **116**, 2478 (2016).

[2] M. Lischka, M. Fritton et al., J. Phys. Chem. C **122**, 5967 (2018).

Fotocheminiu būdu susintetintų sidabro nanodalelių struktūriniai ir antivirusiniai tyrimai

Structural and Antiviral Investigations of Photochemically Synthesized Silver Nanoparticles

Mindaugas Ilickas¹, Asta Guobienė¹, Brigita Abakevičienė^{1,2}

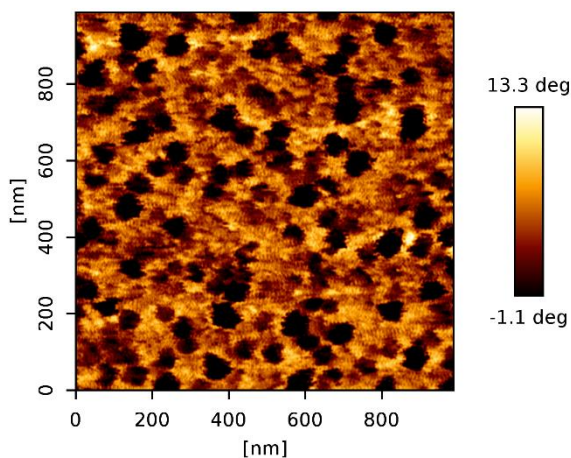
¹Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

²Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

mindaugas.lickas@ktu.edu

Siekiant kovoti su didelio atsparumo bakterijų ir virusų padermėmis yra siūloma naudoti sidabro nanodaleles (AgNd). AgNd yra gerai žinomos nanodalelės, plačiai naudojamos virusinėms infekcijoms atpažinti, gydyti ir neutralizuoti [1]. Dalelėms, kurių bent du matmenys iš trijų yra mažesni nei 100 nm, labai svarbu ištirti galimą toksiškumą. Sidabro nanodalelės pastaruoju metu sulaukė didelio dėmesio tarp nanodalelių kaip potencialios antibakterinės/antivirusinės medžiagos [2], dėl to sidabro pagrindu sukurti biocidai tampa vis plačiau naudojami. AgNd galima sintetinti įvairiais metodais: fizikiniu, cheminiu ar biologiniu.

Šiame darbe dangoms ant kvarcinio stiklo padėklų formuoti buvo naudojamas UV spindulių fotocheminės sintezės metodas, taikant modifikuotą daktaro peilio (angl. *doctor blade*) dengimo techniką. Sidabro nitratas (AgNO₃) buvo naudojamas kaip pirmtakas (angl. *precursor*), o AgNO₃ tirpalas buvo įterpiamas į polivinilbutiro (PVB) matricą. Eksperimentai atlikti aplinkos sąlygomis naudojant dviejų bangos ilgių UV šviesos šaltinį (Desaga Heidelberg 220V, 75W), kurio bangos ilgiai yra 254 nm (intensyvumas 1,64 mW/cm²) ir 366 nm (intensyvumas 0,80 mW/cm²). Dangų struktūrinės savybės analizuotos įvairiais metodais: atominių jėgų mikroskopija (AFM), UV-Vis-NIR spektroskopija ir vandens kontaktinio kampo (WCA) matavimais. Įvertinti antivirusinėms savybėms, sintetinis SARS-CoV-2 virusas buvo naudojamas vieno etapo atvirkštinės transkripcijos realaus laiko (qRT) PGR tyrimams.



1 pav. AgNd-PVB-30M nanokompozitinės dangos atominių jėgų mikroskopijos 2D fazinis vaizdas

AgNd-PVB nanokompozitinės dangos buvo analizuotos įvairiais metodais. Šių tyrimų rezultatai parodė, kad AgNd polimerinėje PVB matricoje pasiskirstė tvarkingai. Ilgėjant UV spinduliuotės poveikio trukmei, pastebėtas AgNd skersmens sumažėjimas nuo 120 iki 20 nm, nedidelis elastingumo pokytis ($7,6 \pm 0,6$ N/m) ir dideli adhezijos jėgos pokyčiai. Šie rezultatai rodo, kad nanodalelių dydį ir adhezijos jėgą galima kontroliuoti reguliuojant UV spindulių apšvitos laiką. Eliminavus PVB polimero signalą, AgNd-PVB nanokompozitinių dangų sugerties spektrai buvo užfiksuoti ir analizuojami 200-900 nm bangos ilgio diapazone. Pastebėta, kad UV-Vis spektroskopijos rezultatai sutampa su AFM matavimais, o tam tikri bangos ilgiai atitinka tam tikrus AgNd dydžių intervalus (t. y. 438 nm bangos ilgis atitinka AgNd, kurių dydis ~20-40 nm, 439 nm - AgNd, kurių dydis ~30-50 nm, 442 nm - AgNd, kurių dydis ~90-100 nm, ir 499 nm - AgNd, kurių dydis ~100-110 nm). Be to, nustatytas suformuotos PVB dangos kontaktinis kampas - 87,1°. Didėjant UV spinduliuotės apšvitos trukmei ir mažėjant AgNd dydžiui, į PVB polimerų tinklą įterptų nanodalelių drėkinimo kampai taip pat mažėjo. Antivirusinės savybės buvo įvertintos naudojant vieno žingsnio qRT-PGR metodą. Pasirinkta danga, kuri eksponuota 30 min UV šviesoje, kaip efektyviausia, nes vidutinis aukštis siekė 8,16 nm. Buvo išbandytos skirtingos AgNd koncentracijos (150 ppm, 200 ppm, 500 ppm ir 1000 ppm). Didžiausia koncentracija (1000 ppm) visiškai sunaikino virusinę medžiagą, o mažesnės koncentracijos taip pat reikšmingai sumažino virusinės medžiagos kiekį. Kontroliniuose šulinėliuose buvo didesnės Ct vertės, rodančios sumažėjusį virusinės medžiagos kiekį.

Reikšminiai žodžiai: fotocheminė sintezė, sidabro nanodalelės, UV-Vis spektroskopija, nanokompozitinės dangos.

Literatūra

- [1] K. Khoshnevisan, et al. *Nanoscale Research Letters* **16**(1) (2021).
 [2] M. Hemmati, et al. *Nanomedicine Research Journal* **1**(1) (2016).

Ag_{1-x}Li_xNbO₃ (x≤0,08) keramikos dielektrinė spektroskopija

Dielectric Spectroscopy of Ag_{1-x}Li_xNbO₃ (x≤0.08) Ceramics

Edita Palaimienė¹, Jan Macutkevič¹, Jūras Banys¹, Ewa Talik², Antoni Kania²

¹ Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

² Institute of Physics, University of Silesia in Katowice, UL 75 Pulku Piechoty 1, PL-41-500 Chorzow, Poland
edita.palaimiene@ff.vu.lt

The search for new materials with optimal piezoelectric properties is an important goal of materials science. It is believed that piezoelectric lead-free niobate materials can be an alternative to already known and used piezoelectric materials [1]. One such material is from the perovskite structure - silver niobate (AgNbO₃, AN). The substitution of Ag by Li ions in mixed Ag_{1-x}Li_xNbO₃ (ALN) is commonly accepted method to improve ferroelectric and piezoelectric properties of materials. The dielectric properties of ALN were investigated mainly at low frequencies.

The aim of the work is to study ferroelectric and electrical properties of Ag_{1-x}Li_xNbO₃ ceramics via broadband (20 Hz – 750 THz) spectroscopy, piezoelectric and ferroelectric polarization measurements.

Temperature dependences of the complex dielectric permittivity for ALN5 ceramics at different frequencies are presented in Fig. 1. The dielectric permittivity maximum related with ferroelectric phase transition is observed close to 400 K. Close to the ferroelectric phase transition temperature no dielectric dispersion is observed up to 9 MHz. Onset of dielectric dispersion is observed close to 10 GHz. At lower temperatures two additional frequency dependent dielectric anomalies are clearly expressed in temperature dependence of dielectric losses. These anomalies are related with different ferroelectric domains dynamics.

The ferroelectric phase transition temperatures strongly decreases with lithium concentration for ALNx when x≤0.4, thus indicating importance of Ag ions coupling for ferroelectric phase transition. In contrast close to and above the morphotropic phase boundary the ferroelectric phase transition temperatures strongly increase with lithium concentration, which is typical for diluted LiNbO₃ behaviour.

Keywords: silver niobate, ferroelectrics, ferroelectrics, dielectric permittivity.

References

[1] S. Wada, A. Saito, T. Hoshina, H. Kakemoto, T. Tsurumi, C. Moriyoshi, Y. Kuroiwa, *Ferroelectrics* 346, 64–71 (2007).

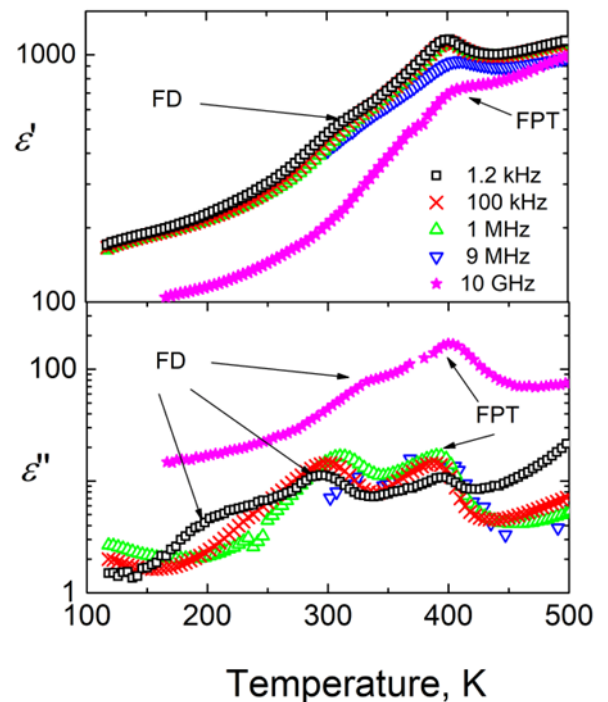


Fig. 1. Temperature dependence of complex dielectric permittivity for ALN5 ceramics at different frequencies (FD – ferroelectric domains related dielectric anomaly, FPT – ferroelectric phase transition related dielectric anomaly).

(1 - x)Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO₃-xCdTiO₃ kietųjų tirpalų dielektriniai ir pjezoelektriniai tyrimai**Dielectric and piezoelectric properties in (1 - x)Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO₃-xCdTiO₃ solid solutions**Eglė Martinaitytė^{1,*}, Eriks Birks², Šarūnas Svirskas¹, Jūras Banys¹¹ Faculty of Physics, Vilnius University, Vilnius, Lithuania² Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Kengaraga 8, Riga, Latvia

egle.martinaityte@ff.stud.vu.lt

There is a plethora of piezoelectric ceramics' applications in electronics, telecommunications and medicine. Ceramics containing lead were the most widely used, as they seemed to have the best ferroelectric properties [1]. The problem with lead containing materials is that lead is toxic, which causes the search for lead-free ceramics. One of the most promising lead-free piezoelectric materials is Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO₃ (NBT). Pure NBT ceramics with their ferroelectric properties hardly reach lead-based materials and are therefore doped with other materials. In this work doping is done with cadmium titanate. The aim of this work is to investigate dielectric and piezoelectric properties (1-x)Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO₃-xCdTiO₃ solid solutions.

Materials under test with different concentrations of CdTiO₃ were prepared by solid state reaction from chemical grade oxides [2]. We examined samples containing 10 %, 20 %, 35 %, 40 % and 45 % of CdTiO₃. Dielectric properties were obtained by cooling samples in a temperature range from 500 K to 100 K with a HP4284A LCR meter, network analyzer AGILENT 8714ET and waveguide system. A rate of the temperature change was approximately 1 K/min. Polarization hysteresis and electromechanical properties were measured with AixACCT TF 2000 analyzer applying 4 kV external field. Samples were cooled down to 200 K.

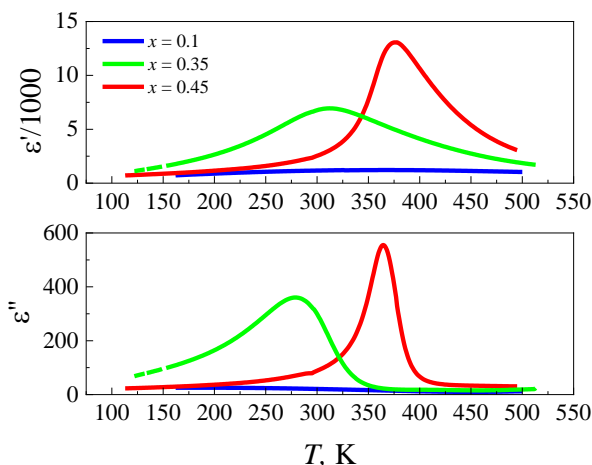


Fig. 1. Temperature dependences of complex dielectric permittivity.

Temperature dependences of dielectric permittivity (Fig. 1) shows that increasing CdTiO₃ concentration gives higher dielectric constant values. Comparing it to pure NBT ceramics maximum of dielectric permittivity can be obtained at lower temperatures. Typical ferroelectric properties are only observed for a composition $x = 0.45$ (Fig. 2). Same results can be seen for sample where x is equal to 0.35 but only at lower temperatures. Behavior of sample with 10 % of CdTiO₃ is very similar to linear dielectric and stays the same over the whole temperature range.

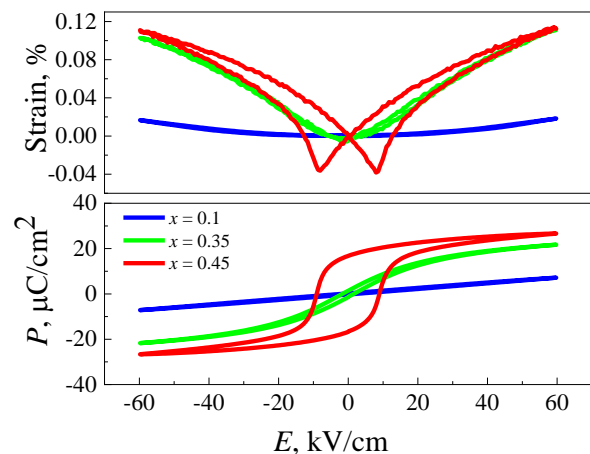


Fig. 2. Electric field dependence of strain and polarization at room temperature.

Keywords: solid solutions, NBT, perovskites, ferroelectrics, relaxor ferroelectrics.

Literature

- [1] X. Wang, Y. Huan, S. Ji, Y. Zhu, T. Wei, and Z. Cheng, Ultra-high piezoelectric performance by rational tuning of heterovalent-ion doping in lead-free piezoelectric ceramics, *Nano Energy* **101**, 107580 (2022).
- [2] M. Duce, E. Birks, M. Antonova, V. Zauls, M. Kundzinsh, and A. Fuith, Structure and physical properties of Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃-CdTiO₃ solid solutions, *Ferroelectrics* **417**, 93–94 (2011).

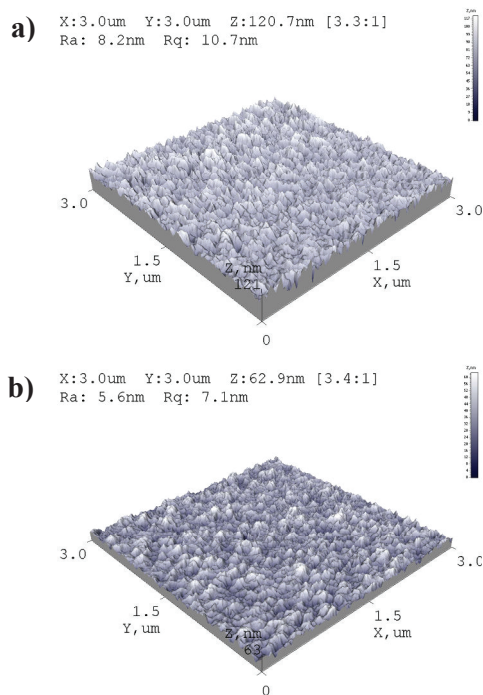
SDC plonasluoksnių keramikų paviršiaus struktūros ir elektrinių savybių tyrimas

Investigation of the surface structural and electrical properties of SDC thin ceramic films

Darius Virbukas^{1,2}, Giedrius Laukaitis¹¹Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir Gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas²Kauno kolegija, Technologijų fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas

darius.virbukas@ktu.lt

Cerio oksidas su samario oksido priemaisomis (SDC) turi fluorito tipo, Fm-3m erdvinę struktūrą. SDC keramikos pasižymi didesniu joniniu laidžiu lyginant su cirkonio oksidu stabilizuotu itrio oksidu (YSZ) ar kitomis CeO₂ pagrindo keramikomis [1]. SDC plonasluoksnės keramikos dažniausiai naudojamos medžiagos elektrocheminių prietaisų gamyboje, kietakūnio oksido kuro elementuose ir deguonies jutikliuose, kurių darbinė temperatūra ~500 °C [2].

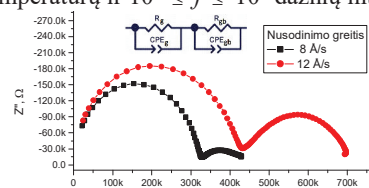


1 pav. SDC plonų sluoksnių AFM 3D atvaizdai esant: a) 8 Å/s b) 12 Å/s nusodinimo greičiui.

Atominių jėgų mikroskopijos tyrimai (AFM) parodė, kad esant didesniam nusodinimo greičiui formuojasi didesni grūdėliai ir gauname mažesnio šiurkštumo paviršių (1 pav.).

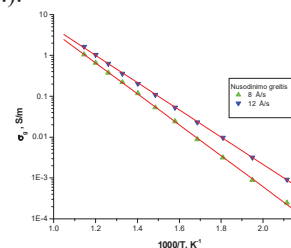
Naudojantis elektronų spindulio nusodinimo metodu buvo suformuotos plonasluoksnės (Ce_{0.85}Sm_{0.15}O_{1.925}) SDC keramikos, esant 8 Å/s ir 12 Å/s nusodinimo greičiui, ant optinio kvarco padėklų. Padėklų temperatūra nusodinimo metu buvo 873 K. Keramikų rentgenostruktūrinė analizė rodo, kad gaunama kubinė centruota paviršiuje gardelė su dominuojančia [111] kristalografine orientacija ir didėjant nusodinimo greičiui formavosi didesni grūdėliai.

Plonų sluoksnių elektrinių savybių tyrimui buvo naudojamas kompleksinės varžos spektrometras (NorECs AS). Elektrinės keramikų savybės tirtos 473–873 K temperatūrų ir $10^{-1} \leq f \leq 10^6$ dažnių intervaluose.



2 pav. SDC plonų sluoksnių $-ImZ(ReZ)$ priklausomybė, esant 673 K temperatūrai.

Kad formuojasi didesni grūdėliai patvirtina ir kompleksinės varžos spektrometras. Esant didesniam nusodinimo greičiui (12 Å/s) gauname didesnę grūdelių varžą (2 pav.).



3 pav. SDC keramikų grūdelių laidžio priklausomybė nuo temperatūros

Grūdelių laidumo aktyvacijos energija nustatyta iš grūdelių laidžio priklausomybės nuo temperatūros grafiko (3 pav.) ir jų vertės pateiktos (1 lentelėje).

1 lentelė. SDC keramikų grūdelių laidumo aktyvacijos energija (ΔE_g) ir grūdelių laidumas (σ_g) esant 673 K ir 873 K temperatūroms.

Nusodinimo greitis	(673 K)	(873 K)	ΔE_g , eV
	σ_g , S/m	σ_g , S/m	
8 Å/s	$5,293 \cdot 10^{-2}$	1,041	0,77
12 Å/s	$10,94 \cdot 10^{-2}$	1,650	0,68

Buvo nustatyta, kad esant didesniam nusodinimo greičiui formuojasi keramikos su didesniais grūdėliais, dėl ko atitinkamai gauname mažesnio šiurkštumo paviršių bei didesnio joninio laidumo vertės.

Reikšminiai žodžiai: elektronų spindulio nusodinimo metodas, cerio oksidas stabilizuotas samario oksidu.

Literatūra

- [1] M.S. Anwar, S. Kumar, N. Arshi, F. Ahmed, Y.J. Seo, C.G. Lee, B. H. Koo, Journal of Alloys and Compounds, 509 (2011) 4525-4529.
[2] C Nath, P. Bharti, S. Kumar, S. Singh, Journal of Physics and Chemistry of Solids 176 (2023) 111252.

EPR su kriogeniniais stiprintuvais nepriklausančiais nuo bandinio temperatūros

EPR with cryogenic amplifiers independent of sample temperature

Vidmantas Kalendra¹, Justinas Turčak¹, Jūras Banys¹, John J.L. Morton^{2,3} and Mantas Šimėnas¹

¹Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²London Centre for Nanotechnology, University College London, London WC1H 0AH, UK

³Dept. of Electronic & Electrical Engineering, University College London, London WC1E 7JE, UK
vidmantas.kalendra@ff.vu.lt

Cryogenically cooled Nuclear magnetic resonance (NMR) cryoprobes containing cryogenic preamplifiers are frequently used to significantly enhance NMR sensitivity. In these probeheads, the thermal noise is substantially reduced by simultaneous cooling of the NMR coils and low noise preamplifier, independently of the sample temperature. Despite several studies reporting promising Electron paramagnetic resonance (EPR) sensitivity improvements, signal preamplification with cryogenic microwave amplifiers has not yet been widely adopted in the EPR community mainly due to poor compatibility with commercial spectrometers, typical samples and high power pulsed EPR experiments.

Recently, we designed and tested an X-band EPR cryoprobe, which meets these criteria, by placing a cryogenic low noise amplifier (LNA) close to the sample on a commercially available EPR probehead [1]. To protect the LNA from high power microwave pulses employed in pulsed EPR, we incorporated a protection circuit consisting of a limiter and a fast microwave switch. The microwaves were guided to and from the resonator using a directional coupler, which also acted as partial suppressor of the input thermal noise at the expense of the excitation power. The probehead provided a significant voltage signal-to-noise ratio (SNR) improvement close to 10× below 10 K (100× reduction in the measurement time) already rendering some EPR experiments feasible that would otherwise have been impossible in a reasonable amount of time.

Here, we take further inspiration from the NMR cryoprobe and consider a more general approach, where the cryogenic LNA and its protection circuit is kept at a different temperature to that of the sample (for example, using a separate cryostat). This method has a number of potential advantages over our previous demonstration [1], the most significant being that the sensitivity gain is practically independent of the sample temperature. In addition, integrating an LNA together with its protection circuit in a limited space close to the resonator can pose practical challenges in typical cryostats, especially for ENDOR and Q-band probeheads. Using a separate cryostat also enables the use of microwave components such as ferrite circulators, which bring potential gains in sensitivity [1].

We use the effective noise temperature formalism to discuss the feasibility of such a cryoprobe setup, which is then realised experimentally. The constructed

cryoprobe (Fig. 1) is fully compatible with the commercial and homebuilt EPR spectrometers and, in addition to ordinary pulsed EPR probeheads, it can be easily used with high-Q CW, ENDOR and Q-band resonators. Our new setup shows about 4× voltage SNR improvements at X-band, while for measurements at Q-band, the enhancement is slightly above 2× with prospects for further improvement. In both cases, the obtained sensitivity gain is practically independent of the sample temperature.

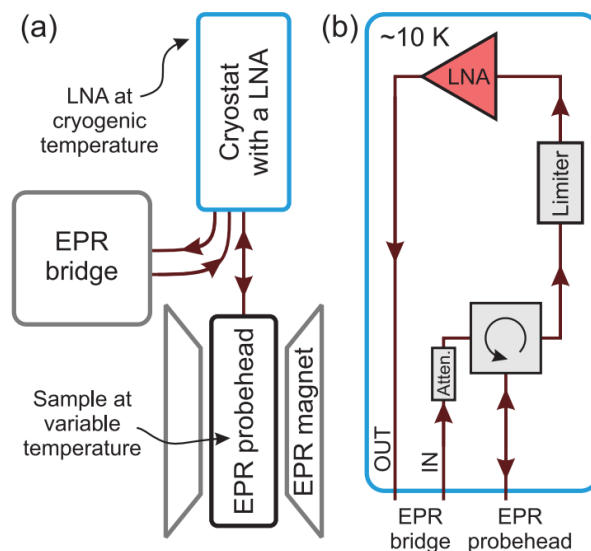


Fig. 1. (a) Block diagram of our cryoprobe EPR setup with an externally cooled cryogenic LNA. (b) Schematic of the microwave circuit within the external cryostat, which is connected to the microwave bridge and EPR probehead.

Keywords: EPR, Cryoprobe, LNA, Sensitivity, SNR

Literatūra

- [1] Šimėnas et al. (2021) A sensitivity leap for X-band EPR using a probehead with a cryogenic preamplifier. *J. Magn. Reson.* 322, 106876.
- [2] V. Kalendra, J. Turčak, J. Banys, J. J. L. Morton, M. Šimėnas (2023) X- and Q-band EPR with cryogenic amplifiers independent of sample temperature. *J. Magn. Reson.* 346, 107356.

Signalų integravimo metodika matuojant poliarizaciją daugiasluoksnėse popierius-dielektrikas dangose

A signal integration technique for measuring polarization in multilayer paper-dielectric coatings

Robertas Maldžius, Stasys Kuskevičius

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

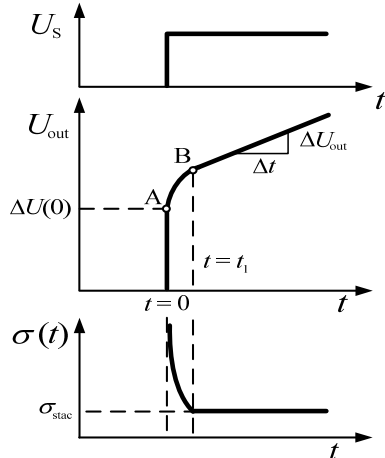
robertas.maldzius@ff.vu.lt

Poliarizacijos procesai daugiasluoksnėse popierius-dielektrikas dangose anksčiau tyrinėti naudojant dozuoto įelektrinimo-išelektrinimo metodiką, kurioje tiriamasis objektas mechaniškai, 5 Hz dažniu keičiant padėtį, pakaitomis įelektrinamas vainikinio išlydžio jonų porcija ir išmatuojama paviršinis potencialas bei nusodinto krūvio dydis [1]. Tai savotiškas tiesiškai kintančios įtampos metodo analogas, tik dėl tokio žemo dažnio neleidžiantis tyrinėti sparčių poliarizacijos bei jonų pernašos procesų ypač pradinėje jų dalyje ($t \approx 0$).

Pasinaudodami šiuolaikine elektronika, sugrįžome ir patobulinome metodiką, leidžiančią tirti sparčios poliarizacijos kinetikas, kuomet prie tiriamosios struktūros sluoksnio prijungiamas laiptuko formos aukštos įtampos šaltinis U_s , o atsako signalas matuojamas elektroniniu integratoriumi. Įėjimo srovė j ir integratoriaus išėjimo įtampa U_{out} yra susijusios taip

$$j = -\frac{1}{S} C_{int} \frac{dU_{out}}{dt}, \quad (1)$$

o signalo formos schema parodyta 1-ame pav.



1 pav. Elektrinio signalo kinetikos schema

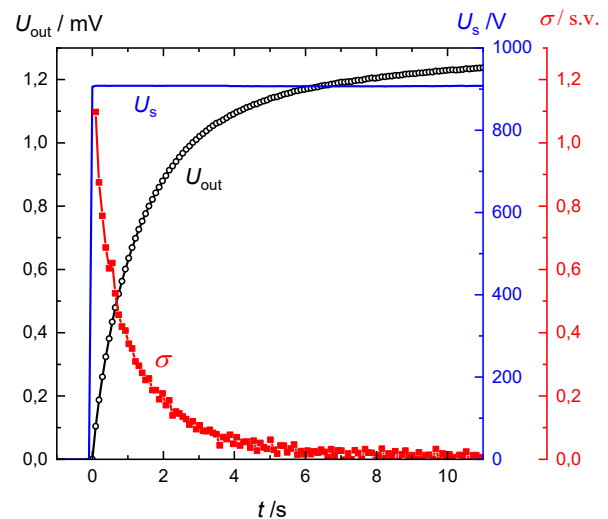
Pagal eksperimentu nustatomo pradinio įtampos šuolio dydį $\Delta U_{out}(0)$ apskaičiuojame tiriamojo objekto dielektrinę skvarbą

$$\varepsilon = \frac{l}{\varepsilon_0 S} C_{int} \frac{\Delta U_{out}(0)}{U_s}, \quad (2)$$

o elektrinis laidumas apskaičiuojamas pagal įtampos kitimo greitį (1 pav., kai $t > t_1$):

$$\sigma = \frac{l}{S} C_{int} \frac{\Delta U_{out}/\Delta t}{U_s}. \quad (3)$$

Laiko intervale iki t_1 ties dielektriku kaupiasi jonai, t. y. vyksta poliarizacija, o jos kinetiką $U_{out}(t)$ išmatuojame pačioje pradinėje jos srityje, ties $t \approx 0$ (2 pav.). Pagal (2) formulę skaičiuojame laidumo kinetiką $\sigma(t)$ ir atsižvelgus į tiriamos dangos sandarą – dreifuojančių jonų tankį bei jų judrį.



2 pav. Potencialo ir laidumo kinetikos iš eksperimento popierius-dielektrikas struktūroje, naudojant signalo integravimo metodiką (kinetikos dalis tarp taškų A ir B 1-ame pav.)

Mūsų naudojamu metodu negauname signalo „iš begalybės“, taip kaip būna diferencijuojančių grandinių atvejais jungiant laiptuko formos šaltinio įtampą. Taip pat išvengiame aukštos įtampos šaltinio keliamų trikdžių, jeigu naudojame tiesiškai kylančios įtampos metodiką ir taikome įtampos keitiklį [2].

Reikšminiai žodžiai: signalo integratorius, poliarizacijos kinetika, popierius-dielektrikas.

Literatūra

- [1] R. Maldžius, T. Lozovski, J. Sidaravičius, K. Backfolk, I. Heiskanen. Influence of environmental relative humidity on the polarization behaviour of paper and paper-dielectric structures, *Cellulose* 27, 10303-10312 (2020), <https://doi.org/10.1007/s10570-020-03457-3>.
- [2] R. Maldžius, J. Sidaravičius, T. Lozovski. Apie poliarizaciją ir jonų judrį popieriuje // 41-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, 2015.06.17-19, Vilnius, 390 psl., ISBN 978-609-95511-2-8.

Didelės galios lazerinės spinduliuotės sukurtų rentgeno spindulių srauto matavimas CMOS kameros dozimetru

CMOS camera based dosimeter for measuring X-Ray flux emitted via high power laser radiation

Jonas Jeffrey Haist¹, Anton Koroliov², Artūras Plukis²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
jonas.haist@ff.stud.vu.lt

CMOS (complementary metal-oxide semiconductor) kameros jutiklio pagalba galima aptikti, atvaizduoti ir kiekybiškai įvertinti jonizuojančios spinduliuotės daleles [1], gama ar rentgeno kvantus.

Optinis dozimetras buvo sukurtas panaudojus IMP kameros CMOS jutiklį (*Arducam*), nuo kurios buvo pašalintas objektyvas ir IR spinduliuotės filtras, paliekant atidengtą 9.62 mm² ploto silicio detektorius. Detektorius buvo patalpintas į 3D spausdintuvo pagalba atspausdintą plastikinį korpusą, kurio dangtelyje buvo paliktas 100 mm² ploto langelis jonizuojančiai spinduliuotei praeiti. Modulis buvo ekranuotas nuo mažesnio dažnio nei rentgeno spinduliai elektromagnetinės spinduliuotės. Prietaisas buvo prijungtas prie *Raspberry Pi 4* mikrokompiuterio. Kiekvieno matavimo metų buvo daroma po 200 DNG formato nuotraukų, kurios vėliau buvo apdorojamos *Python* kalba parašyta programa. Gauti rezultatai parodė matavimo metų užregistruotų elektringųjų dalelių arba fotonų skaičių.

Įrangos kalibravimas buvo atliktas naudojant du Sr-90 beta spinduliuotės šaltinius.

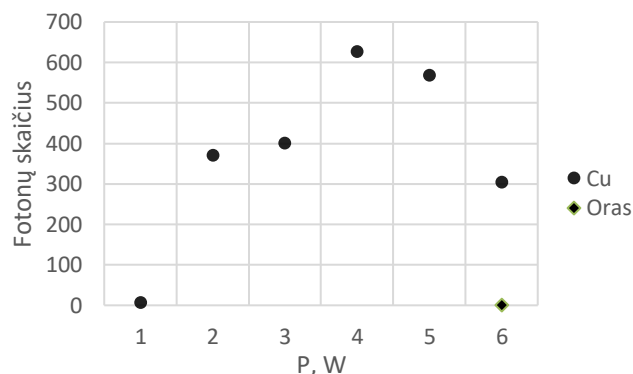
1 lentelė. Kalibravimo šaltinio teoriškai įvertinto ir išmatuoto aktyvumo palyginimas

Kalibracijos nr	Teoretinis aktyvumas	Gautas aktyvumas	Paklaida, %
1	33.5	35.1	5
2	13.8	14.9	8

Atlikus kalibravimą ir įsitikinus prietaiso tikslumu, buvo tiriamas didelės galios lazerinės spinduliuotės sukurtas rentgeno spinduliuotės šaltinio srautas. Rentgeno spindulių šaltiniui sukurti naudotas femtosekundinis lazeris *Pharos PHI-SP-1.5mJ (MGF Šviesos Konversija)*, pagrindiniai lazerio parametrai: bango ilgis $\lambda \sim 1028$ nm, minimali impulso trukmė $\tau_{min} \sim 158$ fs, didžiausia impulso energija $E_p \sim 1,5$ mJ, pasikartojimo dažnis $\nu \sim 4$ kHz. Lazerio spindulys buvo fokusuojamas į 30 μ m dėmę ant besisukančio varinio disko paviršiaus [2]. Tyrimo metu lazerinės spinduliuotės optinė galia buvo keičiama nuo 1 W iki 6 W, 1W inkrementu. Ties 6 W kaip kontrolinis matavimas, buvo iširtas oro jonizacijos atraminis spektras. CMOS

detektorius buvo pastatytas 320 mm atstumu nuo rentgeno šaltinio. Gauti rezultatai buvo lyginami su rentgeno spindulių spektrometru *Amptek X-123*.

Buvo nustatyta kad CMOS optinis dozimetras užfiksavo intensyvesnį rentgeno spindulių srautą, palyginus su rentgeno spektrometru, kuris prisotindavo priėmimo didesnių lazerio spinduliuotės energijų. Taip pat nustatyta, kad rentgeno spindulių fotonų skaičius pasiekė maksimalią vertę, kuomet lazerio optinė galia buvo nustatyta ties 4 W. Oro jonizacija rentgeno spinduliuotės nesugeneravo.



1 pav. CMOS optinio dozimetru užfiksuoto rentgeno spindulių fotonų skaičiaus priklausomybė nuo lazerio spinduliuotės galios

Padėka: Lietuvos mokslo tarybai už finansavimą projekto „Lazeriu indukuotos jonizuojančiosios spinduliuotės dozimetrija“, Nr. 4 P -SV -23 -386

Reikšminiai žodžiai: femtosekundinis lazeris, lazeriu sukurta plazma, Rentgeno spinduliai, jonizuojančios spinduliuotės dozimetras.

Literatūra

- [1] Niedźwiecki, Michał & Rzecki, et.al. (2019). Recognition and classification of the cosmic-ray events in images captured by CMOS/CCD cameras
- [2] Koroliov, A., Reklaitis, J., Barkauskas, V., Varsockaja, K., Germanas, D., Plukis A., Remeikis, V. Study of $K\alpha$ X-ray flux angular distribution in Cu and KBr targets. *Eur. Phys. J. D* 76, 171 (2022).

Stiprios toliveikės sąveikos ir geometrinė frustracija trumpesnėse už bangos ilgį Ramano gardelėse

Strong long-range interactions and geometrical frustration in subwavelength Raman lattices

Domantas Burba¹, Gediminas Juzeliūnas¹, Ian B. Spielman^{2,3}, Luca Barbiero⁴

¹Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Joint Quantum Institute, University of Maryland, College Park, Maryland 20742-4111, USA

³National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁴Institute for Condensed Matter Physics and Complex Systems, DISAT, Politecnico di Torino, I-10129 Torino, Italy
domantas.burba@ff.vu.lt

Non-local interactions are the key building block to allow for a spontaneous breaking of the translational symmetry. The latter represents one of the most fundamental symmetries in physics as it reflects the formation of periodic structures of mass and electric charge. Quantum matter with such a feature falls in the class of spontaneously symmetry broken (SSB) many-body phases with broken translational invariance. Although this peculiar symmetry breaking fixes the most energetically favourable distance between elementary constituents, examples of these SSB phases occur in physical systems with characteristic lengths scale. These range from electronic systems and liquid of ⁴He to neutron stars. This recurrence has made the investigation and creation of such states of matter of central importance. In this respect, quantum simulators made of ultracold magnetic atoms with large magnetic dipolar momentum (e.g., erbium) represent a promising and powerful resource. However, current setups only explore frustrated regimes with weak local interactions or regimes where quantum fluctuations are suppressed. To the best of our knowledge, there are no experimental schemes able to simultaneously realize long-range interactions and geometrical frustration.

Here we consider a possible alternative to current setups - a recently realized [1] subwavelength lattice formed by a pair of counter-propagating lasers driving two photon Raman transitions in an ensemble of ultracold atoms [2]. It was shown that one may precisely control the tunneling amplitude, range, and phase by tuning the detunings. One also achieves significantly stronger interactions in the proposed scheme due to its subwavelength nature. Thus, one may realize intriguing phases of matter, such as density waves and chiral superfluids. Our results show three possible scenarios may occur, depending on the lattice depth and detunings. For deep optical lattices, we find quasi long-range order of the single particle Green's function, thus signalling the presence of a normal superfluid. For lower lattice depths, a regime characterized by long-range order takes place. This phase is characterized by spontaneously generated chiral currents and therefore, is an example of a chiral superfluid. Finally, density waves of period two or three were observed for a large range of detuning values.

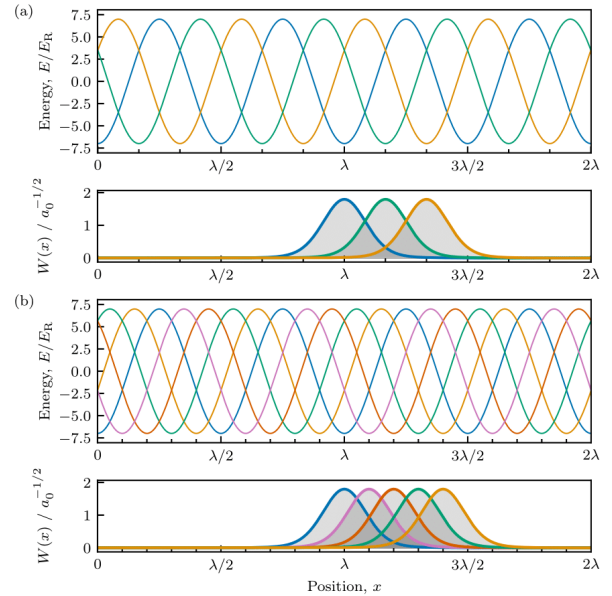


Fig. 1. (a) Subwavelength lattice for $N = 3$ internal states and Raman coupling $\Omega = 3.5E_R$.

(b) Subwavelength lattice for $N = 5$, $\Omega = 3.5E_R$.

Different colors indicate different dressed state sinusoidal potentials. The Wannier functions $W(x - na)$ are also plotted below the lattices.

Keywords: optical lattice, ultracold atoms, long-range interactions, Bose-Hubbard model, geometrical frustration, synthetic dimension, Wannier functions.

Literature

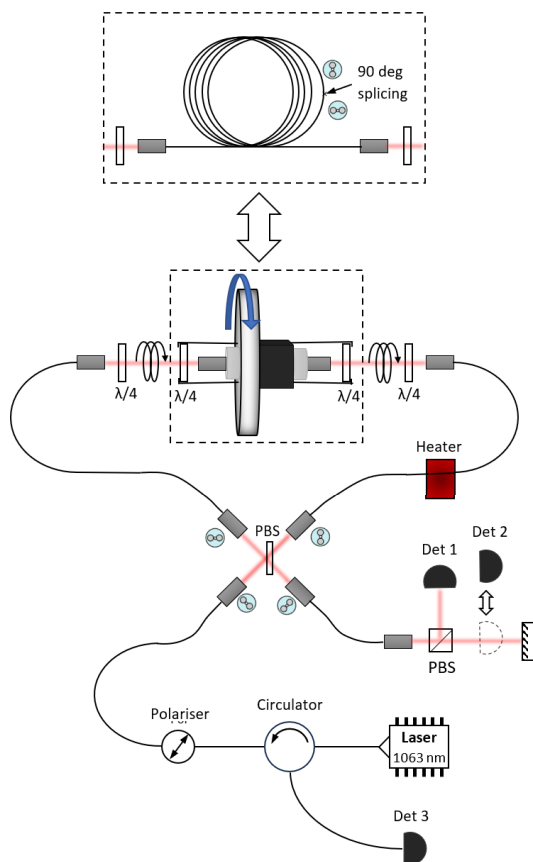
- [1] R. P. Anderson, D. Trypogeorgos, A. Valdés-Curiel, Q.-Y. Liang, J. Tao, M. Zhao, T. Andrijauskas, G. Juzeliūnas, and I. B. Spielman, Phys. Rev. Research **2**, 013149 (2020).
- [2] D. Burba, M. Račiūnas, I. B. Spielman, and G. Juzeliūnas, Phys. Rev. A **107**, 023309 (2023).

Sanjako efektu pagrįstas neapgrėžiamas optinis fazės variatorius

Optical non-reciprocal variable phase shifter based on Sagnac effect

Jaroslav Kodz, Kęstutis Regelskis, Nikolajus Gavrilius, Julijanas Želudevičius¹¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilniusjaroslav.kodz@ftmc.lt

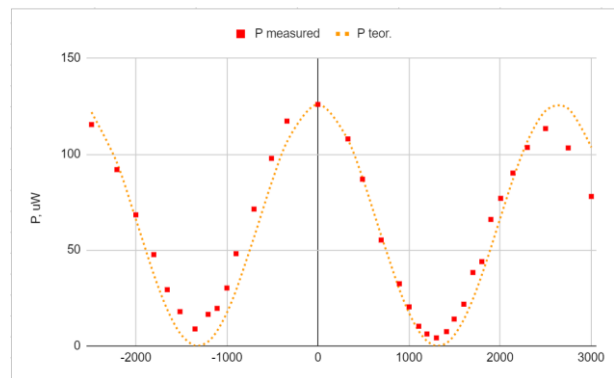
Ankstesniame darbe mūsų grupė pademonstravo modifikuotą Sanjako (Sagnac) interferometro schemą, kuri gali veikti kaip optinis izoliatorius. Tokio prietaiso esminę dalį sudaro greitai besisukantis diskas, ant kurio sumontuotas skaidulinis Sanjako interferomentras [1]. Fazės poslinkis atsiradęs dėl Sanjako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



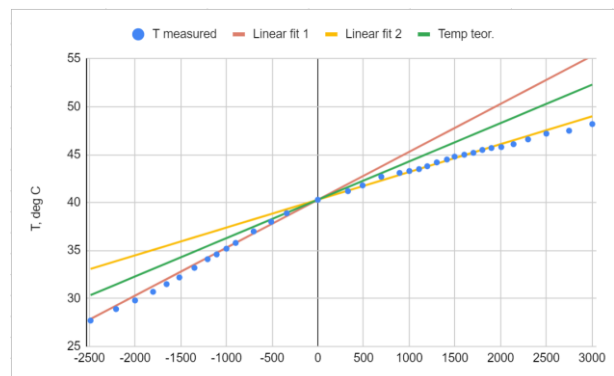
1 pav. Eksperimento schema.

Šiame darbe mes ištyrinėjome alternatyvią tokio prietaiso schemą (1 pav.). Taipogi susikoncentravome ne tik į patį šviesos blokavimo aspektą, bet ir į kitą šio prietaiso savybę – neapgrėžiamą kintamą fazės postūmį.

Polarizuota lazerinio diodo šviesa praeina pro Sanjako kilpą ir išeina per polarizacinį kubą į galios matuoklius *Det 1* ir *Det 2*. Čia ji yra atspindima veidrodžio pagalba ir grąžinama į sistemą atgal tuo pačiu keliu. Matuoklis *Det 3* fiksuoja grįžtančios šviesos galią. Skaidulos atkarpos temperatūra yra parenkama taip, kad būtų pasiektas maksimalus pralaidumas pro polarizacinį kubą (min. ant *Det 1*). Grįžtančio spindulio galia, kuri atitinka nekompensuojamą fazės postūmį pavaizduotą 2 pav., o temperatūros kreivė 3 pav..



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



3 pav. Temperatūros kreivė prie skirtingų disko greičių.

Reikšminiai žodžiai: optinis fazės variatorius, Sanjako efektas, neapgrėžiamas šviesos perdavimas.

Literatūra

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

Filamentacijos slopinimas netiesinėje Kero terpėje fotoniniais kristalais

Suppression of filamentation in Kerr media by photonic crystals

Edvinas Aleksandravičius¹, Darius Gailevičius¹, Audrius Dubietis¹, Kęstutis Staliūnas^{1,2,3}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Kaunas

²ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain

³UPC, Dep. de Física, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona) Spain

edvinas.aleksandravicius@ff.vu.lt

Netiesinis intensyvių ultratrumpų lazerio impulsų sklaidimas skaidriose terpėse sukuria unikalų ir įspūdingą reiškinį, vadinamą femtosekundine filamentacija. Filamentas atsiranda dėl sudėtingos tiesinių ir netiesinių efektų sąveikos. Tai veda prie ultratrumpų lazerio impulso transformacijos į filamentą, turintį plačiajuostį spektrą, vadinamą superkontinuumu. Filamentas gali turėti ribotą energijos ir galios kiekį, kuris yra kritinės savifokusavimosi galios eilės. Plačios juostos kietojo kūno dielektrinėse medžiagose artimojoje IR srityje P_{cr} yra kelių MW eilės [1]. Tačiau daugeliui taikymų reikalingas didelis spektrinės energijos tankis ir didelė impulsinė galia, kuri gerokai viršija tipines vertes, pasiekiamas viename filamente. Galimas sprendimas yra naudoti fotoninius kristalus pluošto filamentacijos slopinimui.

Gerai žinoma, kad fotoniniai kristalai gali paveikti pluošto difrakciją ir sklaidimą [2]. Savikolimacijos efektas yra plačiai ištirtas fotoninio kristalo poveikio pluošto difrakcijai pavyzdys. Šį efektą sukelia erdvinės dispersijos kreivių suplokštėjimas, kurį galima gauti kai kurioms fotoninių kristalų geometrijoms. Nors tai nėra ypač naudinga, kai kalbama apie filamentacijos slopinimą, norint gauti kitus erdvinės sklaidos režimus, galima naudoti kitokias geometrijas. Pavyzdžiui, sumažintas arba padidėjęs kreivumas atitinka susilpnėjusią arba sustiprintą difrakciją. Kita galimybė yra gauti erdvinę dispersiją su neigiamu kreivumu, atitinkančia antidifrakciją. Atsižvelgdami į tai, galime daryti išvadą, kad galima sukurti tokios geometrijos fotoninį kristalą, dėl kurio susidaro erdvinis dispersijos režimas, galintis kompensuoti netiesinį pluošto fokusavimąsi, taip slopindamas filamento susidarymą.

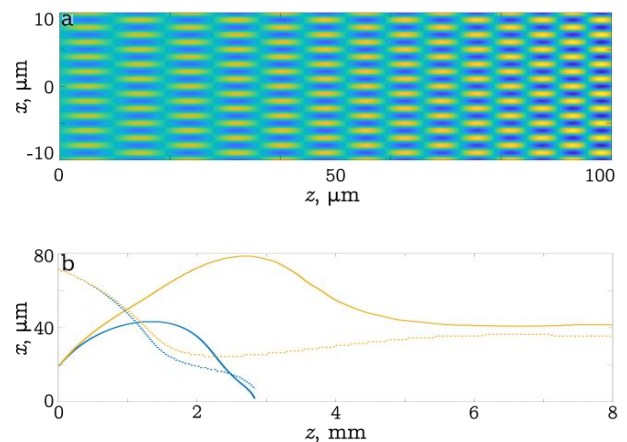
Skaitmeninis modeliavimas buvo atliktas naudojant pluošto propagavimo metodą, kuris aproksimuoja lėtai kintančio pluošto gaubtinę. Lūžio rodiklio moduliacijos profilis parenkamas harmoninis tiek skersinėje X, tiek išilginėje Z kryptimis, kaip parodyta 1a paveiksle. Periodiškumas abiem kryptimis buvo keičiamas, siekiant nustatyti optimalią geometriją, o išilginis periodas buvo susietas su skersiniu periodu per Talboto ilgį:

$$d_z = \frac{d_{Talbot}}{Q} \cong \frac{2d_x^2}{\lambda Q}$$

Bendru atveju fotoniniam kristalui su pastoviu periodu ir visoms geometrinės konstantos Q reikšmėms, kurios yra artimos 1, yra kelios dispersijos kreivės, atitinkančios skirtingas Blocho režimo šakas. Tai dažnai yra nepageidautina, nes tai apsunkina pluošto difrakcijos

valdymą, tačiau šią problemą galima išspręsti įvedant adiabatinį čirpą į išilginį fotoninio kristalo periodą, kaip parodyta 1a paveiksle. Tai darome pradėdami nuo išilginio periodo, atitinkančio geometrinę konstantą Q , pakankamai toli nuo 1, ir lėtai artėdami prie norimo Q .

Pluoštų, simuliuotų šiuo metodu, diametro evoliucija pavaizduota 1b paveiksle. Matome, kad homogeniniu atveju (mėlynos linijos) pluošto skersmuo pirmiausia didėja, bet galiausiai pluoštas pradeda konverguoti ir kolapsuoja ties $z = 2,84$ mm. Naudojant tuos pačius pluošto parametrus, bet šį kartą fotoniniame kristale (geltonos linijos) matome, kad pluošto skersmuo iš pradžių vėl didėja, tačiau šį kartą spindulys nekolapsuoja, vietoj to spindulys tik truputį konverguoja ir pluošto skersmuo asimptotiškai artėja prie kažkokios vertės kuriai difrakcija ir netiesinis fokusavimas yra subalansuoti. Pradinis pluoštų divergavimas vyksta todėl, kad naudojamas pradinis pluoštas yra elipsinis.



1 pav. a – lūžio rodiklio moduliacijos pavyzdys, b – pluoštų diametrai išmatuoti ties e^{-2} .

Rezultatai rodo, kad naudojant fotoninį kristalą, kurio geometrija atitinka Q reikšmę artimą 1, galima pasiekti filamentacijos slopinimą. Be to, naudojant teigiamą ir neigiamą čirpavimą, galima pasiekti tiek sustiprintą difrakciją ($Q > 1$), tiek antidifrakciją ($Q < 1$).

Reikšminiai žodžiai: fotoniniai kristalai, erdvinė dispersija, filamentacija, superkontinuumas.

Literatūra

- [1] A. Dubietis, G. Tamošauskas, R. Šuminas, V. Jukna, A. Couairon, Lith. J. Phys. **57**, 113-157 (2017).
- [2] H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, J. S. Aitchison, Phys. Rev. Lett. **85**, 1863-1866 (2000).

Sub-mikrometrinis apdirbimas fs-UV interferenciniu metodu

Sub-micrometer machining by fs-UV interference method

Tadas Latvys^{1,2}, Darius Gailevičius², Dominyka Stonytė², Domas Paipulas²

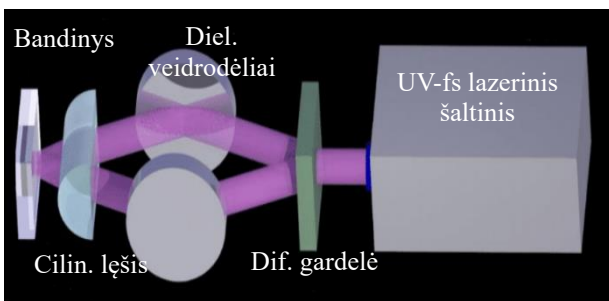
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

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

tadas.latvys@ff.stud.vu.lt

Sparti pramoninių femtosekundinių (fs) lazerinių sistemų su integruotais aukštos harmonikos moduliais, kurie gali generuoti ultratrumpus UV impulsus, plėtra sukūrė unikalią galimybę patenkinti rinkos poreikį tiksliam ir efektyviam lazeriniam mikro-apdirbimui. Šiandien naudojamos klasikinės litografijos technikos kartu su sausu ėsdinimu yra lėtos [1]. Praktikoje tik frezavimas fokusuotu jonų pluoštu (*focused ion beam milling*) leidžia gaminti kokybiškus periodinius nano-darinius, tačiau ir šis būdas yra palyginti lėtas pavienių darinių skenavimo metodas [2]. Šių trūkumų neturi interferencinis fs-UV apdirbimas.

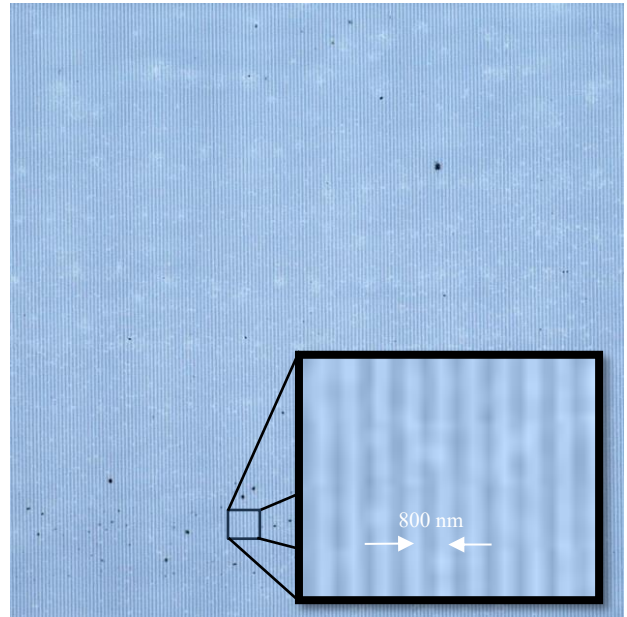
Pranešime bus pristatomas paprastas periodinių pažeidimų gamybos būdas, taikant Talboto interferometrą. Ši prietaisą sudaro cilindrinis lęšis, difrakcinė gardelė ir du veidrodėliai, skirti pirmojo ir minus pirmojo maksimumų suvedimui ant apdirbamos medžiagos paviršiaus. Supaprastintas sistemos modelis pateiktas 1 pav. Šis metodas pasižymi kompaktiška konfigūracija, kadangi į lazerinio apdorojimo sistemas, gali būti integruojamas kaip apdirbimo galvutė.



1 pav. Talboto interferometro pavyzdys.

Naudojant trečiosios harmonikos (343 nm) 300 fs trukmės impulsus iš sustiprintos Yb:KGV lazerinės sistemos, galima gaminti makroskopines, struktūriškai tvarkingas $\Lambda = 700\text{-}800$ nm periodo difrakcines gardeles ant puslaidininkių, metalų, o ateityje ir dielektrinių medžiagų paviršiaus. Tokios gardelės pavyzdys ant silicio bandinio pateiktas 2 pav.

Šio tyrimo metu parodytas tikslumas, greitis ir universalumas, kurį medžiagų apdorojimo sferai suteikia Talboto interferometrijos taikymas. Šis metodas užtikrina paprastą sistemos derinimą ir darinių periodo kontrolę ir atveria naujas galimybes nanoskalės struktūrų kūrimui medžiagos paviršiuje, o tai gali būti pritaikyta įvairiose nanotechnologijų ir fotonikos srityse.



2 pav. $\Lambda = 800$ nm difrakcinė gardelė Si paviršiuje.

Reikšminiai žodžiai: fs-UV apdirbimas, interferencija, interferometrija, Talboto interferometrija, sub-mikrometrinis apdirbimas.

Literatūra

- [1] D. S. Hobbs, B. D. MacLeod, E. Sabatino III, T. M. Hartnett, and R. L. Gentilman, "Laser damage resistant anti-reflection microstructures in Raytheon ceramic YAG, sapphire, ALON, and quartz," in *Window and Dome Technologies and Materials XII*, R. W. Tustison, ed. (2011), 8016, p. 80160T.
- [2] Q. Wen, X. Wei, F. Jiang, J. Lu, and X. Xu, "Focused Ion Beam Milling of Single-Crystal Sapphire with A-, C-, and M-Orientations," *Materials* 13(12), 2871 (2020).
- [3] F. Ouellette and J. Li, "Performance comparison of phase mask interferometers for writing fiber Bragg gratings with femtosecond pulses," *OSA Contin.* 2(4), 1215 (2019).

VECSEL IR sričiai be priekinio aušinimo

VECSEL for IR without front cooling

Matas Krivicius¹, Renata Butkutė², Darius Gailevičius¹, Gabrielius Kontenis¹, Gustas Petrusevičius², Aivaras Špokas²,
Andrea Zelioli², Kęstutis Staliūnas¹

¹Vilniaus Universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10222 Vilnius

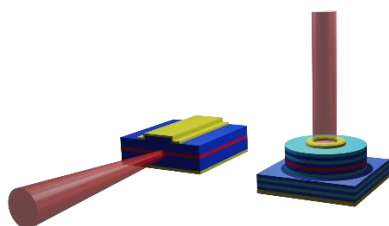
²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

matas.krivicius@ff.stud.vu.lt

Viena iš šiuo metu sparčiausiai besivystančių lazerinės fizikos šakų yra puslaidininkiniai lazeriai. Tokio tipo lazeriai yra paklausūs dėl savo kompaktiškumo, efektyvumo, pigios masinės gamybos metodų, bei galimybės būti kaupinami tiek optiškai, tiek elektriškai.

Devintajame praėjusio amžiaus dešimtmetyje į mokslo tiek rinkos pasaulį išėjo nauja puslaidininkinių lazerių rūšis VCSEL (angl. „Vertical cavity surface emitting laser“). Jų istorija tęsiasi jau virš 30 metų ir per tą laiką dėl savo ypač geros pluošto kokybės, pasiekiamų didelių galių, bei infraraudonos srities spektro jie sugebėjo rasti panaudojimų įvairiose vietose- nuo kompiuterių pelyčių, optinių komunikacijų, bei telefonuose esančių atpažinimo sistemų.

Pagrindinis VCSEL skirtumas nuo įprastų lazerinių diodų (angl. „Edge-emitting diode“) yra tai, kad jų spinduliuotės kryptis yra statmena, o ne lygiagrečiai aktyviosios terpės paviršiui. Būtent dėl šios priežasties VCSEL pluoštai yra geresnės kokybės ir mažiau diverguojantys nei įprastų diodų. Pačio kaupinimo pluošto kokybę nėra svarbi, todėl VCSEL yra kompaktiškas būdas konvertuoti lazerinį pluoštą iš prastos į aukštą kokybę. Taip pat VCSEL geometrija yra patogi masinei tokių struktūrų gamybai, auginant ploną sluoksnį ir po to jį sudalinant į atskiras dalis, o esant didelių galių poreikiams panaudoti tokių lazerių masyvus.



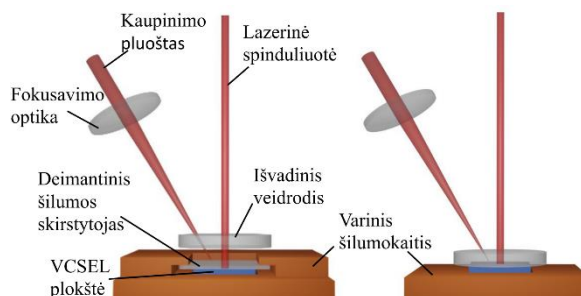
1 pav. Edge- emitting ir VCSEL lazerių spinduliuotės skirtumai

Tipiškai veidrodiniai paviršiai (Brego veidrodžiai) yra integruoti pačioje plokštėje iš abiejų pusių, tačiau VCSEL atveju antrasis veidrodis yra atskiras optinis elementas, kurio padėtį keičiant galima reguliuoti rezonatoriaus ilgį.

Tokia išorinė konfigūracija leidžia gauti dar mažiau diverguojančius ir siauresnius pluoštus, bei suteikia galimybę pasiekti didesnes galias.

Viena iš problemų, įtakojančių VCSEL spinduliuotę ir efektyvią veiką ypač didelės galios režime, yra šiluminiai efektai. Nors ir temperatūros gradientui esant lygiagrečiam lazerinei spinduliuotei yra išvengiama tokių efektų kaip šiluminis lęšis, temperatūrai pakankamai išaugus yra prieinama prie staigaus emisijos galios sumažėjimo, net kai kaupinimo galia yra didinama. Pagrindinė šilumos išsiskyrimo priežastis yra sužadintų elektronų vibracinė (fononinė) rekombinacija, taip pat kylant temperatūrai padėtis tarp kvantinių duobių ir elektrinio lauko maksimumų nebesutampa ir dėl to efektyvumas staigiai mažėja. [1]

VCSEL tipiškai aušinami panaudojant Peltier elementus kartu su variniais ir deimantiniais šilumokačiais, kurie gali būti pritvirtinti iš vienos arba abiejų pusių. Antruoju atveju atsisakant efektyvesnio aušinimo gaunama galimybė itin arti priartinti išvadinių veidrodį prie plokštės ir taip sumažinus rezonatoriaus ilgį gauti kokybiškesnį pluoštą. [2]



1 pav. Kairėje VCSEL aušinimas vyksta iš abiejų pusių, kairėje tik iš galo

Tyrimo metu InGaAs VCSEL bus optiškai kaupinamas 808nm didelio kokybės parametro M^2 spinduliuote ir vėsintas Peltier elemento ir vandens pagalba. Bus ištirtos reikalingos rezonatoriaus sąlygos bei reikalingas aušinimas, norint gauti stabilią spinduliuotę ir pasiekti efektyvios spinduliuotės sąlygą.

Reikšminiai žodžiai: VECSEL, optinis kaupinimas.

Literatūra

- [1] Heat Management in High-Power Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Lasers. Alexej Chernikov, Jens Herrmann, Martin Koch, Et. Al. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics (Volume: 17, Issue: 6, Nov.-Dec. 2011)
- [2] Optically pumped VECSELs: review of technology and progress. M Guina et al 2017 J. Phys. D: Appl. Phys. 50 383001

Kompaktiško priverstinės Ramano sklaidos keitiklio kaupinamo GHz pasikartojimo dažnio ultratrumpųjų impulsų paketais kūrimas

Development of compact SRS converter pumped by an ultrafast laser operating in GHz burst regime

Raimundas Burokas^{1,2}, Lukas Kamarauskas¹, Kristupas Dagilis¹, Rokas Danilevičius¹, Andrejus Michailovas¹

¹Ekspla, UAB, Savanorių pr. 237, 02300 Vilnius

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

raimundas.burokas@ftmc.lt

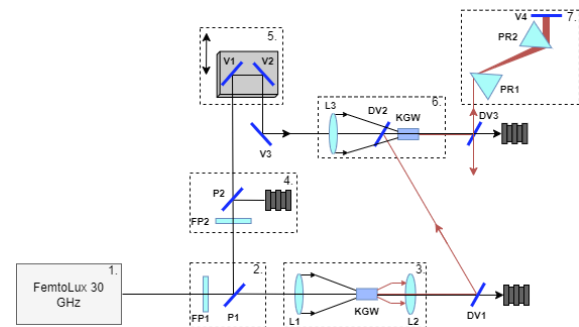
Biologinių audinių netiesinei mikroskopijai reikalingi lazeriniai šaltiniai, kurių bangos ilgis patenka į audinių skaidrumo langą (1,1 – 1,3 μm) ir turi mažus sklaidos sąlygotus nuostolius [1]. Tokiu būdu apšvietus artimosios infraraudonosios srities spinduliuote audiniuose sugeneruota antroji arba trečioji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

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

Šiai problemai spręsti, pasiūlytas metodas Ramano stiprintuvui realizuoti pasitelkiant GHz dažnio impulsų paketus. GHz dažnio impulsų paketas turi turėti skirtingo intensyvumo impulsus, kad pirmasis impulsas sugeneruotų superkontinuumą, o tolesni impulsai stiprintų sugeneruotus Ramano bangos ilgius tame pačiame kristale. Femtosekundiniai GHz impulsų paketai formuojami FemtoLux30 (Ekspla) lazeryje panaudojant aktyvią šviesolaidinę kilpą [3]. Prieš pradėdant konstruoti kompaktišką Ramano rezonatorių (kelių dešimčių cm eilės optinio kelio ilgio), kaupinamą GHz pasikartojimo dažnio impulsų paketais, reikia išsiaiškinti sugeneruotos Ramano spinduliuotės pluošto erdvinės ir laikinės savybes. Taip pat svarbu iširti superkontinuumo generacijos ir SRS stiprinimo savybes. Šiam tikslui buvo surinkta vieno lėkio Ramano stiprintuvo schema, pavaizduota 1 pav.

Šiame darbe pristatomi SRS stiprinimo ir laikinio spaudimo rezultatai ultratrumpais impulsais. Užkratui

buvo naudojamas superkontinuumas, sugeneruotas 4 mm ilgio KGW kristale, panaudojant nedidelę dalį lazerio energijos. Likusi spinduliuotės dalis buvo naudojama SRS stiprinimui. Užkratas ir kaupinimas buvo suderinti laike panaudojant vėlinimo liniją ir sutapatinti erdvėje nekolonariai sąveikai 10 mm ilgio KGW kristale. Nustatyta optimali impulso energija (~500 nJ) reikalinga sugeneruoti superkontinuumą su kuria pasiekiamas 18 kartų stiprinimas SRS stiprintuve, panaudojant 26 μJ kaupinimo energiją. Išmatuota impulsų trukmė po SRS stiprintuvo buvo 418 fs, o priziminiame spaustuve suspausta iki 109 fs. Daugiau rezultatų bus pristatyta konferencijos metu.



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

Reikšminiai žodžiai: SRS stiprintuvas, KGW, GHz impulsų paketai.

Literatūra

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

Femtosekundiniu lazeriu indukuotos plazmos spektroskopiniai medžiagų tyrimai: plazmai indukuoti naudojamo lazerio bangos ilgio (UV ir IR) įtaka

Femtosecond laser-induced plasma spectroscopy studies of materials: influence of the laser wavelength (UV and IR) used to induce the plasma

Gytis Zaremba¹, Ona Balachninaite¹, Domas Paipulas¹, Virgilijus Vaičaitis¹

¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
ona.balachninaite@ff.vu.lt

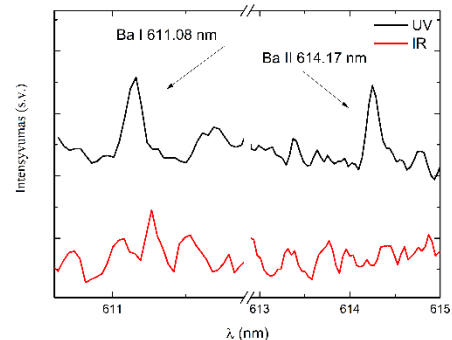
Lazeriu indukuotos plazmos spektroskopija (*angl.*: laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)) yra plačiai naudojamas universalus įvairių medžiagų cheminei elementinei analizei atlikti [1]. Ultratrumpųjų femtosekundinės trukmės lazerių panaudojimas lyginant su nanosekundinių trukmių lazerių naudojimu LIBS pasižymi eile pranašumų kaip pavyzdžiui, mažesne bandinio pažeida [2], žemesniu abliacijos slenksčiu, geresniu signalo atkartojamumu ir t.t. [3]. Svarbus LIBS parametras yra lazerio, naudojamo plazmai indukuoti, spinduliuotės bangos ilgis. Manoma, kad bangos ilgio pasirinkimas LIBS matavimams yra svarbesnis ilgesniems, nanosekundinės trukmės, lazerio impulsams. Femtosekundinio LIBS atveju lazerio spinduliuotės ir medžiagos sąveikos mechanizmas yra labai skirtingas, plazmos sąveika su medžiaga yra minimali, femtosekundiniai impulsai sąveikauja su kietomis medžiagomis be reikšmingo šilumos perdavimo, todėl medžiaga praktiškai nesilydo. Femtosekundiniu lazeriu indukuotos plazmos medžiagoje parametrai bei spektrinio signalo priklausomybė nuo lazerio spinduliuotės bangos ilgio nebuvo išsamiai ištirta ir šiuo darbu tai iškeliamą kaip vienas iš tyrimo tikslų.

Šiame darbe buvo naudojami du skirtingi femtosekundinio Yb:KGW lazerio „Pharos“ (Light Conversion Ltd.) bangos ilgiai – fundamentinė (1030 nm) ir trečioji (343 nm) lazerio harmonikos, siekiant nustatyti lazerio bangos ilgio įtaką LIBS plazmos ir spektro parametrams. Buvo tirti O.F.H.C. vario (99,95+% grynumo), AISI 301 nerūdijančio plieno, borosilikatinio stiklo bei keramikos pavyzdžiai. Keramikos ir stiklo bandinių sudėtis sulyginimui papildomai buvo ištirta dispersiniu Rentgeno fluorescencijos spektrometru (WDXRF). Plazmos spektrų registravimui buvo naudojamas Mechelle-5000 spektrografas su integruota ICCD kamera (Andor Technology). Lazerio spinduliuotės energijos tankis indukuojant plazmą skirtingų bangos ilgių lazerio spinduliuote buvo palaikomas pastovus.

Plazmos temperatūra buvo įvertinta esant lokalias termodinaminės pusiausvyros sąlygoms, naudojant Bolcmano metodą. Esant 400–800 ns užlaikymui po lazerio šūvio, nustatyta plazmos temperatūra buvo 9000 K variui, 8000 K plienui ir 6000 K stiklo bandiniui, ir paklaidų ribose nebuvo stebima reikšmingo skirtumo indukuojant plazmą UV ar IR lazerio spinduliuote. Apskaičiuoti plazmos elektronų tankiai: $(1.2 \pm 0.4) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ variui, $(1.4 \pm 0.4) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ plienui, stiklui ir

eramikai reikšmingai nesiskyrė indukuojant plazmą UV ar IR lazerio spinduliuote. LIBS signalo ir triukšmo santykis (SNR) buvo įvertintas visiems tiriamiesiems bandiniams ir nustatyta, kad SNR reikšmingai išauga indukuojant plazmą femtosekundine UV lazerio spinduliuote: variui ~100%, plienui ~300%, stiklui ~400%, keramikai ~40%. LIBS signalo ir triukšmo santykio padidėjimas gali būti galimai grindžiamas naudojant UV lazerio spinduliuotę padidėjusiu daugiafotonės jonizacijos efektyvumu ir didesniu išabliuotos medžiagos bandiniuose tūriu.

Nustatyta, jog dėl didesnio gaunamo LIBS signalo/triukšmo santykio femtosekundinė UV lazerio spinduliuotė įgalina detektuoti spektrines linijas elementų, kurių koncentracija bandinyje yra mažesnė nei 0.2%, kaip parodyta 1 pav. su Ba I linijomis, registruotomis stiklo bandinio LIBS spektre.



1 pav. Stiklo bandinio LIBS spektrų palyginimas indukuojant plazmą femtosekundine UV (343 nm) ir IR (1030 nm) lazerio spinduliuote: Ba I spektro linijos stebimos indukuojant UV lazerio spinduliuote.

Reikšminiai žodžiai: lazeriu indukuota plazmos spektroskopija, femtosekundiniai lazerio impulsai, plazmos temperatūra, plazmos elektronų tankis.

Literatūra

- [1] A. Santagata, & Teghil, Roberto & Albano, G. & Spera, D. & Villani, P. & De Bonis, Angela & Parisi, G.P. & Galasso, Appl. Surf. Sci. **254**, 863–867 (2007).
- [2] C. Donnet, J. Granier, G. Vergé, Y. Bleu, S. Reynaud, and F. Vocanson, Appl. Opt. **58**, 2158–2165 (2019).
- [3] T. A. Labutin, V. N. Lednev, A. A. Ilyin, A. M. Popov, J. Anal. At. Spectrom. **31**, 90–118 (2016).

Medžiagų paviršiaus cheminės sudėties vaizdinimas naudojant femtosekundiniu lazeriu indukuotos plazmos spektroskopijos metodą

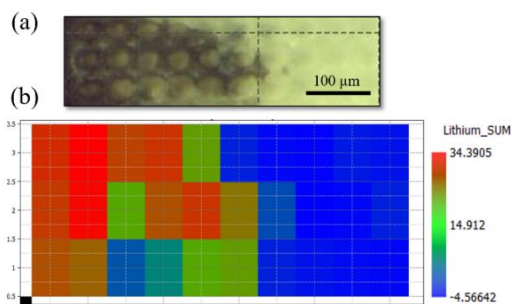
Chemical composition imaging of material surfaces using femtosecond laser-induced breakdown spectroscopy

Žyngintas Dabulis¹, Ona Balachninaite¹

¹Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10222 Vilnius
zyngintas.dabulis@ff.stud.vu.lt

Lazeriu indukuotos plazmos spektroskopija (LIPS) yra sparčiai populiarėjantis cheminio vaizdinimo metodas dėl tokių privalumų, kaip analizės greitis, pigumas bei įrangos paprastumas. Kai lazerio impulsas yra sugeriamas medžiagoje, mažas jos kiekis yra išgarinamas bei susiformuoja plazma, kuri emituoja specifinių bangos ilgių, atitinkančių cheminius elementus, spektrą [1]. Vienas iš šios metodikos pritaikymų galėtų būti medžiagų paviršinis cheminių elementų žemėlapiavimas, bandinį skenuojant lazerio impulsais, indukuojant plazmą bei analizuojant jos spinduliuotę skirtinguose pasirinkto ploto taškuose. Svarbus ultratrumpųjų lazerio impulsų panaudojimo šiam tyrimui pranašumas yra pasiekama geresnė erdvinė skyra dėl ženkliai mažesnio šiluminio poveikio medžiagai lyginant su ilgesnių trukmių impulsų naudojimu [2].

Šiame darbe buvo bandoma optimizuoti LIPS schemą paviršiaus cheminės sudėties analizės žemėlapiavimo metodui naudojant dviejų skirtingų bangos ilgių femtosekundinę spinduliuotę: ultravioletinės (343 nm) ir infraraudonosios (1030 nm) spektro srities. Taip pat buvo iširta bandinio aplinkos slėgio įtaka erdvinei skyrai ir žemėlapių kontrastui. Šioms užduotims įgyvendinti buvo naudojamas heterogeniškas bandinys – granito akmuo. Eksperimentiškai LIPS būdu nustatčius ir rengteno spindulių difrakcijos metodu patvirtinus, kad tamsesnių bandinio vietų, skirtingai nei šviesesnių, struktūrose buvo ličio, pasirinkta cheminius žemėlapius vaizduoti šiam elementui (1 pav.)

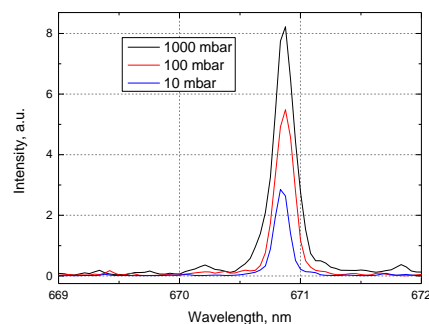


1 pav. (a) Granito bandinio IR spinduliuotėje tirtos paviršiaus zonos nuotrauka. (b) Ličio I 670.8 nm spektrinei linijai sukurtas LIPS žemėlapis.

Ultravioletinė spinduliuotė suteikia 2,5 karto geresnį LIPS cheminio žemėlapių kontrastą nei infraraudonoji prie vienodos impulsų energijos, tačiau UV indukuoti krateriai buvo maždaug dvigubai didesnio diametro, nes fotonų energija yra didesnė. Tai nėra priimtina

žemėlapiavimo pritaikymui, kadangi tai reiškia ir dvigubai suprastėjusių skyrą.

Mažesnis slėgis bandinio aplinkoje sumenkintų oro elementų įtaką LIPS spektrams bei dėl mažesnės dalelių koncentracijos, sumažėtų ir triukšmas. Naudojant IR spinduliuotę, ties 1000 mbar, 100 mbar ir 10 mbar buvo iširta, jog ličio spektrinei linijai signalo-triukšmo santykis nuo atmosferinio iki 10 mbar slėgio suprastėjo tik 1.5%, o linijos plotis sumažėjo net 40% ties $1/e^2$ lygiu (2 pav.). Siauresnės spektro linijos minimalizuoja spektrinės interferencijos tikimybę.



2 pav. Ličio I 670.8 nm LIPS spektrinės linijos iš granito akmens palyginimas esant skirtingam aplinkos slėgiui.

Taip pat buvo bandoma nustatyti geriausią įmanomą erdvinę cheminio žemėlapių skyrą bei mažiausią lazeriu indukuotą bandinio šurkštumą. Geriausia pasiekta erdvinė skyra buvo 9 μm, o toks žemėlapiavimo metodas indukavo tik apie 1 μm paviršiaus šurkštumą.

Apibendrinant darbą, buvo nustatyta, jog su infraraudonosios spektro srities femtosekundine lazerio spinduliuote, naudojant lazeriu indukuotos plazmos spektroskopijos metodą, galima atlikti cheminį bandinio paviršiaus žemėlapiavimą pasiekiant ~10 μm erdvinę skyrą.

Reikšminiai žodžiai: lazeriu indukuotos plazmos spektroskopija (LIPS), femtosekundinė spinduliuotė, cheminės sudėties vaizdinimas.

Literatūra

- [1] M. Kanyinda Jean-Noëla, K. Tshamala Arthurb, B. Jean-Marcc, v. J. *Environ. Sci. Public Heal.*, vol. **04**, no. 03, pp. 134–149 (2020).
- [2] V. Gardette, V. Motto-Ros, C. Alvarez-Llamas, L. Sancey, L. Duponchel, B. Busser, *Anal. Chem.*, vol. **95**, no. 1, pp. 49–69 (2023).

Pakopinės rotacinės priverstinės Ramano sklaidos žadinimas vienetinių pikosekundžių trukmės lazerio impulsais

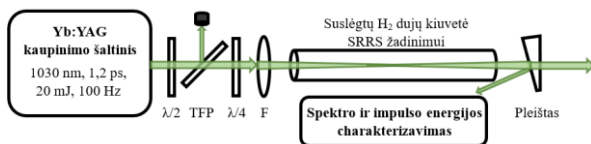
Excitation of cascaded stimulated rotational Raman scattering by single-picosecond laser pulses

Augustė Černekytė, Augustinas Petrulėnas, Paulius Mackonis, Aleksej M. Rodin

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Kieto kūno lazerių laboratorija, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
auguste.cernekyte@ftmc.lt

Pastaraisiais metais sparčiai besivystant netiesinei optinei mikroskopijai [1], vis svarbesni tampa ultratrumpųjų impulsų lazeriniai šaltiniai, kurie efektyviai sužadintų netiesinius procesus audinyje dar prieš juos pažeidžiant. Todėl optimalus lazerio spinduliuotės centrinis bangos ilgis turėtų būti 1,1 – 1,3 μm srityje, kurioje šviesos skvarbos gylys yra didžiausias. Nepaisant didelės smailinės galios lazerių plėtros pasaulyje, daugiausiai paplitę lazeriniai šaltiniai apsiriboja $\sim 1 \mu\text{m}$ bangos ilgiais, bei jų II ir III harmonikomis. Todėl alternatyvių metodų paieška yra būtina siekiant sukurti efektyvius didelės energijos ultratrumpuosius ilgesnių bangos ilgių lazerinius šaltinius. Viena iš alternatyvų yra priverstinė Ramano sklaida (*angl. stimulated Raman scattering*, SRS). Šis metodas turi tam tikrų privalumų: erdvinis pluošto valymas SRS keitimo metu, impulsų spūda [2] ir didelis keitimo efektyvumas, galintis siekti iki 50-60% [3] plačioje spektrinėje srityje. SRS nereikalauja fazinio sinchronizmo sąlygos, todėl sugeneruotos SRS spinduliuotės dažnių juosta ir jos plotį apsprendžia tik kaupinimo spinduliuotės spektro plotis, aktyviosios Ramano terpės Stokso poslinkis ir optinių fononų relaksacijos laikas.

Šio darbo tikslas buvo ištirti priverstinę Ramano sklaidą, žadinant rotacines virpesines modas (*angl. stimulated rotational Raman scattering*, SRRS) suslėgtose molekuliniuose vandenilio (H_2) dujose, ir nustatyti optimalias sąlygas siekiant generuoti intensyvią ultratrumpųjų lazerio impulsų spinduliuotę 1,1 - 1,3 μm spektrinėje srityje.

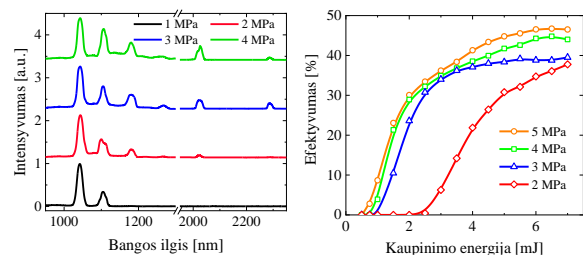


1 pav. Eksperimentinė SRRS žadinimo suslėgtų H_2 dujų kiuvetėje schema.

Eksperimentiškai ištirta SRRS spektro gaubtinės bei keitimo efektyvumo priklausomybės nuo dujų slėgio, kaupinimo impulso energijos ir poliarizacijos. Kaupinimui naudoti 1030 nm, 1,2 ps apskritiminės poliarizacijos impulsai (1 pav.). Tyrimai buvo atliekami 1 m ilgio kiuvetėje, keičiant H_2 dujų slėgį nuo 0,5 MPa iki 5 MPa ir kaupinimo spinduliuotės impulso energiją nuo 0,5 mJ iki 7 mJ.

SRRS spektro gaubtinės kitimas keičiant dujų slėgį

kiuvetėje, pateiktas 2 pav. - kairėje. Pradžioje (1 MPa slėgis), dėl mažo stiprinimo, stebima tik pirmos eilės rotacinio Stokso spinduliuotė, atitinkanti 587 cm^{-1} poslinkį. Didinant vandeninio dujų slėgį, generuojama ir antros bei trečios eilės Stokso spinduliuotė.



2 pav. SRRS spektro gaubtinė (kairėje) ir keitimo efektyvumas (dešinėje) esant 1-5 MPa H_2 dujų slėgiui.

Rotacinės sklaidos keitimo efektyvumo priklausomybė nuo kaupinimo energijos naudojant skirtingus vandenilio dujų slėgius pavaizduota 2 pav. - dešinėje. Matyti, kad SRRS slenkstis (1 % efektyvumas) sumažėja 4 kartus, kai dujų slėgis padidinamas nuo 2 MPa iki 5 MPa. Galiausiai nustatyta, kad SRRS keitimo efektyvumas padidėja 1,2 karto naudojant apskritiminę kaupinimo poliarizaciją. Be to, apskritiminė poliarizacija slopina vibracines Ramano modas ir leidžia efektyviau žadinti aukštesnės eilės rotacinio Stokso spinduliuotę.

Pagrindiniai tyrimo rezultatai parodė, kad SRRS keitimo efektyvumo ir spektro išplėtimo padidėjimas, taip pat slenkstinės energijos sumažėjimas gali būti pasiektas optimaliai padidinus kaupinimo energiją ir H_2 dujų slėgį, taip pat optimizuojant kaupinimo poliarizaciją. Didžiausias keitimo efektyvumas siekė $\sim 47\%$, o spektrinė juosta buvo išplėsta iki 1,3 μm . Šie impulsai ateityje galėtų būti suspausti iki vienetinių fs naudojant gardelinį arba prizminį kompresorių.

Šiam projektui dalinį finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba pagal sut. Nr. S-MIP-23-74 ir Nr. P-SV-23-11.

Reikšminiai žodžiai: priverstinė Ramano sklaida, ultratrumpieji impulsai, aukšto slėgio dujos.

Literatūra

- [1] N.M. Israelsen, C.R. Petersen, A. Barh, D. Jain, M. Jensen, G. Hanneschläger, P. Tidemand-Lichtenberg, C. Pedersen, A. Podoleanu, and O. Bang, *Light Sci. Appl.* **8**, 11 (2019).
- [2] H. Kawano, Y. Hirakawa, T. Imasaka, *Appl. Phys.* **65**, 1–4 (1997).
- [3] D. von der Linde, M. Maier, W. Kaiser, *Phys. Rev.* **178**, 11–17 (1969).

Poliarizaciją išlaikančio fotoninių kristalų šviesolaidžio netiesinio atsako vertinimas naudojant fazės pokytį tarp statmenų poliarizacinių modų

Estimation of photonic crystal fiber nonlinear response using phase shift between orthogonal polarization modes

Miglė Kuliešaitė, Julius Vengelis, Vygandas Jarutis

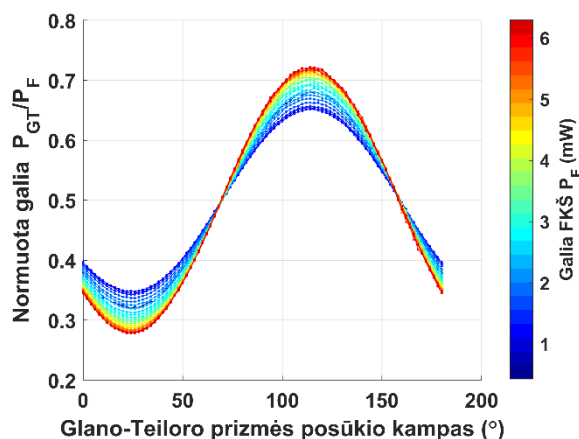
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
migle.kuliesaitė@ff.vu.lt

Vieni iš pagrindinių netiesinės optikos uždavinių yra įvairių medžiagų netiesinio atsako tyrimai. Šiuose tyrimuose labai reikšmingas medžiagos parametras yra netiesinis lūžio rodiklis n_2 , leidžiantis apibūdinti reiškinių, kuriuos lemia trečios eilės netiesinis jautris, stiprumą, todėl svarbu tiksliai nustatyti jo vertę. Pirmo tipo fotoninių kristalų šviesolaidžiai (FKŠ) yra didelį netiesiškumą turinti terpė, kuri nuo paprastų šviesolaidžių skiriasi tuo, kad yra sudaryta iš periodinių mikrostruktūrų srities, kurių centre ir sklinda šviesa [1]. Yra sukurta keletas technikų leidžiančių įvertinti šviesolaidžių n_2 , kurios remiasi netiesinės optikos reiškiniais tokiais kaip fazės moduliavimas [2], kryžminė fazės moduliacija [3], keturbangis dažnių maišymasis [4]. Deja, šie metodai puikiai tinka tuo atveju, kada kaupinimo bangos ilgis yra artimas nuliniam dispersijos bangos ilgiui [3-4]. Taip pat, keturbangis dažnių maišymasis reikalauja tenkinti fazinio sinchronizmo sąlygą, kurią sunku užtikrinti ultratrumpiems impulsams [4].

Šiame pranešime mes pristatome poliarizaciją išlaikančio FKŠ netiesinio atsako matavimo metodą naudojant fazės pokytį tarp statmenų poliarizacinių modų. Yb:KGW „Flint“ lazerinio osciliatoriaus generuojantis 1030 nm bangos ilgio 110 fs trukmės impulsus, kurių pasikartojimo dažnis 76 MHz, buvo naudojamas kaip kaupinimo šaltinis netiesinam impulsų spektro plitimui FKŠ. Eksperimentams atlikti buvo naudojamas didelio netiesiškumo poliarizaciją išlaikantis 15 cm ilgio pirmo tipo FKŠ, kuriame dispersijos nulį atitinkantis bangos ilgis yra ties $1087,4 \text{ nm} \pm 10 \text{ nm}$ (labai panašus abiem poliarizacinėms modams). Šio šviesolaidžio šerdies diametras yra lygus $4,8 \text{ } \mu\text{m}$, o atstumas tarp mikrostruktūrų lygus $3,25 \text{ } \mu\text{m}$. Į šviesolaidį įeinančios šviesos poliarizacijos plokštuma buvo sukama su prieš FKŠ pastatyta pusės bangos ilgio $\lambda/2$ plokštelė. Už FKŠ pastatytas Glano – Teiloro prizmė buvo naudojama kaip analizatorius. Atliekant eksperimentą keičiant kaupinimo impulsų galią ir tolygiai sukant Glano – Teiloro prizmę už jos pastatytu galios matuokliu buvo matuojama iš FKŠ išėjusios šviesos vidutinė galia. Taip buvo matuojama, kaip keičiasi iš FKŠ išėjusios šviesos poliarizacinė būseną kintant kaupinimo impulsų galią.

Viena kitai statmenos poliarizacinės modos FKŠ sklinda skirtingais faziniais greičiais, taigi įvertinę kaip keičiasi šviesos poliarizacijos sukimasis priklausomai nuo kaupinimo impulsų galios, mes galime nustatyti FKŠ netiesinio atsako koeficientus. Eksperimento rezultatų skaitinės analizės rezultatai parodė, kad iš FKŠ išėjusios

šviesos galia už Glano-Teiloro prizmės (1 pav.) priklauso ne tik nuo Glano-Teiloro prizmės orientacijos kampo α , bet nuo netiesinio fazės skirtumo, priklausančio ne tik nuo šviesolaidžio ilgio ir šerdies lūžio rodiklių, bet ir nuo galios (intensyvumo). Taip pat buvo įvertinta netiesinio lūžio rodiklio vertė $n_{2,1221} = (0.4 \pm 0.09) \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{W}$. Šis netiesinio atsako įvertinimo metodas gali būti pritaikytas ne tik FKŠ, bet ir paprastiems šviesolaidžiams.



1 pav. Normuotos vidutinės galios už Glano -Teiloro prizmės priklausomybė nuo Glano-Teiloro prizmės orientacijos FKŠ ašiu atžvilgiu esant skirtingai kaupinimo impulsų galią.

Reikšminiai žodžiai: netiesinis atsakas, netiesinis lūžio rodiklis, fotoninių kristalų šviesolaidis, femtosekundiniai impulsai.

Literatūra

- [1] P.S.J. Russel, Photonic-crystal fibers, J. Light. Technol. **24**, 4729-2749 (2006).
- [2] M. Asobe, K. Suzuki, T. Kanamori, K. Kubodera, Nonlinear refractive index measurement in chalcogenideglass fibers by selfphase modulation, Appl. Phys. Lett. **60**(10), 1153–1154 (1992).
- [3] T. Kato, Y. Suetsugu, M. Takagi, E. Sasaoka, M. Nishimura, Measurement of the nonlinear refractive index in 152 optical fiber by the cross-phase-modulation method with depolarized pump light, Opt. Lett. **20**(9), 988–990 (1995).
- [4] L. Prigent, J. P. Hamaide, Measurement of fiber nonlinear kerr coefficient by four-wave mixing, IEEE Photonics Technol. Lett. **5**(9), 1092–1095 (1993).

Depoliarizacijos kompensavimas 10 mJ, 100 W, 10 kHz hibridinėje lazerinėje sistemoje

Depolarization compensation in 10 mJ, 100 W, 10 kHz hybrid laser system

Aivaras Kazakevičius^{1,2}, Rokas Danilevičius², Andrejus Michailovas^{1,2}

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

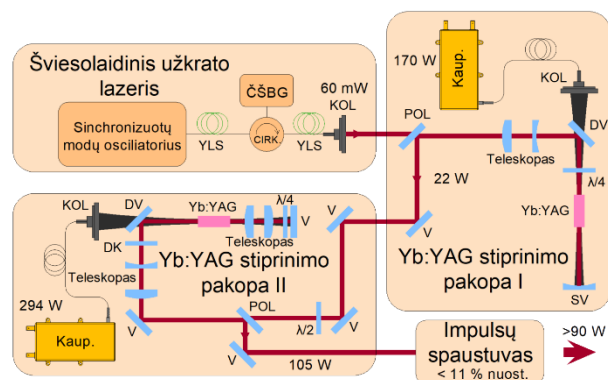
² UAB Ekspla, Savanorių pr. 237, LT-02300 Vilnius

a.kazakevicius@ekspla.com

Didelės energijos ir vidutinės galios lazeriai pritaikomi įvairiose mokslinių tyrimų bei pramonės srityse. Aukštos smailinės galios ultratrumpieji impulsai naudojami spinduliuotės generacijai ekstremalios UV, THz ir rentgeno spindulių srityse arba laisvųjų elektronų pluoštų generacijai. Pramonėje tokie lazeriai pritaikomi itin mažų matmenų lustų gamybai arba vienašviame lazeriniame ženkliniui atlikti.

Rekordiniai išvariniai lazerių pasiekiami pasitelkiant čirpuotų impulsų stiprinimą (CPA) plonojo disko arba daugialėkiuose Yb:YAG aktyvios terpės stiprintuvuose, optiniu parametriniu čirpuotų impulsų stiprinimu (OPCPA) paremtuose lazeriuose bei šviesolaidinių stiprintuvų koherentinio impulsų apjungimo lazerinėse sistemose. Itin maža < 100 fs impulso trukmė OPCPA sistemose gaunama pasitelkiant plataus spektro superkontinuumo netiesinį stiprinimą, o Yb:YAG sistemose – fazinę savimoduliaciją dujomis užpildytuose tuščiaaviduriuose fotoninių kristalų šviesolaidžiuose (*hollow-core fiber*) arba daugelio lėkių celėse (*multi-pass cell*).

Impulso energijos bei spinduliuotės vidutinės galios didinimas yra vienas iš pagrindinių ultrasparčių lazerių technologinių iššūkių. Siekiant didelės lazerio spinduliuotės vidutinės galios susiduriama su termiškai indukuotais įtempiams aktyviojoje terpėje, dėl kurių atsiranda depoliarizacijos nuostoliai bei suprastėja išvarinio pluošto kokybė. Iš galo kaupinamuose stiprintuvuose, kurie yra nagrinėjami šiame darbe, šie efektai tampa reikšmingi pasiekus apie 100 W vidutinę lazerio spinduliuotės galią[1].



1 pav. Principinė didelės energijos ir vidutinės galios pikosekundinio lazerio schema.

Šiame darbe pristatomas hibridinis 10 mJ, 100 W, 10 kHz lazeris susidedantis iš didelės energijos pikosekundinio šviesolaidinio lazerio ir dviejų tiesinių

dvilėkių Yb:YAG aktyvios terpės laisvos erdvės stiprintuvų bei nagrinėjamas depoliarizacijos kompensavimo metodas pasitelkiant parabolinio delsos profilio banginę plokštelę[2].

Šviesolaidiniame sinchronizuotų modų osciliatoriuje sugeneruojami pikosekundiniai impulsai 47,4 MHz impulsų pasikartojimo dažniu. Impulsų trukmė padidinama iki 390 ps pasinaudojant čirpuota šviesolaidine Brego gardele ir panaudojant kelias šviesolaidines stiprinimo pakopas pasiekama 6 μJ impulso energija šviesolaidinio lazerio išėjime. Impulsų pasikartojimo dažnis mažinamas iki 10 kHz šviesolaidiniame akustooptiniame moduliatoriuje. Toliau, panaudojant dvi laisvos erdvės Yb:YAG stiprinimo pakopas, impulsai stiprinami iki 2,2 mJ ir 10 mJ impulso energijos. Spinduliuotės spektro plotis lazerio išėjime yra 1,31 nm ir atitinka 900 fs spektru ribotą impulso trukmę. Lazerio impulsai suspausti keturių lėkių gardeliniame Treacy tipo impulsų spaustuve iki 1 ps trukmės, pasiektas 90% impulso kontrastas. Išvarinis pluoštas buvo paveiktas terminių įtempių antrojoje stiprinimo pakopoje. Esant maksimaliai kaupinimo spinduliuotės galiai gauta 12% depoliarizacijos nuostolių, o išvarinio pluošto kokybė pasikeitė nuo < 1,1 pirmojoje laisvos erdvės stiprinimo pakopoje iki < 1,3 – antrojoje. Siekiant sumažinti nuostolius ir pagerinti išvarinio pluošto kokybę, panaudotas naujas depoliarizacijos kompensavimo metodas. Tiesioginio lazerinio rašymo būdu pagaminta paraboliniu delsos profiliu pasižyminti banginė plokštelė (*Workshop of Photonics*). Panaudojus šią banginę plokštelę antrojoje Yb:YAG stiprinimo pakopoje, depoliarizacijos nuostoliai sumažinti iki 5%. Tačiau išvarinio pluošto kokybė išliko nepakitusi.

Pranešimo metu bus apžvelgiamos lazerinių sistemų vidutinės galios ir impulso energijos didinimo strategijos bei pristatomi stiprinimo ir depoliarizacijos kompensavimo eksperimentai tiesiniuose dvilėkiuose Yb:YAG stiprintuvuose.

Reikšminiai žodžiai: hibridinis lazeris, tiesiniai stiprintuvai, čirpuotų impulsų stiprinimas, depoliarizacija, pluošto kokybė, iterbiu legiruotas itrio aliuminio granatas.

Literatūra

- [1] I. Kuznetsov, S. Chinzov, O. Palashov, *JOSAB* **40**, 2434 (2023).
- [2] L. Veselis, R. Burokas, o. Ulčinas, T. Gertus, K. Michailovas, A. Michailovas, *Appl. Opt.* **60**, 7164 (2021).

Elektrinių parametų charakterizavimas „peteliškių“ formos THz jutikliuose su integruota difrakcine plokščia optika

Electrical characterisation of the „bow-tie“ THz detector integrated with diffractive flat optics

Matas Bernatonis^{1,2}, Vytautas Jakštas¹, Renata Butkutė¹, Andrius Bičiūnas¹, Karolis Redeckas^{1,2}, Kasparas Stanaitis^{1,2}, Ignas Grigelionis¹, ir Linas Minkevičius¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

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

matas.bernatonis@ftmc.lt

Elektromagnetinė terahercinio (THz) dažnio spinduliuotė pasižymi savybe prasiskverbti pro tokius žmogaus akiai nepermatomus objektus kaip tekstilė, popierius, plastikas. Tai leidžia užtikrinti efektyvią saugumo kontrolę oro uostose [1] ir identifikuoti žalingas, narkotines arba sprogiasias medžiagas neardant pačios pakuotės. Dabartinis THz spinduliuotės panaudojimas yra ribojamas rinkoje esančių šaltinių stoka, aplinkos sugertimi, bei detektorių trūkumu. Egzistuojantys kambario temperatūroje veikiantys jutikliai, tokie kaip mikrobolometrai, JFET ir MOSFET (lauko tranzistoriai) [2] pasižymi sudėtinga konstrukcija, dideliu elektrostatiniu jautrumu, bei komerciniu neprieinamumu.

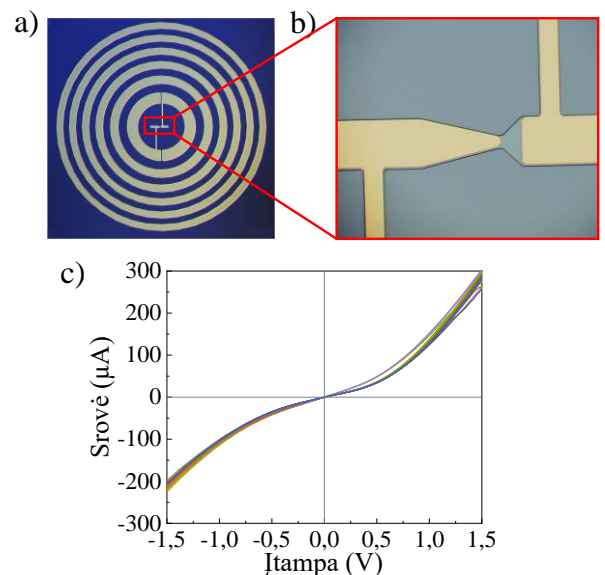
Šiame darbe naudojamas vienas iš populiarių THz dažnių ruožo detekcijai skirtų sprendimų, panaudojant „peteliškių“ formos detektorių [3]. Tokio tipo detektoriai nereikalauja nuolatinės postūmio įtampos darbo taškui parinkti, o jų asimetrinė struktūra leidžia detektuoti THz spinduliuotę. Siekiant stipresnio detektoriaus atsako, panaudotas naujas detektoriaus ir spinduliuotės sąsajos sprendimas, kai tiek detektorius, tiek difrakcinė optika yra talpinamos ant lusto paviršiaus (1.a pav). Naujo tipo „peteliškės“ formos jutikliai išsiskiria gerokai paprastesne ir pigesne gamybos technologija [4] ir padidintu detektoriaus jautrumu, efektyvumu, bei vaizdo raiškos kokybę.

„Peteliškės“ tipo jutikliai buvo gaminami iš ant InP padėklo molekulinio pluošto epitaksijos (MBE) būdu užaugintos InGaAs struktūros (1a,b pav.). „Peteliškės“ formos jutiklis buvo suformuotas pasitelkiant UV fotolitografijos ir šlapaus puslaidininkio ėsdinimo technologija. Metalizacija buvo atlikta elektronų pluošto metodu. Tyrimo metu buvo analizuojamas detektorių gamybos atsikratomumas tiek tomis pačiomis auginimo sąlygomis, tiek pakeitus MBE auginimo parametrus. Bandinių aktyvūs sluoksnis pasižymėjo skirtingu legiravimu ir storium, bei buvo auginami esant skirtingoms temperatūroms.

Naudojantis zondiniu manipulatoriumi buvo matuojamos jutiklių voltamperinės charakteristikos. Išmatuoti 27 pirmojo MBE auginimo demonstruoja gerą voltamperinių charakteristikų atsikratomumą (1.c pav.). Šiose charakteristikose stebėta pagamintų diodų asimetrija, kuri siekia 33%.

Apibendrinant tyrimo rezultatus, atsižvelgiant į asimetrinę voltamperinę charakteristiką, darytina išvada,

kad naujas pasiūlytas „peteliškės“ tipo detektoriaus ir difrakcinės optikos sąsajos metodas yra tinkamas didelio atsako detektoriaus gamybai. Didelis atsikratomumas tarp skirtingų to pačio ruošinio bandinių parodo optimaliai pasirinktus auginimo parametrus.



1 pav. InGaAs „peteliškės“ tipo THz detektoriaus ir charakterizavimo rezultatai. a) Pilnas „peteliškės“ tipo jutiklio su zoninėmis plokštėmis vaizdas. b) Jutiklio aktyvioji sritis. c) To paties ruošinio 27 atskirų jutiklių voltamperinės charakteristikos.

Padėka

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. [S-MIP-22-76].

Literatūra

- [1] G. Valušis et al., „Roadmap of Terahertz Imaging 2021“, *Sensors* 21(12), 4092, 2021.
- [2] J. Elham et al., „Sensitivity of Field-Effect Transistor-Based Terahertz Detectors“, *Sensors* 21(9), 2909, 2021.
- [3] L. Minkevičius et al., „On-chip integration of laser-ablated zone plates for detection enhancement of InGaAs bow-tie terahertz detectors“, *Electronics Letters*, 50(19), 1, 2014.
- [4] V. Palenskis et al., „InGaAs Diodes for Terahertz Sensing—Effect of Molecular Beam Epitaxy Growth Conditions“, *Sensors* 18(11), 3760, 2018.

Polarizacinis skirtuminės bangos pašalinimas didinant optinio parametrinio stiprinimo efektyvumą

Polarization-based idler elimination: enhancing the efficiency of optical parametric amplification

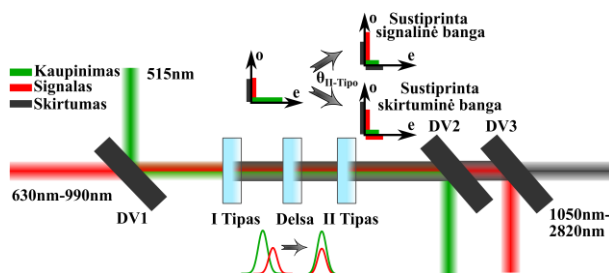
Gaudenis Jansonas^{1,2}, Rimantas Budriūnas^{1,2}, Gintaras Valiulis¹, Arūnas Varanavičius¹

¹Vilniaus universitetas, Lazerenių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10222 Vilnius

²Light Conversion, UAB, Keramikų g. 2B, LT-10233 Vilnius

gaudenisjansonas@yahoo.com

Derinamo bangos ilgio femtosekundiniai lazeriniai šaltiniai yra labai svarbūs šiandieniniame moksle. Realizuojant tokius šaltinius dažnai yra naudojami optiniai parametriniai stiprintuvai (OPS). Juose įprastas praktinis energijos keitimo iš kaupinimo į signalinę bangą efektyvumas η_{ks} nesiekia daugiau nei 20%, o kaupinimo nuskurdinimas – 30%. Pagrindinis keitimo ribojantis reiškinys yra atgalinė konversija. Ją galima nuslopinti tinkamai pašalinus skirtuminę bangą iš netiesinės sąveikos. Praktiškai tai buvo realizuota pasinaudojant nekolinearus kaupinimo pernaudojimo schemomis [1] arba skirtuminės bangos sugertimi [2]. Šie sprendimai reikalauja didelio optinės schemos ploto arba egzotinių medžiagų, todėl siekiant spręsti šias problemas mes pasiūlėme poliarizaciškai atskirti skirtuminę bangą nuo sąveikos naudojant I ir II tipų stiprinimo procesų kombinaciją toje pačioje stiprinimo pakopoje, kaip parodyta 1 pav. Antrojo tipo netiesiniame kristale nėra realizuojamos fazinio sinchronizmo sąlygos anksčiau sugeneruotai skirtuminei bangai, todėl ji efektyviai nebedalyvauja tolimesnėje sąveikoje. Šitai stiprinimas tęsiasi generuojant statmenos poliarizacijos skirtuminę bangą. Tokioje konfigūracijoje derinant II tipo kristalo polinį kampą θ galima išsirinkti netiesinę sąveiką, kurios metu toliau yra stiprinama skirtuminė banga, šitai realizuojant signalo eliminavimą ir padidinant skirtuminės bangos generavimo efektyvumą.

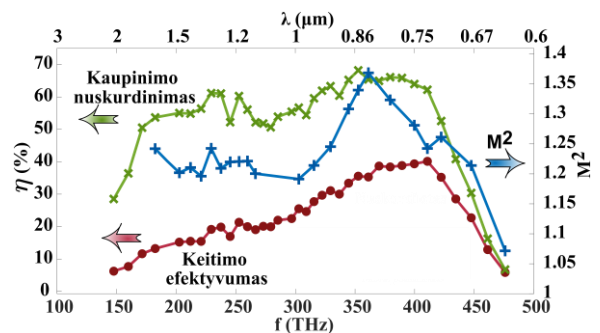


1 pav. Pagrindinės optinio parametrinio stiprinimo pakopos schema. DV – dichroinis veidrodis, o ir e žymi paprastosios ir nepaprastosios poliarizacijos ašis.

Idėja buvo išpildyta naudojant komercinį kaupinimo lazerį (Carbide, Light Conversion). Impulsų centrinis bangos ilgis λ buvo 1030 nm, trukmė – 300 fs, energija – 400 μ J, maksimali vidutinė galia – 80 W. Pagrindinė pakopa buvo kaupinama 515 nm ir 212 μ J impulsais. Užkratui buvo naudojama derinamo bangos ilgio (630 nm – 990 nm) mažos energijos (<1,1 μ J) spinduliuotė.

Siekiant kompensuoti laikinį signalinio ir kaupinimo impulsų išbėgimą buvo naudojamas trečias dvejopalaūžis delsos kristalas (1 pav.), kuriame stiprinimas nevyko. Schemoje naudoti tik standartiniai β -BaB₂O₄ (BBO) kristalai. Bangos ilgio derinimas buvo pasiektas sukant stiprinimo kristalų θ ir keičiant delsą tarp užkrato ir kaupinimo impulsų. Stiprintuvo išėjime buvo stebimi vidutiniškai 100 cm⁻¹ spektrinio pločio ir <300 fs trukmės impulsai be jokio išorinio spaustuvo.

Pagrindiniai mūsų siūlomo OPS parametrai visame bangos ilgio derinimo ruože pavaizduoti 2 pav. Matyti, jog aukšti keitimas ir kaupinimo nuskurdinimas yra stebimi didžiojoje dalyje bangos ilgio derinimo ruožo, o pluošto kokybės parametras M^2 vis dar išlieka <1,4. Buvo pasiektas 68% smailinis kaupinimo nuskurdinimo lygis, o maksimalus η_{ks} siekė 40%, kai $M^2 = 1,25$.



2 pav. Pagrindiniai eksperimentinio energijos keitimo charakterizavimo rezultatai. η – efektyvumas, f – nešantysis dažnis.

Apibendrinant, naudojantis poliarizaciniu skirtuminės bangos pašalinimu galima kompaktiškai ir žymiai padidinti siauros spektrinės juostos optinio parametrinio stiprinimo keitimą iš kaupinimo į signalą pasitelkiant standartinius netiesinius kristalus ir neprarandant paprasto bangos ilgio derinimo galimybių.

Reikšminiai žodžiai: skirtuminės bangos pašalinimas, optinis parametrinis stiprinimas, aukštas efektyvumas, aukšta pluošto kokybė.

Literatūra

- [1] M. Schultze, T. Binhammer, G. Palmer, M. Emons, T. Lang, and U. Morgner, *Opt. Express* **18**, 27291–27297 (2010).
- [2] J. Ma, J. Wang, P. Yuan, G. Xie, K. Xiong, Y. Tu, X. Tu, E. Shi, Y. Zheng, and L. Qian, *Optica* **2**, 1006–1009 (2015).

Didelio pasikartojimo dažnio ir vidutinės galios derinamo bangos ilgio UV-VIS femtosekundinės lazerinės sistemos kūrimas

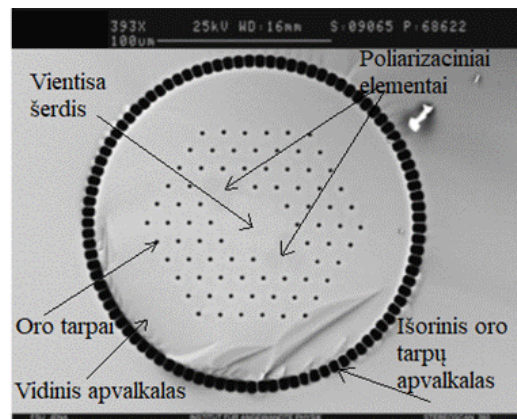
Development of high repetition rate and average power tunable wavelength UV-VIS femtosecond laser system

Miglė Kuliešaitė, Jokūbas Pimpė, Jonas Banys, Julius Vengelis
Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius
migle.kuliesaitė@ff.vu.lt

Didelio pasikartojimo dažnio (>50 MHz) ir vidutinės galios derinamo bangos ilgio ultravioletinėje (UV) ir regimojoje (VIS) spektro srityse femtosekundiniai lazerio impulsai yra labai reikalingi daugybėje lazerinio medžiagų apdirbimo ir fundamentinio mokslo sričių [1]. Taikymai fundamentiniame moksle, kurie papildomai reikalauja bangos ilgio derinimo galimybės UV ir regimojoje spektro srityje apima įvairius spektroskopijos tipus, netiesinę mikroskopiją, aukštųjų harmonikų generaciją, medžiagų mokslą ir t. t. Įprastai UV ir VIS spektro sritis pasiekama keičiant artimosios infraraudonosios spektro srities (NIR) lazerių dažnį netiesiniuose kristaluose. Visgi, norint pasiekti didelę vidutinę galią UV srityje, reikia turėti šimtų vatų galios NIR lazerinės spinduliuotės šaltinį. Nors strypiniai, plonojo disko ir šviesolaidiniai lazeriai generuoja šimtų vatų vidutinės galios spinduliuotę NIR spektro srityje ir, atrodo, yra puikūs kandidatai šiai užduočiai, kol kas sukurtos tik kelių vatų femtosekundinės UV lazerinės sistemos [2]. Lazerio bangos ilgio derinimas femtosekundinių impulsų atveju yra pasiekiamas naudojant sinchroniškai kaupinamus parametrinius šviesos generatorius (SPOPO) [3]. Nors ši technologija yra subrendusi, ji iš esmės yra fokusuota į NIR ir vidurinę infraraudonąją (mid-IR) spektro sritis [4, 5]. Įmanoma pasiekti regimąją spektro sritį kaip kaupinimą parametriniam generatoriui naudojant antrąją Ti:safyro ar Yb:KGW lazerių harmonikas, bet signalinės bangos derinimo diapazonas tokiu atveju pilnai neapėpia visos VIS spektro srities.

Šiame darbe pristatome eksperimentinę idėją, kurios tikslas – sukurti vatų lygio vidutinės galios didelio pasikartojimo dažnio plačioje spektro srityje derinamo bangos ilgio UV-VIS femtosekundinę lazerinę sistemą aprėpiančią visą VIS ir dalį UV spektro srities. Pristatomas projektas parinktos kombinuotos lazerinės sistemos, susidedančios iš trijų dalių: 1) valdomo pradinio čirpo šviesolaidinė stiprinimo lazerinė sistema (PCMA), naudojanti 76 MHz sinchronizuotų modų Yb:KGW lazerinį osciliatorių ($\lambda_c=1036$ nm) kaip užkrato spinduliuotės šaltinį ir strypinį šviesolaidinį stiprintuvą kaip lazerinio stiprinimo terpę; 2) dviejų pakopų trečios harmonikos generatorius, kuris generuotų didelės vidutinės galios 76 MHz pasikartojimo dažnio femtosekundinius lazerio impulsus naudojant spinduliuotę iš minėtos PCMA sistemos; 3) SPOPO tiesiogiai kaupinamas trečiąja harmonika ($\lambda_c=345,3$ nm) iš minėto dviejų pakopų trečios harmonikos generatoriaus.

Naudojant 145 W galios nuolatinės veikos lazerinį diodą (model e09i-09-145-0976, *nLIGHT Corp*) kaupinimui PCMA sistemoje, tokia kombinuota sistema generuos didelio pasikartojimo dažnio artimus spektriškai ribotiems femtosekundinius impulsus su vatų lygio vidutine galia ir bangos ilgio derinimu beveik visoje VIS ir dalyje UV spektro srities (383 nm – 690 nm).



1 pav. Yb legiruotas didelio modos ploto dvigubo apvalkalo fotoninių kristalų šviesolaidis su poliarizaciją išlaikančiais elementais, naudojamas Yb strypiniame šviesolaidiniame stiprintuve.

Projekto veikloms finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-23-32.

Reikšminiai žodžiai: Yb:KGW osciliatorius, Yb strypinis šviesolaidinis stiprintuvas, PCMA, lazerinis diodas, sinchroniškai kaupinamas parametrinis šviesos generatorius.

Literatūra

- [1] C. Saraceno, F. Emaury, A. Diebold, et al. Proc. SPIE **9835**, 98350X (2016).
- [2] N. A Chaitanya, A. Aadhi, M. V. Jabir, and G. K. Samanta, Opt. Lett. **40**, 4269 (2015).
- [3] H. M. van Driel, Appl. Phys. B **60**, 411 - 420 (1995).
- [4] V. Petrov, Opt. Mater. **34** 536 - 554 (2012).
- [5] M. H. Dunn and M. Ebrahimzadeh, Science **286**(5444), 1513-1517 (1999).

Airy tipo nehomogeniškai poliarizuoti pluoštai ir jų savybės

Airy-Like Nonuniformly Polarized Beams and Their Characteristics

Justas Berškys¹, Sergejus Orlovas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
justas.berškys@ftmc.lt

Airy pluoštai [1] yra intriguojanti optikos sritis, jie pasižymi unikaliomis savybėmis, tokiomis kaip nedifraguojantis intensyvumo profilis, parabolinė pluošto sklaidimo trajektorija, papildomai, galimas orbitinis judesio kiekio momentas besisukant pluošto fazei ar sukinnis judesio kiekio momentas, sukantis pluošto poliarizacijai sklaidimo kryptimi. Perturbuojant šiuos pluoštus jie grįžta į pradinę formą, tai reiškia, kad sąveikaujant su kliūtimis, jų fazė ar amplitudė sutrikdoma, tačiau sklaidimo metu intensyvumo profilis yra atkuriamas. Tai juos daro ypač naudingais turbulencinėje aplinkoje.

Kita nehomogeninės poliarizacijos pluoštams būdinga savybė yra tai, kad juose gali būti aptinkamos topologinių kvazi-dalelių struktūros. Šviesos topologinės kvazi-dalelės yra lauko struktūros, kurios turi daug realioms dalelėms būdingų savybių. Tokios kvazi-dalelės yra aptinkamos lauko poliarizacinėje struktūroje, Poyntingo vektoriuje ar išvestinėse elektromagnetinio lauko formose. Kai kurios topologinių kvazi-dalelių lauko konfigūracijos yra stabilios, tokios kvazi-dalelės panaudojamos įvairiose srityse, kaip sukino optika, vaizdavimas, metrologija ir daugelis kitų [2]. Šios kvazi-dalelės apibrėžiamos Skyrmioniniu skaičiumi s :

$$s = \frac{1}{4\pi} \iint \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (1)$$

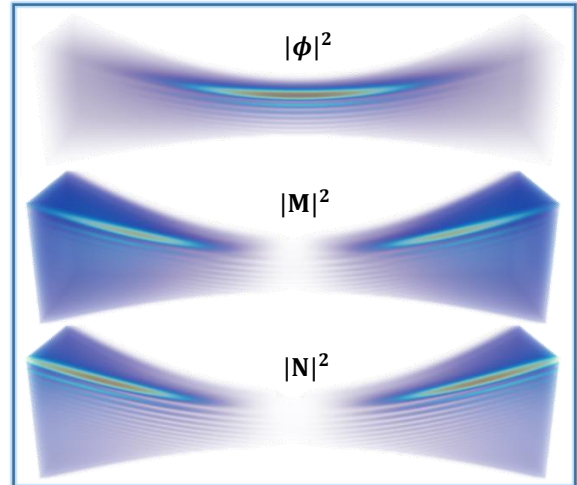
čia \mathbf{n} yra normuotas elektromagnetinis laukas ar aukštesnės eilės jo išvestinė forma.

Šiame tyrime [3] pristatome Airy pluoštą, turintį nehomogeninę poliarizacinę struktūrą. Norėdami sukurti optinius vektorinius Airy tipo laukus, atitinkančius du statmenus sprendinius - elektrinį ir magnetinį, pradėdami nuo skaliarinio Airy pluošto, naudojame tradicinį Morso ir Feshbacho metodą, pristatytą [4]:

$$\mathbf{L} = \nabla \phi, \quad \mathbf{M} = \nabla \times \mathbf{e}\phi, \quad \mathbf{N} = 1/k \times \mathbf{M}, \quad (2)$$

čia \mathbf{L} , \mathbf{M} ir \mathbf{N} yra sprendiniai atitinkantys šaltinio, magnetinio ir elektrinio tipo elektromagnetinius laukus, ϕ - skaliarinis Airy laukas, o \mathbf{e} - laisvai pasirenkamas krypties vektorius.

Gaunamo pluošto intensyvumo profiliui įtaką daro lauko singularumai, jie gali būti taškinio arba linijinio pobūdžio ir priklauso nuo pasirinktos poliarizacijos. Šiame darbe mes nagrinėjame tokių laukų savybes ir jas aptariame, taip pat skaičiuojame Furjė spektrą eksperimento įgyvendinimui.



1 pav. Intensyvumo pasiskirstymas skaliarinio Airy pluošto $|\phi|^2$, magnetinės prigimties elektromagnetinio lauko $|\mathbf{M}|^2$ ir elektrinio tipo elektromagnetinio Airy pluošto $|\mathbf{N}|^2$.

Taip pat, šis pluoštas turi labai įdomią savybę - bimeroninę gardelę. Šią gardelę galima pastebėti normalės poliarizacinei elipsei lauke. Tai įdomu, nes gardelės paprastai pastebimos ribotų erdvių aplinkoje, o šiuo atveju ji egzistuoja laisvai sklindančiame vektoriniame pluošte.

Reikšminiai žodžiai: Elektromagnetiniai vektoriniai laukai, Airy pluoštai, sukinniniai pluoštai.

Literatūra

- [1] G. Siviloglou, and D. Christodoulides. *Accelerating finite energy Airy beams*, Optics letters (2007): 979-981.
- [2] Y. Shen, Q. Zhang, P. Shi, L. Du, A. V. Zayats, and X. Yuan, *Topological quasiparticles of light: Optical skyrmions and beyond*, arXiv preprint arXiv:2205.10329 (2022).
- [3] J. Berškys and S. Orlov, *Accelerating Airy beams with particle-like polarization topologies and free-space bimeronic lattices*, Optics letters Optics letters, (2023): 1168-1171.
- [4] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics. Part 1 & 2* (McGraw Hill, New York, 1953).

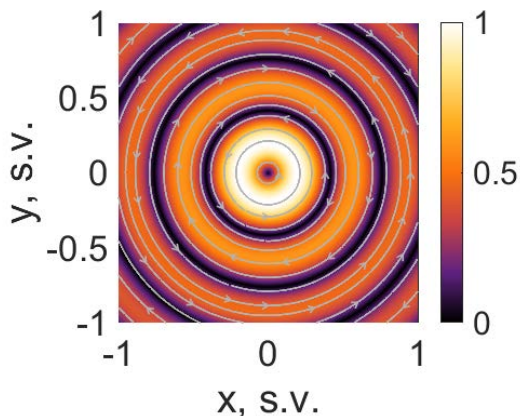
Azimutinės ir radialinės poliarizacijos vektorinių Beselio X impulsų tyrimas

Investigation of Azimuthally and Radially polarized pulsed Bessel-X vortices

Klemensas Laurinavičius¹, Sergejus Orlovas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
klemensas.laurinavicius@ftmc.lt

Invariantiniai bangų paketai pritraukia vis daugiau dėmesio dėl jų unikalių ir naudingų savybių, tokių kaip atsparumas difrakcijai ir dispersijai, pluošto struktūros atsistatymas už kliūtis ir kt. Šios savybės tampa dar įdomesnės nagrinėjant kartu su optiniais sūkuriais, trumpomis impulso trukmėmis, didelėmis galiomis ir nehomogenine poliarizacija. Poliarizacija tampa svarbi, kai naudojamos sistemos su didelėmis skaitinėmis apertūromis (NA). X-bangų modelis [1] yra vienas iš analitinių metodų kuriant sklaidai atsparius impulsinius pluoštus, žinomas dėl savo asimetrinio spektrinio skirstinio, kuris kelia problemų pritaikymui lazerinėse taikymo srityse. Kitas pusiau analitinis modelis tokioms bangoms yra Bessel-X bangų modelis [2, 3], kuris turi simetrinį spektrinį skirstinį ir yra dažnai naudojamas eksperimentuose. Tačiau šis modelis tinkamas tik vidutiniams sklaidimo kampams ir trukmei. Be to, difrakcijai atsparūs pluoštai turi topologinius krūvius, kurie siejami su optiniais sūkuriais, kurie sklinda pluošto centre. Šie sūkuriai yra faziniai singularumai ir gali būti stebimi kaip tamsūs taškai ir matuojami naudojant interferometriją. Didinant skaitinę apertūrą, šie sūkuriai kinta į įvairius poliarizacinius singularumus ir sudėtingesnes topologines struktūras.

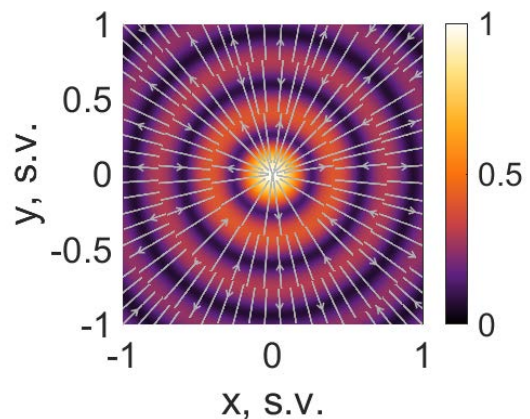


1 pav. Intensyvumo pasiskirstymas azimutinės poliarizacijos Bessel-X atveju. Baltos rodyklės atvaizduoja poliarizacijos kryptį. Topologinis krūvis $m=0$.

Šiame tyrime naudojame analitines išraiškas vektoriniams sūkuriniams Bessel-X pluoštams. Pirmiausia išnagrinėjame tiesines poliarizacijas ir tada pereiname prie nehomogeniškai poliarizuotų vektorinių Bessel-X pluoštų, kurie turi azimutinės (žr. pav. 1) ir radialinės (žr. pav. 2) poliarizacijas.

Mes tiriamo Bessel-X bangų vektorinių savybių

poveikį elektromagnetinės bangos erdviniam profiliui ir impulso trukmei. Be to, mes nagrinėjame Bessel-X bangų plitimo (kūgio) kampo poveikį erdvinei struktūrai ir tiriamo vektorinius Bessel-X impulsus su įvairiais topologiniais krūviais.



2 pav. Intensyvumo pasiskirstymas radialinės poliarizacijos Bessel-X atveju. Baltos rodyklės atvaizduoja poliarizacijos kryptį. Topologinis krūvis $m=0$.

Tiesinės poliarizacijos Bessel-X impulso pagrindinė komponentė turi topologinį singularumą, tuo tarpu radialinės ir azimutinės poliarizacijos Bessel-X sūkuriai ($m=1$) turi topologinių singularumų perėjimą nuo fazinio singularumo į poliarizacinį singularumą. Tiesinės ir radialinės/azimutinės poliarizacijos Bessel-X impulsų vektorinė struktūra keičia FWHM trukmes [4]. Šis efektas tampa ryškesnis, kai situacija tampa neparaksialinė didėjant kūgio kampui θ . Šios priklausomybės dinamika yra sudėtinga ir skirtinga tiesinėms bei radialinėms/azimutinėms poliarizacijoms.

Reikšminiai žodžiai: Azimutinė, radialinė poliarizacija, vektoriniai pluoštai, Bessel-X

Literatūra

- [1] JY. Lu, J. F. Greenleaf. "Nondiffracting X waves-exact solutions to free-space scalar wave equation and their finite aperture realizations." IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control 39.1 (1992): 19-31
- [2] P. Saari, H. Sönajalg. "Pulsed bessel beams." Laser Physics 7.1 (1997): 32-39.
- [3] H. Sönajalg, M. Rätsep, P. Saari. "Demonstration of the Bessel-X pulse propagating with strong lateral and longitudinal localization in a dispersive medium." Optics letters 22.5 (1997): 310-312.
- [4] K. Laurinavičius, S. Orlov, A. Gajauskaitė. "Azimuthally and Radially polarized pulsed Bessel-X vortices." Optik 270 (2022): 169998.

Measurement of continuum spatial spectrum generated in various media

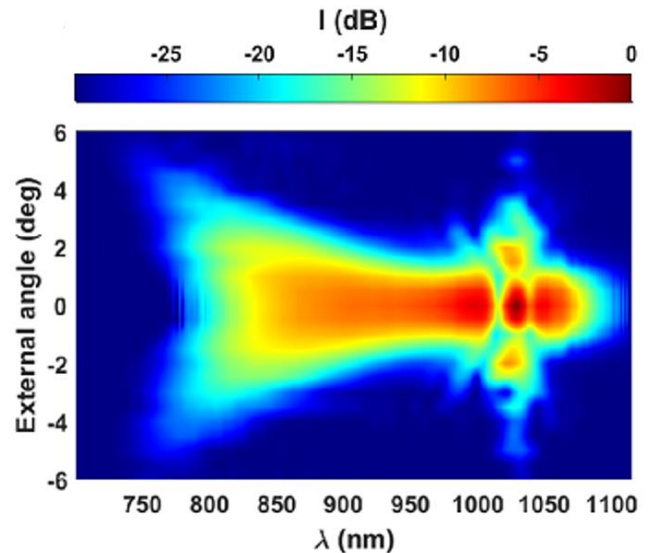
Ieva Baltrukonytė, Jokūbas Pimpė, Miglė Kuliešaitė, Julius Vengelis
 Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
jokubas.pimpe@ff.stud.vu.lt

Kontinuumo generacija yra labai plačiai tiriama reiškinys dėl mokslinio taikymo gausos. Vienas įstabiausių netiesinių reiškinų yra kontinuumo generacija – spinduliuotės spektro ženklus plitimas dėl įvairių netiesinių reiškinų sąveikos. Kontinuumo generacijos netiesinėje terpėje erdvinio spektro matavimai yra vienas iš būdų nagrinėti netiesinius reiškinus, vykstančius šio proceso metu. Tiriant kontinuumo generacijos netiesiniuose kristaluose kampinį intensyvumo pasiskirstymą galime pamatyti ir ištirti reiškinus vykstančius erdvėje: pluošto fokusavimasis, fazės moduliavimasis (SPM) ir daugiafotonė sugertis bei jonizacija [1].

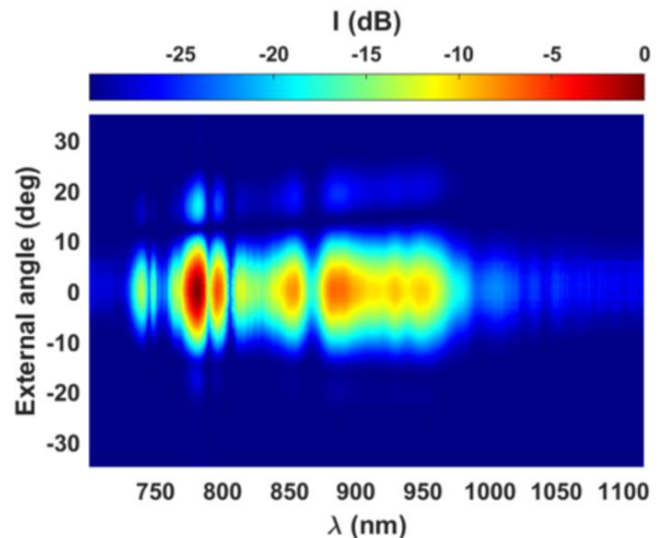
Dar viena populiari terpė kontinuumo generacijai yra fotoninių kristalų šviesolaidžiai. Tai yra šviesolaidžiai turintys šerdyje mikrostruktūrų sritį, kuri tęsiasi per visą šviesolaidžio ilgį [2]. Gamybos metu manipuluojant mikrostruktūrų geometrija galima realizuoti fotoninių kristalų šviesolaidį, kuriame efektyviai pasireikštų netiesiniai efektai. Kontinuumo generacijos erdvinis spektras fotoninių kristalų šviesolaidžiuose leidžia pamatyti, ar yra aukštesnių eilių modų bei spektrinį pasiskirstymą modose.

Pagrindinė darbo užduotis buvo pamatuoti kontinuumo generacijos erdvinis spektras KGW netiesiniame kristale ir fotoninių kristalų šviesolaidyje naudojant dvi skirtingas matavimo technikas: atvaizduojančio monochromatoriaus bei kampu skenuojančio spektrometro. Kontinuumas buvo generuojamas tiesiogiai kaupinant netiesinę terpę su femtosekundiniu Yb:KGW lazeriniu osciliatoriumi, dirbančiu 75,2 MHz pasikartojančiu dažniu bei turinčiu 1028 nm centrinį bangos ilgį. Iš netiesinės terpės išeinantis spektras buvo fokusuojamas į atvaizduojantį monochromatorių arba užfiksuotas mechaniškai kampu besisukančiu mini spektrometru (*Q-mini VIS-LC, Broadcom*).

Atlikus kontinuumo generacijos netiesinėse terpėse erdvinį spektrų matavimus, buvo analizuojami skirtumai bei panašumai tarp gautų rezultatų bei matavimo metodų. Kokybiniai ir kiekybiniai skirtumai tarp dviejų skirtingų matavimo metodų nebuvo pastebėti: netiesiniame KGW kristale kontinuumo generacija buvo pastebėta 750 – 1100 nm, o fotoninių kristalų šviesolaidyje kontinuumo reiškinys buvo stebimas 750 – 1000 nm bangos ilgių diapazone. Konstruojant monochromatorių susidurta su bangos ilgių diapazono apribojimais difrakcinėje gardelėje bei spektro kampų diapazono apribojimais dėl siauro monochromatoriaus išėjimo plyšio bei riboto CCD kameros signalą detektuojančio ploto. Akivaizdūs skirtumai pastebėti tarp skirtingų terpių erdvinį spektrų išplitimo kampų dėl vykstančių skirtingų netiesinių procesų. Taip pat, fotoninių kristalų šviesolaidžio kontinuumo generacijos erdviniam spektre buvo aiškiai matomos aukštesniųjų eilių modos.



1 pav. Kontinuumo generacijos erdvinis spektras netiesiniame KGW kristale pamatuotas skenuojančio spektrometro metodu.



2 pav. Kontinuumo generacijos erdvinis spektras fotoninių kristalų šviesolaidyje pamatuotas skenuojančio spektrometro metodu.

Reikšminiai žodžiai: Kontinuumo generacija, fotoninių kristalų šviesolaidis, netiesinis kristalas, erdvinis spektras.

Literatūra

- [1] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Third Edition (Academic Press, Inc., USA, 2008).
 [2] N. Mahnot, S. Maheshwary, R. Mehra. Photonic crystal fiber-an overview, *Int. J. Eng. Sci. Res.* **6**, 9(2015).

THz pluošto formavimas, taikant metamedžiagomis praturtintus plokščius lęšius.

THz beam engineering using metamaterial enhanced flat lenses

Karolis Redeckas¹, Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė^{1,2}, Vladislavas Čižas¹, Ernestas Nacius¹, Ignas Grigelionis¹, Matas Bernatonis¹, Sergejus Orlovas¹, Gintaras Valušis¹, Linas Minkavičius¹

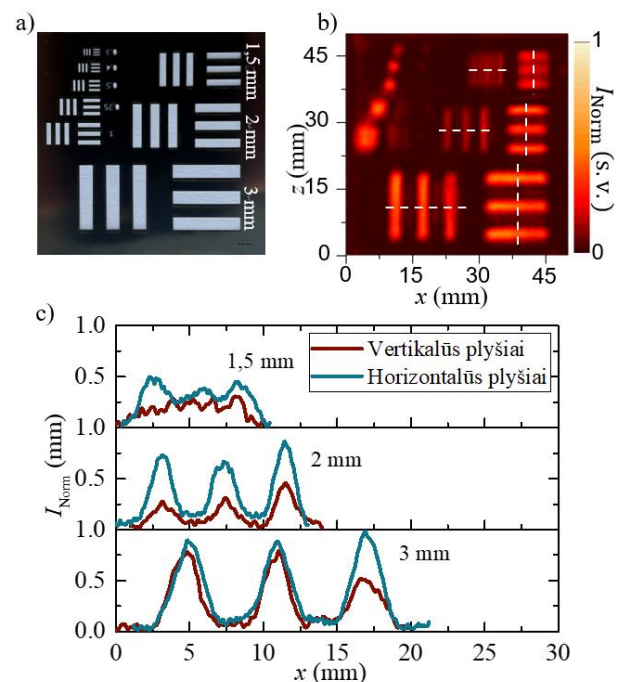
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtelio al. 3, LT-10257 Vilnius
karolis.redeckas@ftmc.lt

Terahercinę (THz) spinduliuotę sudaro nedestruktyvių elektromagnetinių bangų ruožas (0,1 THz- 10 THz) [1], kuriame dalis dielektrinių medžiagų, tokių kaip popierius, guma ar tekstilės, yra optiškai pralaidūs. Ši savybė suteikia patrauklumo THz spinduliuotei, kadangi pastaroji gali būti pritaikyta įvairių medžiagų inspekcijoms, apsaugos sistemoms, maisto kokybės kontrolei ar net bioaudinių tyrimams [2]. Tačiau maža šaltinių galia ir žemas detektorių patikimumas kartu su dideliais reikalingų optinių komponentų matmenimis bei kaina yra svarūs iššūkiai, pristabdantys platų THz vaizdinimo technologijų įdiegimą [3]. Mažų matmenų bei masės plokščiosios optikos (Frenelio lęšiai) taikymas yra vienas iš sprendimų kuriant kompaktines THz vaizdinimo sistemas. Taikant metapaviršių technologiją atveriamos papildomos spinduliuotės manipuliavimo galimybės, kurias įdiegus galima pagerinti THz vaizdinimo sistemos funkcionalumą, bei fiksuojamų vaizdų kokybę.

Šiame darbe pristatomas metapaviršius, išpjautas ant plonos nerūdijančio plieno folijos. Pastaroji struktūra, sudaryta iš invertuotų padalinto žiedo rezonatorių (CSRR) ne tik fokusuoja spinduliuotę, bet ir valdo jos poliarizaciją. Tokiu būdu šis optinis elementas leidžia atlikti poliarizacijai jautrų objektų vaizdinimą.

Fokusuojančio metapaviršiaus dizainas buvo kuriamas kombinuojant Frenelio zoninės plokštelės ir CSRR veikimus. Pastarieji metaatomai, pagal skirtingą fazės vėlinimą geometriškai adaptuoti, periodiškai kartojami keturiuose skirtingose Frenelio zonose. 100 GHz spinduliuotei buvo sukurti keturi skirtingus židinio nuotolius (10mm; 20mm; 30mm; 40mm) turintys metapaviršiai. Šių optinių elementų veikimas buvo įvertintas tiek atliekant skaitinius modeliavimus, paremtus 3D FDTD metodu, tiek eksperimentiškai, pasitelkiant 100 GHz šaltinį- InP Gunn diodo osciliatorių bei peteliškės tipo diodą [4] detekcijai. Pradžioje buvo tiriamos metapaviršių fokusavimo bei poliarizacijos valdymo galimybės. Realizuotas poliarizacijos manipuliavimas, sukant metapaviršiumi praturtintą lęšį aplink jo optinę ašį, leidžia patogiai įgyvendinti objektų vaizdinimą skirtingose poliarizacijose. Šiai užduočiai panaudotas rezoliucijos įvertinimui skirtas metalinis taikynys, sudarytas iš skirtingo dydžio horizontaliai ir vertikaliai nukreiptų išpjovų grupių (1 pav. a). Ant pastarojo metapaviršiumi buvo fokusuojama modifikuojamos poliarizacijos spinduliuotė, kurią pralaidume detektuojant užrašytas jo THz vaizdas (1 pav. b). Pagal šiuos rezultatus matoma, jog vaizdinimo

sistemoje panaudojus metapaviršių, pavyksta išskirti mažesnius objektus, nei bangos ilgis. Be to pasiekama rezoliucijai priklauso nuo šaltinio, detektoriaus poliarizacijų, metapaviršiaus orientacijos, bei nuo taikinio struktūros orientacijos (1 pav. c).



1 pav. THz vaizdinimo rezultatai, naudojant metalęšį. Rezoliucijos įvertinimui skirtas taikynys a), bei jo THz vaizdas b). Brūkšnine linija pažymėtose vietose atliktų pjūvių rezultatai c).

Padėka

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. [S-MIP-22-76].

Literatūra

- [1] T. Nagatsuma, Terahertz technologies: present and future, *IEICE Electronics Express*, 2011, 8, 1127–1142.
- [2] D. M. Mittleman, Twenty years of terahertz imaging [Invited], *Optics Express*, 2018, 26, 9417–9431.
- [3] G. Valušis, A. Lisauskas, H. Yuan, W. Knap, and H. G. Roskos, Roadmap of terahertz imaging 2021, *Sensors*, 2021, 21.
- [4] L. Minkevičius, V. Tamošiūnas, M. Kojelis, E. Žąsinas, V. Bukauskas, A. Šatkus, R. Butkute, I. Kašalynas and G. Valušis, Influence of Field Effects on the Performance of InGaAs-Based Terahertz Radiation Detectors., *J Infrared Milli Terahz Waves* 2017, 38, 689–707.

Nebrangios THz optikos medžiagos: parafino ir polistereno palyginimas

Cost-efficient terahertz optical materials: paraffin and HIPS comparison

Kasparas Stanaitis^{1,2}, Karolis Redekas^{1,2}, Augustė Bielevičiūtė¹, Matas Bernatonis^{1,2} ir Linas Minkevičius¹

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

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

kasparas.stanaitis@ftmc.lt

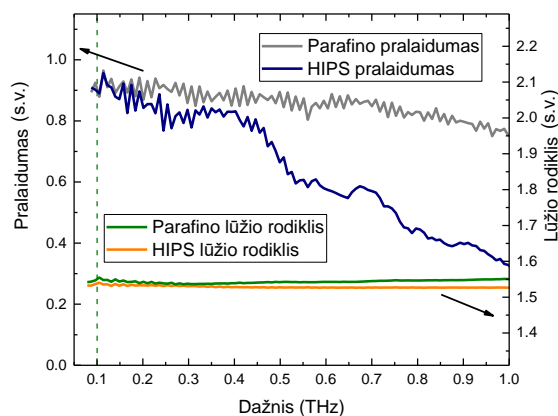
Terahercininė fotonika – perspektyvi ir sparčiai besivystanti optikos sritis, pasižyminti galimybe raiškiai atvaizduoti ir analizuoti objektus. Šiai spinduliotei būdinga geras skvarbumas dielektrikuose ir maža energija [2], todėl THz ruožo bangos neturi jonizuojančio poveikio, ši savybė praverčia saugumo sistemose - THz spinduliuotė vis labiau naudojama oro uostose kaip alternatyva rentgeno sistemoms, tokiu būdu galima išvengti neigiamo poveikio sveikatai. Nenuostabu, kad THz sistemos susiduria su nemažai iššūkių – ši sritis reikalauja aukštos kainos optinių komponentų [1], šaltinių ar detektorių. Būtent brangių ir sunkiai gaminamų lęšių ar veidrodžių problemą yra siekiami išspręsti – pastebėta, jog kasdienės medžiagos, tokios kaip parafinas ar aukšto asparumo polisterolis (HIPS) [3], pasižymi optinėmis savybėmis, kurios tinka THz ruožui skirtiems optiniams komponentams gaminti [1].

Šio tyrimo tikslas – palyginti dvi lengvai prieinamas ir namų sąlygomis apdirbamas medžiagas – parafiną bei HIPS, nustatyti šių medžiagų savybes ir iš jų pagaminti įvairių židinio nuotolių ($f = 2, 3$ ir 4 cm) lęšius, juos charakterizuoti. Lęšiai gaminami 3D spausdinimo technologija – parafino komponentams sukuriama formos, kurios užpildomos lydytu parafinu ir jam leidžiama sustingi, o optiniai komponentai iš HIPS paprasčiausiai atspausdinami.

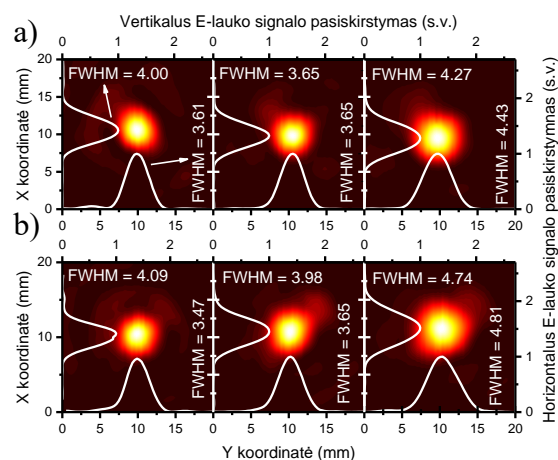
Tyrimo rezultatai lūkesčius atitiko – abiejų tipų lęšiai yra tinkami naudoti THz aplikacijoms. 5 mm storio medžiagų bandiniai buvo išmatuoti laikinės skyros spektroskopijos metodu (angl. Time domain spectroscopy), nustatyta medžiagų pralaidumo ir lūžio rodiklio priklausomybė nuo dažnio. Iš rezultatų [1 pav.] galime matyti, jog abi medžiagos 0,1 THz - 1 THz ruože pasižymi panašiu lūžio rodikliu ir aukštu pralaidumu, bet galime pastebėti, jog parafinas yra pranašesnis aukštesnės dažniams dėl stabilesnio pralaidumo. Pagaminti optiniai komponentai taip pat pasižymi gerais fokusavimo rezultatais – (FWHM svyruoja nuo 3,47 – 4,81 mm) [2 pav.], FWHM – spindulio pjūvio pusplotis, nefokusuotame spindulyje – 28 mm, tai reiškia, jog lęšiai suspaudžia spindulį apie 7 kartus. Sufokusuoti spinduliai iš priekio (xy plokštumoje) yra apskritimo formos, iš šono (xz) – tvarkingi Gauso pluoštai. Pagaminti lęšiai sėkmingai panaudoti terahercinio vaizdinimo sistemoje.

Apibendrinant galima pasakyti, jog tiek parafinas, tiek HIPS yra tinkamos medžiagos pigių optinių elementų gamybai. Iš šių medžiagų žemiems THz dažniams geriau tinka HIPS, nes plastiką lengviau apdirbti – tereikia sukurti 3D modelį ir jį atspausdinti, kuomet parafininius lęšius reikia lieti, taip atsiranda

tikimybė lęšį sugadinti.



1 pav. Parafino ir HIPS pralaidumo ir lūžio rodiklio priklausomybė nuo dažnio



2 pav. HIPS (a) ir Parafino (b) lęšiais fokusuotos spinduliuotės profilio vaizdas. Lęšiai $f=2, 3, 4$ cm iš kairės į dešinę. FWHM matavimo vienetai – mm.

Reikšminiai žodžiai: THz, terahercinis, optika, lęšis, 3D spausdinimas

Literatūra

- [1] A. Siemion et al., Paraffin Diffractive Lens for Subterahertz Range—Simple and Cost Efficient Solution. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, **11**, 4, 396-401 (2021)
- [2] G. Valušis et al., Roadmap of Terahertz Imaging. *Sensors* **21**, 4092 (2021)
- [3] C. H. Brodie et al., Comprehensive study of 3D printing materials over the terahertz regime: absorption coefficient and refractive index characterizations. *Optical Materials Express*, **12**, 9, 3379-3402 (2022)

Subnanosekundinių impulsų kombinuotos parametrinio stiprinimo sistemos optimizavimas

Development and investigation of subnanosecond pulse combined optical parametric amplifier

Augustė Stravinskaitė, Gabrielė Stanionytė, Jonas Banys, Julius Vengelis
Lazerinių tyrimų centras, fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Lietuva
auguste.stravinskaite@ff.stud.vu.lt

Šiais laikais lazeriai tapo nepakeičiamais prietaisais, naudojamais daugelyje taikymo sričių: medžiagų apdirbime, mokslo tyrimuose, spektroskopijoje, statybose, medicinoje, gynyboje ir kitose srityse. Tačiau lazeriai yra spektriškai riboti prietaisai – turi fiksuotą bangos ilgį, kurį yra sudėtinga arba neįmanoma keisti. Tačiau netiesinėje optikoje egzistuoja metodai galintys padėti efektyviai pakeisti lazerių spinduliuotės bangos ilgį. Tam tikslui naudojami parametriniai šviesos generatoriai (OPG) bei parametriniai šviesos stiprintuvai (OPA) leidžiantys tolygiai ir efektyviai reguliuoti spinduliuotės bangos ilgį plačiame spektriniame diapazone. Parametriniai šviesos generatoriai iš kaupinimo bangos leidžia sugeneruoti dvi mažesnio dažnio bangas, tuo tarpu parametriniai šviesos stiprintuvai generuoja skirtuminio dažnio bangą ir taip pat sustiprina užkrato bangą. Dauguma parametrinių šviesos generatorių yra ultratrumpų (mažiau nei 100 ps) ir ilgų (daugiau nei 1 ns) impulsų trukmės, tuo tarpu subnanosekundiniai (daugiau už 100 ps, tačiau mažiau nei 1 ns) parametriniai šviesos generatoriai yra labai sunkiai realizuojami, nes parametrinės generacijos slenkstis yra aukštesnis nei netiesinės terpės pažeidimo slenkstis, o tai reikštų, kad terpė gali būti pažeidžiama anksčiau nei pats įvyksta netiesinis procesas (parametrinis stiprinimas arba generacija) įvyksta. [1-3]. Vienas iš būdų šiam ribojimui apeiti yra užkrato spinduliuotės naudojimas [4, 5], bet dėl subnanosekundinių lazerių veikos ypatumų (ženklus laikinio tirtėjimo efektas pasyvios kokybės moduliacijos veikoje) kaupinimo ir užkrato šaltiniai turi būti to paties lazerio kas komplikuoja efektyvaus ir didelio spektrinio galios tankio užkrato šaltinio realizavimą.

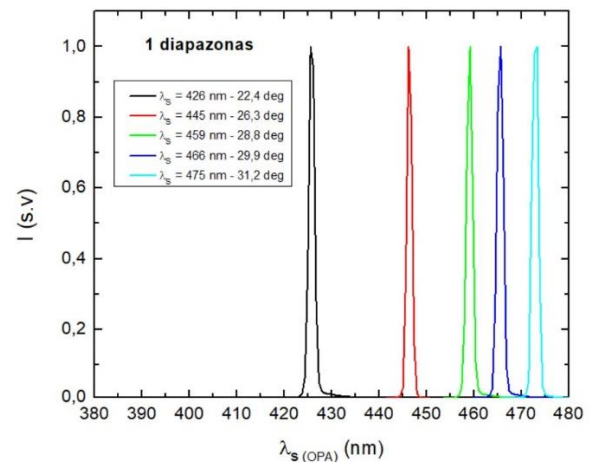
Šio tyrimo tikslas buvo realizuoti ir ištirti subnanosekundinę optinio parametrinio stiprintuvo sistemą, kuri naudoja 15 mm ličio triborato (LBO) kristalą kaip netiesinę terpę ir užkrato spinduliuotę sugeneruotą MgO:PPLN OPG. Kaupinimo banga šioje sistemoje buvo naudojama Nd:YAG MOPA mikrolazerio 3-oji harmonika ($\lambda=354,6$ nm), o užkrato spinduliuotė kuriama to paties Nd:YAG MOPA mikrolazerio 1-ąją harmoniką ($\lambda=1064$ nm) naudojant kaip kaupinimą MgO:PPLN OPG.

Šio darbo metu buvo ištirtos tokios kombinuotos LBO OPA sistemos spektrinės, energinės ir laikinės charakteristikos. MgO:PPLN OPG kristalo gardelių periodai buvo keičiami nuo 27,58 μm iki 31,59 μm , o signalo bangos diapazonas atitinkamai kito nuo 1400 nm iki 2128 nm. LBO kristale signalinės bangos generavimas pasiektas per optinį parametrinį stiprinimą

skirtuminio dažnio bangos (sugeneruotos MgO:PPLN OPG) pagalba. Skirtuminio dažnio bangos diapazonas buvo nuo 425 nm iki 475 nm, kurį riboja užkrato spinduliuotės bangos ilgio keitimo ribos (1400 nm - 2128 nm). Didžiausia pasiekta signalo galia 475 nm bangos ilgio srityje buvo 24,1 mW, kas atitiko maksimalų 37% keitimo efektyvumą. Optinio parametrinio stiprintuvo soties režimas buvo pasiektas su 85 mW kaupinimo galia, kas rodo, kad įrenginys yra optimizuotas dabartinėmis sąlygomis. Be to, matuojant signalo impulso trukmę nustatyta, kad impulsų trukmė buvo subnanosekundinio diapazono ribose: nuo 212 ps iki 432 ps.

Šio tyrimo rezultatai bus naudojami tolesnei efektyvių subnanosekundinių OPG/OPA sistemų plėtrai.

Šis darbas bendrai finansuotas iš Europos regioninės plėtros fondo lėšų (projekto Nr. 01.2.2-LMT-K-718-03-0004) pagal dotacijos sutartį Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).



1 pav. 1 diapazono signalinės bangos spektrai esant skirtingiems LBO kristalo kampams

Literatūra

- [1] M. H. Dunn and M. Ebrahimzadeh, Parametric Generation of Tunable Light from Continuous-Wave to Femtosecond Pulses, *Science* **286**, 1513– 1518 (1999).
- [2] A. Dubietis, *Netiesinė optika*, (Publisher Vilnius University, Vilnius 2011).
- [3] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics* ed. 3 (Academic press, New York 2008).
- [4] G. Stanionytė, E. Vėjalytė, V. Tamulienė, V. Jarutis, J. Vengelis, Subnanosecond widely-tunable in the visible spectrum range LBO based optical parametric amplifier, *Journal of Optics* **24**(4), 045506 (2022).
- [5] G. Stanionytė, V. Tamulienė, R. Grigonis, J. Vengelis, Investigation of a widely-tunable subnanosecond BBO-based optical parametric amplifier, *Lithuanian Journal of Physics* **62**(1), 10-20 (2022).

Plačiajuotis terahercų spinduliuotės filtravimas periodinėje silicio struktūroje

Broadband filtering of terahertz radiation in periodic silicon structure

Viktorija Tamulienė, Ona Balachninaite, Virgilijus Vaičaitis

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

viktorija.tamuliene@ff.vu.lt

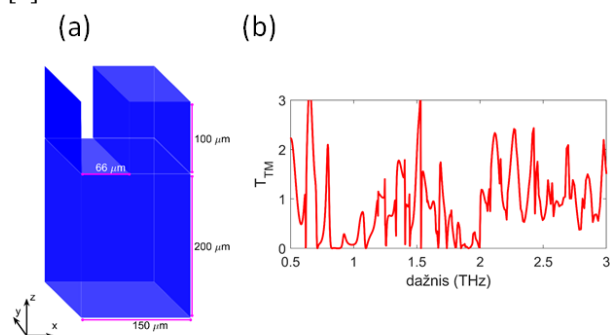
Terahercų spinduliuotė yra elektromagnetinės bangos nuo maždaug 0,1 iki 10 THz dažnio intervale, dar vadinamame „terahercų langu“. Sugeneruoti ir detektuoti šią spinduliuotę vis dar yra iššūkis [1], nes tai yra tarpinė sritis tarp fotonikos ir radio bangų fizikos. Kitas svarbus uždavinys yra terahercų spinduliuotės filtravimas. Šio darbo tikslas yra sukurti silicio paviršiuje periodinę struktūrą, tinkamą terahercų spinduliuotės filtravimui. Pasirinkta silicio medžiaga pasižymi dideliu lūžio rodikliu ($n = 3,41$) lyginant su ja supančio oro lūžio rodikliu, todėl jai netinka bangolaidinio rezonanso modelis (angl. GMR – guided-mode resonance) [2].

Buvo atliktas skaitmeninis modeliavimas pasitelkiant RCWA (angl. rigorous coupling-wave analysis) metodą [3]. Modeliuojant tarta, kad griovelis yra staciakampis, struktūros periodas ir plokštelės storis pastovūs, atitinkamai lygūs 150 μm ir 300 μm . Griovelio gylis buvo keičiamas. Griovelio pavyzdys pavaizduotas 1a pav. Čia gardelė yra periodinė x ašies kryptimi ir pastovi y ašies kryptimi. Spinduliuotė krenta $-z$ ašies kryptimi. TE ir TM poliarizacijos atvejais elektrinis (TE) arba magnetinis (TM) laukas nukreiptas išilgai y ašies. Modeliuojant buvo pastebėta, kad esant įvairiems griovelio gyliams, įmanoma pasiekti plačiajuosį filtravimą ties įvairiais spinduliuotės dažniais. TM poliarizacijos atveju suskaičiuotas pralaidumo spektras, atitinkantis 1a pav. griovelį, pavaizduotas 1b pav. Pralaidumo spektras skaičiuotas kaip santykis šių dviejų spektrų: praėjusios spinduliuotės pro plokštelę su gardele ir be gardelės.

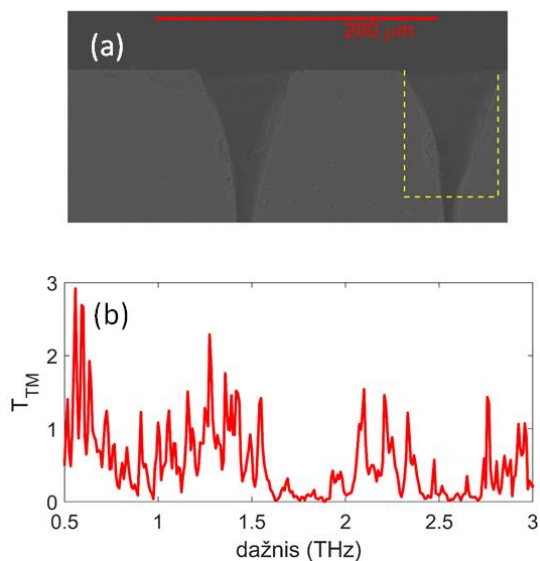
Lazerinės abliacijos būdu buvo suformuota periodinė struktūra silicio plokštelės paviršiuje. Plokštelės storis ir periodinės struktūros periodas buvo tokie patys kaip teorijoje. Struktūros profilis pavaizduotas 2a pav. Terahercų dažnio pluoštas buvo siunčiamas į šią gardelę ir matuojamas išėjimo signalas. Taip pat buvo pamatuotas signalas, praėjęs pro silicio plokštelę be periodinės struktūros. Atlikta šių signalų sparčioji Furjė transformacija bei suskaičiuoti pralaidumo spektrai esant dviem skirtingoms poliarizacijoms, TE ir TM. Teorinis griovelio profilis taip pat pateiktas 2a pav., brūkšninė linija. Eksperimentinis pralaidumo spektras dažnių intervale nuo 0,5 iki 3,0 THz TM poliarizacijos atveju yra pavaizduotas 2b pav.

Teoriniai skaičiavimai ir eksperimentiniai matavimai parodė galimybę filtruoti terahercų spinduliuotę. Esant gardelės periodui 150 μm , o plokštelės storiui 300 μm , ties 2 THz dažniu galima gauti gana plačią, apie 0,2 THz pločio, filtravimo juostą. Šis rezultatas skiriasi nuo to, kas buvo stebėta kitose, mažesnio lūžio rodiklio

medžiagose, kuriose pademonstruotas GMR rezonansas [2].



1 pav. Skaitmeniškai modeliuota struktūra (a) ir sumodeliuotas pralaidumo spektras esant TM poliarizacijai (b).



2 pav. Suformuotos periodinės struktūros silicio plokštelėje profilis (a) ir išmatuotas pralaidumo spektras esant TM poliarizacijai (b).

Reikšminiai žodžiai: terahercų spinduliuotė, filtravimas, silicio plokštelė.

Literatūra

- [1] H. J. Song, T. Nagatsuma, Handbook of terahertz technologies: devices and applications, (1st Edition, Jenny Stanford publishing, New York, 2015).
- [2] H. S. Bark, T.-I. Jeon, Optics Express **26**, 29353 (2018).
- [3] RCWA python bibliotekos dokumentacija internete (tikrinta 2023-09-09): <https://rcwa.readthedocs.io/en/latest/>

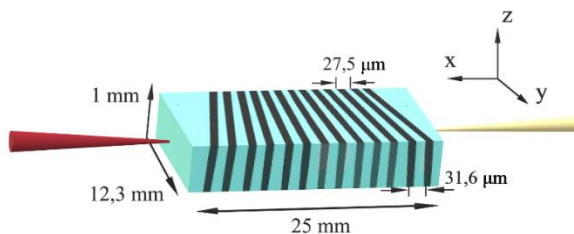
Subnanosekundinių impulsų parametrinio šviesos stiprintuvo su fan-out gardelės dizaino MgO:PPLN kristalu ir kontinuumo užkratu optimizavimas

Optimization of subnanosecond pulse optical parametric amplifier based on fan-out grating design MgO:PPLN crystal and using continuum seed

Simona Armalytė¹, Jonas Banys¹, Julius Vengelis¹

¹ Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius
simona.armalyte@ff.stud.vu.lt

Parametriniai šviesos generatoriai (OPG) bei stiprintuvai (OPA) yra patogūs ir nesudėtingas būdas gauti platų spektro derinimą IR srityje, todėl yra plačiai taikomi tokiose srityse kaip spektroskopija, dujų detektoriai ir pan. [1, 2]. Dalis taikymų reikalauja subnanosekundinių (300 ps – 1 ns) trukmių derinamo dažnio lazerinės spinduliuotės, tačiau būtent tokie parametriniai dažnio keitikliai yra gana mažai realizuoti, nes sunkumų kelia lazerio spinduliuotės sukiamas netiesinės terpės pažeidimų slenkstis (LIDT), kuris, daugumai medžiagų, būna mažesnis nei parametrinės generacijos subnanosekundiniais impulsais slenkstis. Dėl didelio netiesiškumo koeficiento OPG ir OPA dažnai realizuojami su fazinio kvazisinchronizmo medžiagomis – periodiškai poliutuotais kristalais. Šiame darbe naudotas fan-out gardelės dizainas pasižymi tuo, jog gardelės periodai keičiasi tolygiai per visą kristalo ilgį (1 pav.), o tai įgalina gauti tolygų bangos ilgių derinimą vien stumdant kristalą. Toks derinimo būdas yra pranašesnis už temperatūrinį, nes yra paprastesnis ir greitesnis.

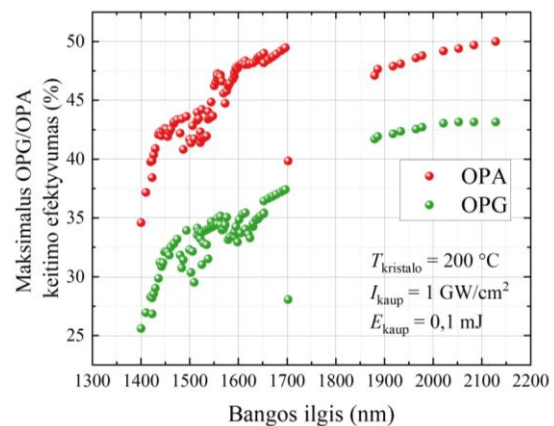


1 pav. Fan-out gardelės dizaino struktūrinis pavaizdavimas

Šio tyrimo tikslas buvo sukonstruoti optinį parametrinį stiprintuvą subnanosekundinio mikrolazerio impulsais kaupinant fan-out gardelės dizaino MgO:PPLN kristalą bei kaip užkratą naudojant kontinuumą, sugeneruotą fotoninių kristalų šviesolaidyje, rasti optimalias kaupinimo sąlygas ir ištirti prietaiso energines bei spektrines charakteristikas. Eksperimente naudotas pasyvio kokybės moduliacijos Nd:YAG MOPA mikrolazeris generuojantis 1064 nm bangos ilgio subnanosekundinius impulsus, kurių vidutinė galia 1 W, impulso trukmė 520 ps, o pasikartojimo dažnis – 1 kHz. Fan-out gardelės dizaino MgO:PPLN kristalu, kurio gardelės periodas keičiasi

tolygiai nuo 27,5 μm iki 31,6 μm galime nesudėtingai, greitai, patikimai ir tolygiai keisti generuojamos spinduliuotės bangos ilgį artimojoje ir vidurinėje IR srityje.

Sukonstravus schemą buvo įvertintas kristalo LIDT ir nustatytos optimalios kaupinimo sąlygos, kai kristalas nebuvo pažeidžiamas bei signalinės bangos energija buvo tinkama praktiniams taikymams. Pasiiektas maksimalus 45% OPG ir 51% OPA keitimo efektyvumas išsigimimo srityje (2 pav.). Nustatyta, jog su tokių gardelių periodų MgO:PPLN fan-out dizaino kristalu ir OPG ir OPA atvejais galime gauti tolygų bangos ilgių derinimą intervale nuo 1420 nm iki 2128 nm (kai kristalo temperatūra 200 °C).



2 pav. Parametrinio šviesos generatoriaus ir stiprintuvo maksimalių keitimo efektyvumų palyginimas

Reikšminiai žodžiai: parametrinė šviesos generacija ir stiprinimas, subnanosekundiniai impulsai, periodiškai poliuoti kristalai.

Literatūra

- [1] G. Baxter, M. Payne, B. Austin, C. Halloway, J. Haub, Y. He, A. Milce, J. Nibler, B. Orr, Spectroscopic diagnostics of chemical processes: Applications of tunable optical parametric oscillators, Appl. Phys. B **71**(5), 651-663 (2000).
- [2] S. Lambert-Girard, M. Allard, M. Piché ir F. Babin, Broadband and tunable optical parametric generator for remote detection of gas molecules in the short and mid-infrared, Appl. Opt. **54**, 2594-2605 (2015).

Dėl vaizdo kokybės įvertinimo neparaksialiniame vieno pikselio teraherciniame vaizdinime

On evaluation of image quality in nonparaxial single-pixel terahertz imaging

Sergejus Orlovas¹, Karolis Mundrys¹, Paulius Kizevičius¹, Linas Minkevičius², Gintaras Valušis²
¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
sergejus.orlovas@ftmc.lt

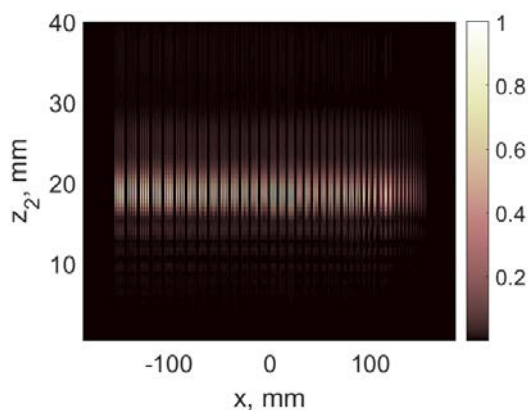
Didelės skaitmeninės apertūros atveju, vieno šūvio vaizdinime atsiranda iškraipymų, dėl kurių kokybiškus vaizdus gauti yra sunku, o kartais gal net neįmanoma. Šias kliūtis galima įveikti naudojant vieno pikselio vaizdinimą, kai įvairios strategijos leidžia su gera skiriamąja geba, kontrastu ir ryškumu matyti objektus.

Naujausi plokščiosios fotonikos pasiekimai leido sukurti kompaktiškas neparaksialines vaizdinimo sistemas, kurios yra ypač perspektyvios THz bangų ilgių diapazone [1], bei sąlygoja pažangą tokiose srityse kaip telekomunikacija, medžiagų kontrolė bei spektroskopija.

Šiame darbe pasineriame į vieno pikselio vaizdinimo problematiką: pristatome bandinio pavyzdį, kurį naudojame dviejų zoninių plokštelių vaizdinimo sistemos skyrai, kontrastui ir ryškumui nustatyti, žr. 1 pav.

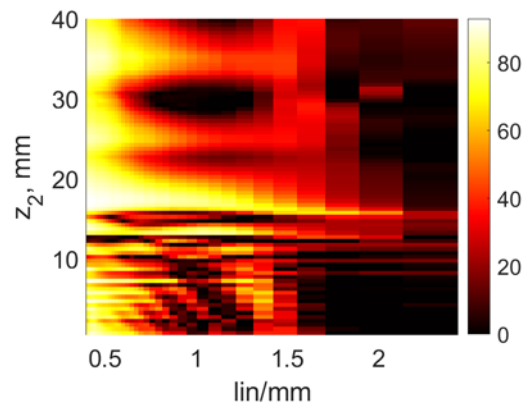


1 pav. Bandinio pavyzdys, naudojamas vaizdinimo sistemos parametrams nustatyti. Bandinyje yra vienodo pločio keturių linijų grupės. Linijų plotis mažėja iš kairės į dešinę. Mastelio juosta skirta tik dydžio įsivertinimui. Pikselių skaičius bandinyje x kryptimi yra 14710, vieno pikselio dydis yra 29.297 mikrometro.



2 pav. Bandinio pjūvių atvaizdavimas esant skirtingoms surenkančio lęšio padėtimis z_2 . Paveikslėlis buvo gautas sujungus centrinius bandinio atvaizdo pjūvius išlaikant bendrą intensyvumą. Galima pastebėti, kad atvaizdo ryškiui mažėjant, pjūvis lieka detalus.

Mes atliekame neparaksialinį šio bandinio vaizdinimą ir parodome, kad geriausio kontrasto ir geriausio ryškio sąlygos neparaksialiniame vieno pikselio vaizdinime yra atsietos viena nuo kitos, žr. 2 pav. Taip pat verta pažymėti, jog vieno pikselio vaizdinime pastebime didesnę kiekį surenkančio lęšio padėčių, kur stebima gera raiška ir kontrastas, žr. 3 pav.



3 pav. Kontrasto priklausomybė nuo surenkančio lęšio padėties. Ši priklausomybė naudojama vaizdinimo sistemos raiškai nustatyti. Skaičiuota 0.6 THz dažniui.

Tikėdamiesi apeiti šią kiek netikėtą kliūtį, mes pasinaudojame dviem integraliais vaizdo kokybės vertinimo metodais iš skaitmeninių vaizdų teorijos [2] ir įvertiname jais vaizdo kokybę virtualiame skaitmeniniame terahercų (THz) vaizdinimo scenarijuje.

Lokalizauto vidutinio kvadratinio nuokrypio metrika papildomai neapriboja gero vaizdo kokybės sąlygų, o globalus vidutinis kvadratinis nuokrypis stipriai apriboja galimų vaizdinimo atstumų diapazoną. Taigi, skaitmeniniai integralūs THz vaizdo kokybės nustatymo metodai patvirtina pagrindinį šio tyrimo teiginį, kad vieno pikselio vaizdo skiriamoji geba yra atsietą nuo vaizdo ryškumo.

Reikšminiai žodžiai: Neparaksialinis vaizdinimas, vieno pikselio vaizdinimas, kontrastas, raiška.

Literatūra

- [1] R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė, et al. Light: science & applications, **326**, 11.1 (2022).
- [2] Smith, Warren J. *Modern optical engineering: the design of optical systems* (McGraw-Hill Education, 2008).

Kvantinių kaskadinių lazerių aktyviosios terpės fotolitografija ir konfigūravimas

Quantum Cascade Laser Active Zone Photolithography and Configuration

Giedrė Čepurnaitė¹, Karolis Stašys¹, Jan Devenson¹

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

giedre.cepurnaite@ftmc.lt

Kvantinis kaskadinis lazeris (KKL) – vienpolis prietaisas, kuriame vyksta optiniai šuoliai tik tarp laidumo lygmens pojuosčių, kurios yra suformuojamos aktyvios zonos kvantiniuose šuliniuose. KKL emisija yra vidurinėsios ir tolimesios infraraudonosios spinduliuotės spektro ruože ir net terachercų diapazone. Potencialiausias KKL taikymas yra aplinkos analizėje. Dauguma cheminių medžiagų turi savo optines žymes šiuose regionuose (2,5 μm – 25 μm) (MIR, angl. *Mid - infrared*), kur yra šių molekulių fundamentinių rotacinės – vibracinės sugerties juostos [1].

Gaminant KKL yra naudojama III – V grupės elementai (Ga, In, Al, As, Sb, Bi) iš kurių yra sudaromi trinariai ar net keturnariai dariniai. Formuojant KKL, svarbu yra suderinti kristalinės gardelės konstantas, nes tai leidžia sumažinti kristalinių defektų. Didelis defektų tankis, lemia aukštą slenkstinės srovės, dėl kurių lazerio našumas blogėja [2].

KKL formavimas prasideda nuo molekulių pluoštelių epitaksijos (MPE) būdu užaugintos kristalinės struktūros. MPE dažniausiai atliekamas ant n – tipo InAs pagrindo, kurio storis siekia 350-500 μm. Šiame tyrime auginama medžiaga – InAs/AlSb. Turint užaugintą plokštelę, sekantis žingsnis yra jo skaldymas. Skraibavimo būdu InAs plokštelė yra padalinama į 2 – 3 cm² bandinius.

Fotolitografijos procesas prasideda nuo riebalų ir dulkių nuvalymo nuo bandinio. Tam yra naudojamas acetonas C₃H₆O ir izopropanolis C₃H₈O bei nusausinimui naudojamas suspaustas azotas N₂. Bandinys yra iškaitinamas, jog išgaruotų drėgmė, o tai padeda pagerinti fotolitografijos procesą ir sumažina defektų tikimybę. Ant bandinio yra užlašinama TiPrime (sukibimą gerinanti medžiaga) bei centrifūgoje bandinys yra išsukamas sukamuojamu metodu (angl. *spin - coating*), bandinys dedamas iškaitinimui.

Bandinys paruoštas ekspozicijai yra užliejamas fotorezistu AZ1518 ir išsukamas centrifūgoje. Fotorezisto eksponavimas per kaukę yra atliekamas naudojant UV šviesą.

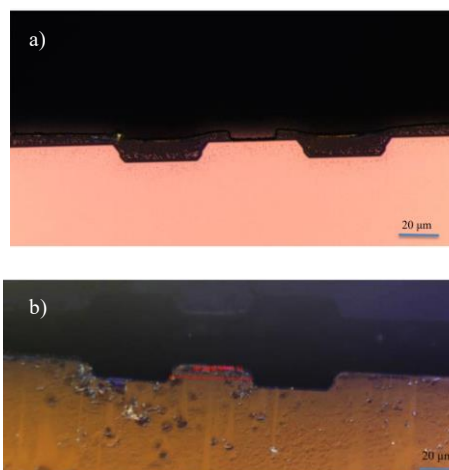
Atlikus ekspoziciją, plokštelė yra paruošta ryškinimui. Fotorezisto ryškiklis AZ351B:H₂O = 1:4. Paskutinis etapas prieš ėsdinimą – užkietinimas (angl. *hardbake*). KKL keteros formavimui yra naudojama 3H₃PO₄:3H₂O:1H₂O – 28 ml ir 50% citrinos rūgštis – 8 ml.

Dielektrinis sluoksnis formuojamas dviem būdais: PECVD metodu nusodinant SiN arba termiškai sukietinant fotorezistą. PECVD būdų yra auginamas SiH₄ dielektrikas, naudojant Ar kaip nešančiąsias dujas. Dielektriko sluoksnio formavimas iš sukietinto fotorezisto yra atliekamas ant bandinio viršaus užlašinant fotorezisto Ti35E, išcentrifūguojamas ir kaitinamas

300°C temperatūroje. Fotorezisto eksponavimas per kaukę yra atliekamas naudojant plačiąjuostę UV šviesą. Ryškinimui naudojamas ryškiklis – AZ351B:H₂O=1:4.

Fotolitografijoje skirtai viršutinei metalizacijai yra naudojama fotorezistas AZ5214, bandinys iškaitinamas bei vyksta eksponavimas su UV šviesa bei eksponavimas AZ351B:H₂O=1:4.

Pav. 1 matome, kad naudojant sukietintą fotorezistą, jo sluoksnis būna gerokai storesnis ir mažiau tolygus, skirtingai nei naudojant kristalinį dielektriką. Sukietintas fotorezistas gali būti naudojamas, kaip dielektrikas esant greitam KKL testavimui, nes technologinis procesas yra greitesnis ir pasiekiamos palyginamos slenkstinės srovės, kaip ir kristalinio dielektriko atveju.



1 pav. Dielektriko sluoksniai: a) sukietintas fotorezistas, b) PECVD metodu, nusodintas SiN_x.

Reikšmingi žodžiai: KKL, fotolitografija, fotorezistas, dielektriko sluoksnis.

[1] <https://www.icc.dur.ac.uk/~tt/Lectures/Galaxies/Images/Infrared/Regions/irregions.html> (tikrinta 2023-08-10);

[2] J. Devenson, InAs/AlSb SHORT WAVELENGTH QUANTUM CASCADE LASERS, 2010;

Nepusiausvirųjų krūvininkų pernašos tyrimas InGaN sluoksniuose su skirtinga In koncentracija

Investigation of Non-Equilibrium Charge Carrier Transport in InGaN Layers Having Different In Content

Lukas Šiaulys

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius
lukas.siaulys@ff.stud.vu.lt

Pagrindinis šio darbo tikslas – ištirti nepusiausvirųjų krūvininkų difuzijos koeficiento ir gyvavimo trukmių priklausomybes nuo skirtingo krūvininkų tankio InGaN sluoksniuose, turinčiuose skirtingą In koncentraciją. Šiam tikslui įgyvendinti buvo pasitelkta šviesa indukuotų dinaminų gardelių (LITG) metodika. Ši metodika yra unikali, nes difuzijos koeficientą ir gyvavimo trukmes galima nustatyti tuo pačiu metu. Taip pat, tai fizinio kontakto su bandiniu nereikalaujantis, nedestruktyvus krūvininkų dinamikos tyrimo metodas.

Dėl itin patrauklių nitridinių puslaidininkų savybių, tokių kaip didelis krūvininkų judris, aukštos pramušimo įtampos, plačios draudžiamosios juostos, jie turi potencialą aukštos galios ir greitos elektronikos, saulės baterijų pritaikymuose. Taip pat, aukštas vidinis kvantinis našumas (nepaisant didelio defektų tankio), tiesiatarpė draustinė juosta leidžia nitridinių puslaidininkų pritaikymą LED apšvietimui bei ekranams, lazeriniams diodams. Trinaris InGaN puslaidininkis – ne išimtis. Varijuojant In kiekį šiame puslaidininkyje, galimas sugerties ir spinduliavimo diapazonas, apimantis sritį nuo UV iki gintarinės šviesos. Visgi, žinoma, jog InGaN prietaisų efektyvumas mažėja prie didesnių bangos ilgių (didinant In kiekį medžiagoje). Ši problema dar žinoma kaip žaliojo tarpo (angl. *green gap*). Tai neleidžia sukurti pilnavertiško RGB LED ekrano, nes žaliai šviesai išgauti naudojama efektyvumą mažinanti fosforinė konversija. Kita problema, susijusi tiek su InGaN, tiek su kitais nitridų šeimos puslaidininkiais, yra kvantinio našumo mažėjimas prie didelio laisvųjų krūvininkų tankio (angl. *efficiency droop*). Tai riboja nitridinių puslaidininkų LED panaudojimą dideliems šviesos srautams.

Suprasti dėl ko kyla šios problemos yra būtini laisvųjų krūvininkų dinamikos tyrimai InGaN sluoksniuose. Šiame darbe tiriami 7 skirtingos In koncentracijos InGaN sluoksniai ir vienas atraminis GaN sluoksniu LITG metodu. Pastebėta, jog ties mažesniais krūvininkų tankiais InGaN sluoksniuose išsauga difuzijos koeficiento vertės, kas nėra pastebima GaN. Šis reiškinys aiškinamas per perkoliacinių kelių susidarymą netvarkiuose sluoksniuose. Tačiau toliau didinant krūvininkų tankį, didėja kuloninė krūvininkų sąveika ir difuzija ima mažėti. Taip pat pastebimas difuzijos išsaugimas ties didžiausiais krūvininkų tankiais tiek GaN, tiek InGaN. GaN atveju tai lemia puslaidininkio išsigimimas, o InGaN tai gali būti sudėtinis puslaidininkio išsigimimo ir krūvininkų delokalizacijos procesas aukštuose sužadiniuose, dėl ko išsauga

krūvininkų judris. Difuzijos priklausomybė nuo In turi mažėjančią tendenciją ties didžiausiais In kiekiais, kas galėtų būti dėl fazių atsiskyrimo per kurį atsiranda sritys su didesniu ir mažesniu In kiekiu.

Gyvavimo trukmės InGaN sluoksniuose bendru atveju mažėja, didėjant In kiekiui. Tai gali būti paaiškinama didesniu defektų tankiu didesniems In kiekiams. Gyvavimo trukmių mažėjimas didinant nepusiausvirųjų krūvininkų tankį aiškinamas per krūvininkų delokalizaciją, kas lemia išsaugusią krūvininkų difuziją į defektus. Tuo tarpu šis mažėjimas ne toks agresyvus tvarkiamame GaN sluoksnyje, galimai dėl mažesnio defektų tankio GaN sluoksniuose.

Taip pat apskaičiuotas krūvininkų difuzijos ilgis visiems bandiniams. InGaN bandiniuose difuzijos ilgis mažėja su krūvininkų tankiu, kas, vėlgi, aiškinama per išsaugusią delokalizaciją, kuri lemia didesnę krūvininkų pernašą į defektus. Tačiau GaN sluoksnyje stebimas difuzijos ilgio didėjimas. Taip yra dėl to, kad GaN gyvavimo trukmės krenta ne taip drastiškai, kaip InGaN sluoksniuose ir difuzijos ilgis labiau nusakomas difuzijos koeficiento augimo nei gyvavimo trukmių mažėjimu.

Reikšminiai žodžiai: InGaN sluoksniai, GaN sluoksniai, nepusiausvirųjų krūvininkų dinamika, difuzija, gyvavimo trukmės, šviesa indukuotos dinaminės gardelės.

Mappings of large area PL emission from InGaAs/GaAs and GaAsBi/GaAs multi-quantum wells for VECSEL fabrication

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

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

²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

andrea.zelioli@ftmc.lt

Nowadays lasers are used in many different fields, and each of them requires a different set of properties. Because of this several types of devices have been developed, such as, solid-state, semiconductor, gas, excimer, and dye lasers.

Vertical-external-cavity surface-emitting lasers (VECSEL) belong to a new family of emitters that were designed to overcome some of the limitations of more conventional designs.

In comparison to both types of electrically pumped vertical-cavity surface-emitting lasers (VCSELs) and laser diodes (LDs), VECSELS are capable to generate high optical power with circular beam quality [1].

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

In this work InGaAs/GaAs and GaAsBi/GaAs multi quantum well structures were grown to evaluate the emission homogeneity that is a key parameter in the fabrication of high output power VECSELS.

The structures were grown using molecular beam epitaxy (MBE) on semi-insulating GaAs substrates.

Two different types of structures were grown, both with InGaAs, in Figure 1 the two structures are shown.

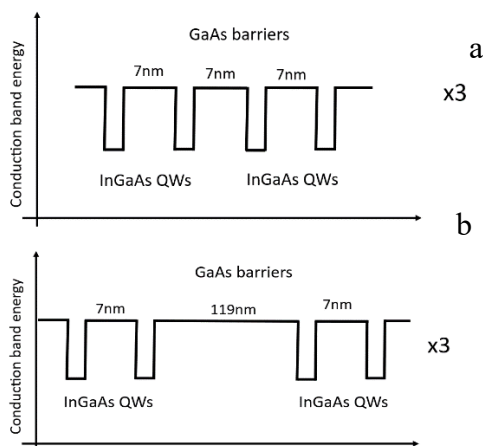


Figure 1 Two types of structure grown with InGaAs/GaAs QW. a) type1 structure, b) type2 structure

The samples were grown with different In content (18-24)% and QW thickness (3.5-7)nm, and the PL emission was mapped after the growth. The PL map of a sample grown with type 1 structure is shown in Figure2. The fabrication of VECSEL structures requires a much higher homogeneity for this reason type 2 structure was designed.

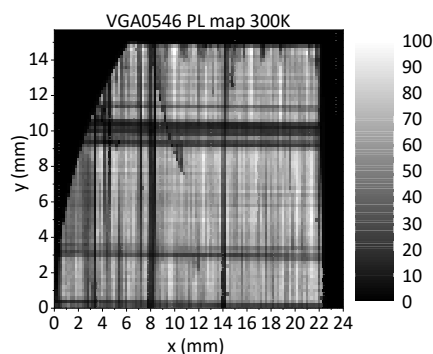


Figure 2 PL Map of a sample grown with structure of type1 shown in Figure 1a

Our results show that this type of structure allows for the growth of QW with high In content, and low dislocation density leading to homogenous emission. This allowed to fabricate VECSELS with an emission wavelength of 975nm.

The second part of the work was focused on the optimization of GaAsBi/GaAs QW for the fabrication of VECSELS with a longer emission wavelengths (1100-1200)nm. The GaAsBi/GaAs structure showed higher homogeneity as shown in Figure 3.

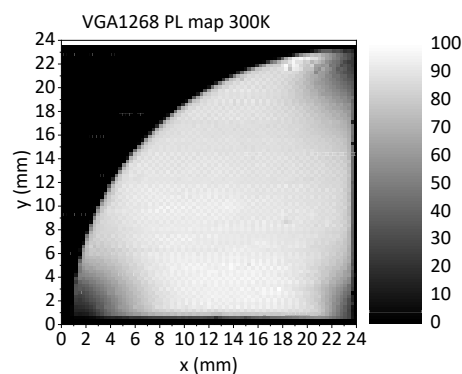


Figure 3 PL Map of a GaAsBi/GaAs structure grown with a type1 like structure

After the growth all structures were investigated by HR-XRD, and the surface roughness was measured by AFM.

References

- [1] Guina, M., A. Rantamäki, and Antti Härkönen. "Optically pumped VECSELS: review of technology and progress." *Journal of Physics D: Applied Physics* 50.38 (2017): 383001.
- [2] Seurin, Jean-Francois, et al. "Progress in high-power high-efficiency VCSEL arrays." *Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers XIII*. Vol. 7229. SPIE, 2009.

GaAsBi stačiakampių kvantinių duobių auginimo technologijos optimizavimas artimosios infraraudonosios srities emiteriams

Optimization of GaAsBi Rectangular Quantum Wells for NIR Emitters

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

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

²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

aivaras.spokas@ftmc.lt

Lazeriniai diodai yra populiariausias lazerių tipas rinkoje. Nors ši sritis ir yra gerai išvystyta, vis dar jaučiamas geros kokybės ir efektyvumo lazerinių diodų, veikiančių artimojoje infraraudonojoje srityje (NIR), trūkumas. Galio arsenidas bismidas yra perspektyvi medžiaga šiam panaudojimui dėl spartaus draustinių energijų tarpo (E_g) mažėjimo (iki 90 meV%). Tai leidžia pasiekti ilgesnes bangas įterpiant mažą kiekį bismuto, ko pasekoje sumažinamas gardelės neatitikimo dislokacijų tankis lyginant su populiaria ir gerai išvystyta NIR medžiaga – indžio galio arsenidu. Taip pat GaAsBi dėl staigaus valentinės juostos krašto energijos didėjimo, didėja ir spin-orbitinio suskilimo energija. Kai bismuto koncentracija yra didesnė nei 10%, spin-orbitinio suskilimo energija viršija E_g , taip užkirsdama vieną iš pagrindinių nespindulinių Ožė rekombinacijos kanalų [1,2]. Galiausiai, daugybinių GaAsBi kvantinių duobių lazeriniai diodai pasižymi stabilumu kambario temperatūroje, todėl jiems nebūtinai šaldymas [3].

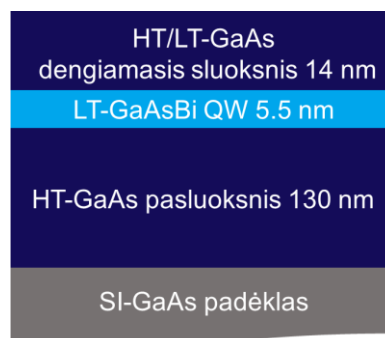
Įterpiant 4-9% bismuto į GaAs gardelę, 5,5 nm kvantinėse duobėse pasiekiamas 1000-1200 nm emisijos intervalas. Būtent šioje srityje yra kai kurių aplinkos dujų (CO_2 , CO, CH_4) vibraciniai dažniai. Todėl bismidiniai lazeriai gali būti naudojami selektyviose dujų detektavimo sistemose. Dar vienas mikrolazerių panaudojimas - kraujo deguonies koncentracijos jutikliai nešiojamuose išmaniesiuose įrenginiuose.

Pagrindinė darbo užduotis – GaAsBi daugybinių stačiakampių kvantinių duobių su GaAs barjeriais, technologinių auginimo parametrų optimizavimas 1000-1200 nm bangų ruožui, pasiekiant pakankamą emisijos intensyvumą būtina lazerinių diodų gamybai. Didžiausias dėmesys buvo skirtas keturioms technologinių parametrų grupėms: (1) bismuto srauto įtakai emisijos intensyvumui ir bangos ilgiui išlaikant pastovius arseno su galiu santykius; (2) bismuto drėkinamojo sluoksnio įtakai galutinei bismuto koncentracijai struktūroje; (3) padėklo temperatūros kalibracija siekiant atsikartojamumo naudojant skirtingus padėklo laikiklius, bei temperatūros įtakos bismuto inkorporacijai įvertinimui, naudojant temperatūrinio draustinių erėgių tarpo kitimo (*band-edge thermometry*, angl.) metodiką; (4) struktūros dengiamojo sluoksnio įtakai emisijos bangos ilgiui.

Darbe pristatomos struktūros buvo auginamos molekulinio pluoštelių epitaksijos sistema (Veeco GENxplor R&D). Ši metodika leidžia tiksliai kontroliuoti auginamų sluoksnių storį bei

kompoziciją/bismuto koncentraciją. Būtent šie parametrai ir yra svarbiausi norint efektyviai keisti medžiagos draustinių energijų tarpą.

Fotoluminescencijos matavimai buvo atliekami siekiant iširti skirtingų auginimo sąlygų įtaką emisijos intensyvumui bei bangos ilgiui. Bandiniai taip pat buvo charakterizuojami *in-situ* didelės energijos elektronų difrakcijos (RHEED) metodika. Ši metodika leidžia patvirtinti GaAsBi kvantinės duobės augimą, dėl junginiui būdingos (2x1) rekonstrukcijos. Kitas RHEED metodikos panaudojimas – padėklo temperatūros įvertinimas pagal GaAs augimo rekonstrukcijas. Darbo metu buvo sėkmingai užaugintos ir atkartotos GaAsBi stačiakampių kvantinių duobių struktūros, kurių emisija buvo stebima intervale nuo 1090 iki 1460 nm, kai arseno su galiu santykis buvo artimas vienetui, o padėklas kaitinamas žemoje epitaksinio augimo temperatūroje (370 °C ir mažiau). Rentgeno spindulių difraktogramos buvo naudojamos bismuto koncentracijos, duobių storio bei duobės/barjero ribos įvertinimui.



1 pav. GaAsBi stačiakampių kvantinių duobių testinės struktūros pavyzdys.

Reikšminiai žodžiai: molekulinio pluoštelių epitaksija, GaAsBi, kvantinės duobės, lazeriniai diodai, fotoluminescencija.

Literatūra

- [1] K. Alberi, O.D.Dubon, W.Walukiewicz, K.M.Yu, K.Bertulis, and A.Krotkus. Appl. Phys. Lett. 91(5):89–92, (2007).
- [2] M. Usman, C.A.Broderick, A.Lindsay, and E.P.O'Reilly. Physical Review B-Condensed Matter and Materials Physics, 84(24):1–13, (2011).
- [3] P. Ludewig, N. Knaub, N. Hossain, S. Reinhard, L. Nattermann et al. Appl. Phys. Lett. 102, 242115 (2013).

Daugybinių GaAsBi kvantinių duobių artimosios infraraudonosios spinduliuotės šviestukas, skirtas integravimui ant silicio padėklo

GaAsBi Based MQW NIR LED for Integration on Silicon Platform

Gustas Petrusėvičius¹, Aivaras Špokas¹, Andrea Zelioli¹, Evelina Dudutienė¹, Augustas Vaitkevičius^{1,2}, Bronislovas Čechavičius¹, Andrius Bičiūnas¹, Sandra Stanionytė¹, Renata Butkutė^{1,2}

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

²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva
gustas.petrusevicius@ftmc.lt

Gallium arsenide (GaAs) is a classical, widespread material, used to manufacture devices such as light emitting diodes (LEDs), laser diodes (LDs) operating in the IR spectral range. A novel way to improve the properties of active light emitting devices is the incorporation of bismuth (Bi) [1], [2]. Bi offers reduction and bandgap stabilization at high temperatures, as well as suppression of Auger recombination.

An industry standard method to grow GaAs based structures is via molecular beam epitaxy (MBE) using GaAs substrates. This work focuses on the development of multiple quantum wells (MQW) GaAsBi/GaAs near infrared (NIR) LED on sacrificial aluminum arsenide (AlAs) layer for integration on Si platform. The latter layer is meant to be removed via wet etching and lift the entire LED structure from the GaAs substrate, which later can be bonded onto a silicon substrate.

In this work the GaAsBi/GaAs MQW LED was grown using MBE technology. The growth of high-temperature (HT) layers took place at 665 °C, while the low-temperature (LT) layers were grown at 435 °C. Firstly, 500 nm of AlAs sacrificial layer was grown. 500 nm was chosen as an optimal thickness, as it provides enough surface area for the wet etchant to react and efficiently remove the layer. Further increasing the thickness of AlAs layer is not optimal as it unnecessarily prolongs the growth duration with diminishing improvements to etching capabilities. The n-GaAs:Si layer (n-type region) was grown at 665 °C, had Si concentration of $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. The first GaAs spacer was grown at high temperature to ensure high quality base to the QW structure grown atop. For QW growth the temperature was dropped to 435 °C to allow for incorporation of Bi. Total of 5 standard rectangular QWs were grown with optimized thicknesses for a 1.1 μm emission spectral range. LT-GaAs spacer was grown on top. Low temperature was selected to avoid potential redistribution of Bi atoms into the barriers induced by the elevation of temperature. Lastly, the p-GaAs:Be (p-type region) was grown on top with Be concentration of $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ at 550 °C. Such temperature was chosen due to high diffusivity of Be atoms. Greater temperature may induce Be accumulation sites and thus general dopant inhomogeneity in the region.

The LED structure was characterized via x-ray diffraction (XRD), atomic force microscopy (AFM), and electroluminescence measurements (EL). To carry out

the room temperature electroluminescence measurements, the structure was wet etched in order to expose its' n-type region and allow for application of indium (In) contacts. The complete structure after etching and contact application is seen in Figure 1.

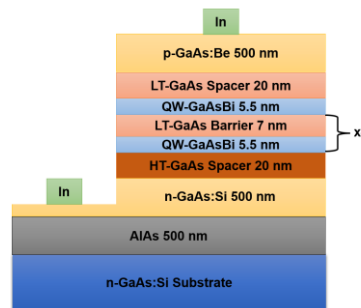


Figure 1. GaAsBi/GaAs MQWbased LED structure, processed for electroluminescence measurements.

The electroluminescence results, demonstrating the central spectral wavelength at 1.15 eV (corresponds to 1078 nm), are depicted in Figure 2.

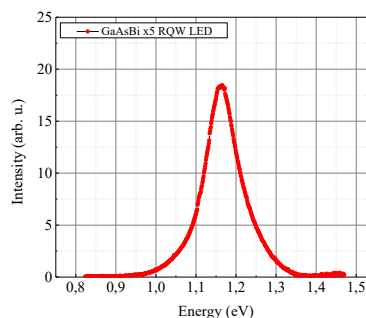


Figure 2. EL spectrum of GaAsBi/GaAs MQW LED measured at room temperature.

Keywords: LED, GaAsBi, MBE, sacrificial layer, Si, GaAs, electroluminescence.

Literature

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

p-tipo GaN auginimas MOVPE būdu naudojant indžio surfaktantą

The growth of p-type GaN by MOVPE using indium surfactant

K. German, M. Vaičiulis, K. Nomeika, Y. Talochka, and A. Kadys

Vilniaus Universitetas, Fizikos Fakultetas, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius
karolina.german@ff.stud.vu.lt

Pirmą kartą p-tipo GaN pademonstravo H. Amano ir jo kolegos [1] paveikę kristalą žemos energijos elektronų spinduliu. Bet esminis III grupės nitridų proveržis puslaidininkų pramonėje įvyko po p-tipo laidumo GaN auginimo technologijos sukūrimo naudojant epitaksijos iš metalo-organinių garų fazės (MOVPE) auginimo technologiją kartu su kristalo terminio pakaitinimo procesu, magnio (Mg) - p-tipo priemaišos pasyvacijos vandeniliu panaikinimui [2]. Bet nemažas azoto vakansijų kiekis GaN užaugintame MOVPE būdu kompensuoja p-tipą Mg legiruotame GaN. Be to, Mg priemaišos jonizacijos energija yra apie 200 meV, kambario temperatūroje yra jonizuota tik apie 10% Mg priemaišų. Nepaisant to, kad p-tipo GaN komerciškai yra ypatingai svarbus, per pastaruosius kelis dešimtmečius vykusių gausybę tyrimų ir bandymų tobulinti auginimo procesus, iki šiol yra labai daug vis dar nelabai suprantamų aspektų, susijusių su p-tipo nitriduose optimizavimu.

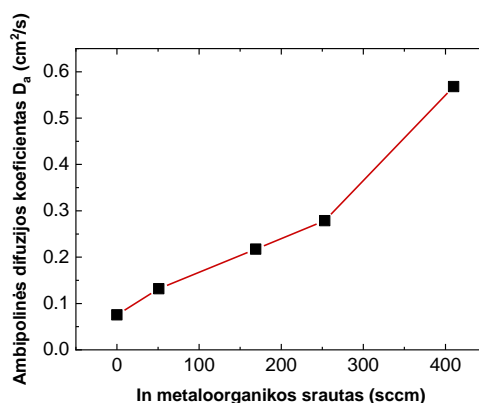
III-grupės nitridų kristalų auginimo technologijoje indis (In) gali būti ne tik kaip vienas iš galimų kristalo cheminės sudėties elementų, bet ir kaip surfaktantas. Yra parodyta, kad auginant GaN žemesnėse temperatūrose molekulinio pluoštelio epitaksijos būdu (MBE) In pagerina GaN paviršiaus morfologiją, mažina gilių lygmenų koncentraciją, didina liuminescencijos efektyvumą ir siaurina spektro pagrindinio piko plotį, ilgina krūvininkų gyvavimo laiką ir gerina skylinį laidumą. Galima tikėtis to paties ir naudojant MOVPE technologiją, GaN auginant vandenilio atmosferoje.

Šiame darbe pateikiame Mg legiruotų GaN epitaksijos monokristalinių sluoksnių auginimo ant GaN/safyro ruošinių MOVPE būdu rezultatus. Technologinių eksperimentų parametrai susieti su struktūrinėmis sluoksnių savybėmis bei nepusiausvirųjų krūvininkų dinamika.

p-tipo GaN 0,18÷0,21 μm storio sluoksnius auginome 950÷890 C⁰ temperatūrų intervale vandenilio atmosferoje esant skirtingiems Mg metaloorganikos (Cp₂Mg) srautams (5,787×10⁻⁷÷1,157×10⁻⁶ mol/min), iš kurių dalį sluoksnių užauginame papildomai į reaktorių tiekdami In metaloorganiką kaip In šaltinį. Visi bandiniai papildomai buvo pakaitinti azoto atmosferoje 850 C⁰ temperatūroje 1200 s Mg priemaišos pasyvacijos efektui neutralizuoti. Rentgeno spindulių difrakcijos eksperimentai parodė, kad mūsų naudojamame auginimo temperatūrų intervale vandenilio atmosferoje žymesnė In koncentracija p-tipo GaN sluoksniuose nefiksotina (<<1 % In GaN kristale).

Nepusiausvirųjų krūvininkų dinamiką tyrėme bekontaktiniu dinaminio difrakcinių gardelių žadinimo-zondavimo metodu (LITG) naudodami Light Conversion įmonėje pagamintą matavimo sistemą TG-Harpia, susietą su 30kHz dažnio ir 250 fs trukmės šviesos impulsus generuojančiu lazeriu Pharos (žadinimo šviesos bangos ilgis 355 nm, zondavimo 1030 nm). Rezultatų analizę ir jų interpretaciją papildėme skaitmeninio modeliavimo rezultatais. Naudodami šį metodą ir papildomus skaičiavimus nustatėme p-tipo GaN sluoksniuose nepusiausvirųjų krūvininkų gyvavimo trukmę, difuzijos koeficientą, difuzijos kelio ilgį, ir nepagrindinių krūvininkų - tamsinę skylių koncentraciją.

Apibendrinę technologinių ir fizikinių eksperimentų rezultatus mes parodome, kad naudodami In surfaktantą p-tipo GaN sluoksnio auginimo metu galime padidinti tamsinę skylių koncentraciją keletą kartų, šiuo atveju nuo 4,5×10¹⁶ cm⁻³ iki 1,2×10¹⁷ cm⁻³. Stipriai padidėjusi ambipolinės difuzijos koeficiento vertė (1 pav.) rodo, kad krūvininkų judris taip pat išauga. Krūvininkų gyvavimo laikas padidėja nuo 0,17 ns iki 0,22 ns. Tokiu būdu krūvininkų difuzijos nuotolis p-tipo GaN sluoksnyje padidėja net 4 kartus, jeigu sluoksnio auginimo metu yra naudojamas In surfaktantas.



1 pav. Ambipolinės difuzijos koeficiento vertės priklausomybė nuo In metaloorganikos srauto reaktoriuje p-tipo GaN sluoksnio auginimo metu.

Reikšminiai žodžiai: MOVPE, GaN, p-tipas, dinaminės difrakcinės gardelės, krūvininkų dinamika.

Literatūra

- [1] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, and I. Akasaki, Jpn. J. Appl. Phys. 28, L2112 (1989).
 [2] S. Nakamura, N. Iwasa, M. Senoh, and T. Mukai, Jpn. J. Appl. Phys., 31, 1258 (1992).

Ceriu legiruotų daugiakomponenčių granato tipo scintiliatorių, kurių sudėtyje yra skirtingi retųjų žemių elementų jonai, optinės savybės

Optical properties of Ce-doped multicomponent garnet-type scintillators containing different rare earth ions

Mikas Iršėnas¹, Augustas Vaitkevičius¹, Saulius Nargelas, V. Gorbenko², Yu. Zorenko², Gintautas Tamulaitis¹

¹Vilnius University, Institute of Photonics and Nanotechnology, Saulėtekio al. 3 Vilnius

²Department of Physics of Kazimierz Wielki University in Bydgoszcz, Powstańców Wielkopolskich str., 2, 85-090 Bydgoszcz, Poland
mikas.irsenas@ff.stud.vu.lt

The applicability of scintillators for the detectors of ionizing radiation depends predominantly on their light yield, scintillation decay time, afterglow, radiation tolerance, and energy resolution. Cerium-doped multicomponent garnet structure scintillators show a high light yield and a strong resistance to ionizing radiation. These features enable their application in high-energy physics experiments, medical imaging, and other applications. However, these crystals are prone to the formation of substitution-type defects degrading their scintillation response time parameters that is important for the application of these scintillators in ionizing radiation detectors. A solution to this problem is growing the scintillators by liquid-phase epitaxy (LPE) favourable for diminishing the density of the defects due to a lower growth temperature. The aim of this study is to investigate the influence of composition on the optical properties of scintillators grown by LPE.

Four samples of cerium-doped multicomponent garnet structure scintillators grown on an undoped YAG substrate were investigated: lutetium aluminum garnet ($\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$), yttrium aluminum garnet ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$), terbium aluminum garnet ($\text{Tb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$), and gadolinium-lutetium aluminum garnet ($\text{Gd}_{2.5}\text{Lu}_{0.5}\text{AG}:\text{Ce}$). All the layers were $\sim 22 \mu\text{m}$ thick.

The experimental setup used to study the optical properties of consists of a WITec alpha300 S scanning confocal microscope equipped with 0.55 numerical aperture objective. The photoluminescence was excited using a Kimmon Koha continuous wave He-Cd gas laser IK5451RE operating at 442 nm with a TEM_{00} transverse mode. The signal was recorded using a WITec spectrometer UHTS 300 with photodetector with thermoelectric cooling at -70°C . All measurements were performed at room temperature.

The analysis of the measurement results showed that YAG:Ce garnet has the highest photoluminescence intensity, whereas GdAG:Ce has the lowest intensity (see Fig. 1). The photoluminescence spectrum is most redshifted in GdAG: Ce, whereas $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$ exhibits the most blueshifted photoluminescence.

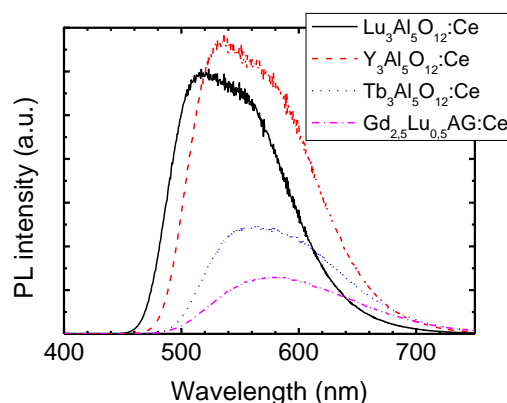


Fig. 1: Photoluminescence spectra of scintillating layers with different compositions (indicated)

The spatial distributions of different photoluminescence parameters (integrated intensity, mean wavelength, FWHM) were also measured and evidenced substantial differences in the layers of different compositions. These results are interpreted by the difference in ionic radius of Lu^{3+} , Y^{3+} , Tb^{3+} and Gd^{3+} ions in the scintillator matrix and the interaction of the lattice-building atoms with activator ions Ce^{3+} , as well as by the structural inhomogeneities in the layers occurring in the growth process.

Keywords: scintillators, confocal microscopy, yttrium aluminium garnet, lutetium aluminium garnet, terbium aluminium garnet, gadolinium-lutetium aluminium garnet, cerium.

Energijos perdavimo procesai iterbiu legiruotuose cezio švino halidų perovskituose

Energy transfer processes in lead halide perovskites doped with ytterbium

Simona Streckaitė¹, Lukas Miklušis¹, Karolina Maleckaitė¹, Lamiaa Abdelrazik¹, Vidmantas Jašinskas¹, Vidas Pakštas¹, Audrius Drabavičius¹, Danielis Rutkauskas¹, Artūras, Katelnikovas, Marius Franckevičius¹, Vidmantas Gulbinas¹

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

²Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius

simona.streckaite@ftmc.lt

Perovskitai tapo gerai žinomi dėl jų taikymo efektyviuose saulės elementuose (SC). Didžiulė perovskito tipo junginių, pasižyminčių įvairiomis fizinėmis ir optoelektroninėmis savybėmis, įvairovė leidžia juos pritaikyti ir kituose prietaisuose. Charakteristikos, tokios kaip fotoluminescencijos kvantinė išeiga (PLQY), sugertis ir emisija, defektinių būsenų tankis ir kt., gali būti keičiamos arba sukuriamos, į švino halidų perovskitus (LHP) įterpiant metalo arba lantanoido (Ln) priemaišų. Dėl šviesos konversijos žemyn perovskitai, fluorescuojantys matomos (VIS) šviesos diapazone, gali perduoti savo energiją priemaišoms, turinčioms mažesnę draustinę energijos tarpą. Dėl kvantinio skaidymo reiškinio, tokių Ln legiruotų sistemų PLQY gali viršyti vienetą, nes vienas didelės energijos fotonas gali virsti dviem mažos energijos fotonais [1-3]. Tai ypač įdomu fotovoltinėms technologijoms, nes gali padėti padidinti SC efektyvumą virš Shockley-Queisser ribos.

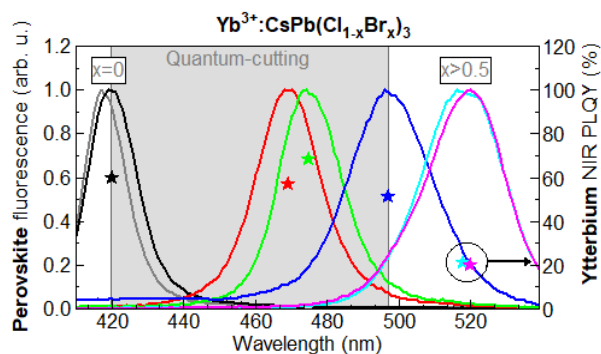
Įprastas SC efektyviai paverčia elektra tik ilgabangę šviesą, kurios fotonų energija yra artima puslaidininkio energijos juostos tarpui. Tuo tarpu tik mažiau nei pusė ultravioletinių, mėlynujų ir iš dalies žaliųjų fotonų energijos yra paverčiama elektros energija. Perovskitai stipriai sugeria trumpo bangos ilgio fotonus lengvai derinamame sugerties spektriniame diapazone, o Ln iterbis pasižymi liuminescencija artimojoje infraraudonojoje (NIR) srityje ties maždaug 1000 nm. Tokia emisija yra optimali silicio (Si) saulės elementams.

Nepaisant daugybės Ln legiravimo metodų LHP ir jų pritaikymo optoelektronikoje, šių medžiagų fotofizikinės savybės vis dar menkai suprantamos. Pavyzdžiui, diskutuojama, ar Yb^{3+} priemaišos sukelia defektų būsenas perovskite, per kurias eksitoninė energija perduodama dviem priemaišų jonams [2], ar ji perduodama tiesiogiai kvantinio skaidymo proceso metu [3]. Taigi išsamus energijos perdavimo iš perovskito į lantanoido priemaišas mechanizmas ir jį ribojantys veiksniai dar nėra paaiškinti, nepaisant lemiamo vaidmens legiruotų medžiagų inžinerijoje ir optoelektronikos prietaisų optimizavime.

Šiame darbe kvantinio skaidymo reiškinys Yb^{3+} legiruotuose $\text{CsPb}(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_3$ sluoksniuose ir milteliuose buvo iširtas derinant fluorescencijos mikroskopiją, VIS-NIR stacionariosios ir laikinės fotoluminescencijos, žadinimo-zondavimo bei fotoelektronų kameros spektroskopijos metodus. NIR emisijos išnykimas legiruotiems perovskitams, kurių eksitoninė emisija viršija 500 nm, patvirtina mūsų bandiniuose vykstantį

kvantinio skaidymo reiškinį (1 pav.). Remdamiesi eksperimentų rezultatais, manome, kad kvantinis skaidymas vyksta pernešant elektronus ir skyles bei siūlome perdavimo procesų schemą. Ištyrus NIR liuminescencijos dinamikos priklausomybę nuo Yb^{3+} koncentracijos, aptikti dviejų rūšių Yb^{3+} jonai: pavieniai jonai, kurių liuminescencijos trukmė yra apie 0,15 ms, o kvantinė išeiga maža, bei dimeriniai kompleksai, kurių gyvavimo trukmė yra apie 1,5 ms, o liuminescencijos išeiga beveik 100 %.

Ištyrėme kelis kvantinio skaidymo efektyvumą ribojančius veiksnius: a) neefektyvų eksitono energijos perdavimą iš perovskito į iterbį, b) energijos perdavimą paviniams iterbio jonams, c) neefektyvią iterbio jonų liuminescenciją, d) iterbio liuminescencijos gesinimą priemaišomis ir (arba) defektais. Nustatėme, kad neefektyvus energijos perdavimas ir energijos perdavimas į atskirus iterbio jonus yra pagrindiniai ribojantys veiksniai.



1 pav. Eksitoninės perovskito emisijos spektrai VIS srityje su atitinkamu iterbio priemaišų NIR PLQY (žvaigždės). Kvantinis skaidymas vyksta tik pilkai pažymėtoje spektro srityje. $\lambda_{exc} = 375$ nm.

Reikšminiai žodžiai: perovskitas, iterbis, legiravimas iterbiu, kvantinis skaidymas, energijos pernaša.

Literatūra

- [1] T. J. Milstein, et al., *Nano Lett.* **18**, 3792 (2018).
- [2] D. M. Kroupa, et al., *ACS Energy Lett.* **3**, 2390 (2018).
- [3] A. Ishii & T. Miyasaka, *JCP* **153**, 194704 (2020).

Padėka

Mokslinis tyrimas finansuojamas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“ (sutarties Nr. S-PD-22-4).

Katodoluminescencija nitridiniuose junginiuose esančių defektų aplinkoje

Cathodoluminescence at the vicinity of III-nitride defects

Viktorija Mickūnaitė¹, Mantas Migauskas¹, Žydrūnas Podlipskas¹

¹Vilniaus universitetas, ²Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
viktorija.mickunaite@ff.stud.vu.lt

III grupės nitridai dėl savo išskirtinių elektrinių ir optinių savybių, potencialo aprėpti visą regimosios šviesos diapazoną yra išsamiai tiriami siekiant plėsti jų pritaikymo galimybes bei nustatyti kvantinį našumą ribojančias priežastis, dėl kurių prastėja junginių veika.

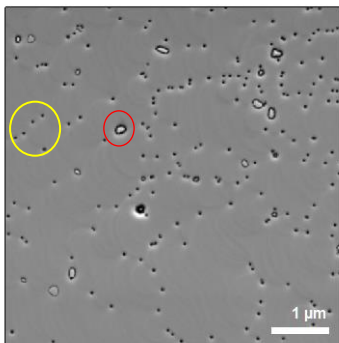
Didelę reikšmę III grupės nitriduose turi juose pasireiškiantys defektai: plokštuminiai pakavimo defektai, dislokacijos, taškiniai defektai. Dėl šių defektų kinta bandinių optinės ir elektrinės savybės, paviršiaus morfologija, prastėja bandinių kokybė.

Darbo metu pasinaudojant hibridine skenuojančio elektronų mikroskopo bei katodoluminescencijos spektroskopijos metodika iširti skirtingi III grupės nitridų bandiniai, nustatytos būdingos liuminescencijos tendencijos defektų aplinkoje bei įvertinta koreliacija tarp bangos ilgio ties intensyvumo maksimumu ir katodoluminescencijos intensyvumu.

Atlikus skirtingų AlGa_{0.3}In_{0.7}N, InGa_{0.5}N, GaN bandinių analizę pastebėta, jog katodoluminescencijos intensyvumas ženkliai krenta ties dislokacijomis. Tai patvirtina, jog dislokacijos sparčiai išauga nespindulinės rekombinacijos tikimybė. Taip pat aplink dislokacijas pasireiškia dipolinio energijos poslinkio efektas [1] (liuminescencijos bangos ilgio poslinkis į mėlynąją ir raudonąją sritis), siejamas su skirtingų deformacijos sričių susidarymu bei atomų persiskirstymu šiose srityse.

Bangos ilgio poslinkiai stebimi ir makro defektų („laiptelių-terasų“ struktūrų) aplinkoje. Čia jie pasireiškia dėl skirtingos III grupės atomų augimo spartos skirtingos orientacijos kryptimis, sąlygojančios nevienodą atomų pasiskirstymą puslaidininkyje [2,3].

Išskirtinai InGa_{0.5}N pasireiškiančiuose V-tipo bei kilpiniuose defektuose (1 pav.) stebimas raudonasis liuminescencijos poslinkis. Šis efektas gali būti siejamas su didesne In koncentracija bei platesnių kvantinių duobių (QW) susidarymu [4] – mažesniu draustiniu energijų tarpu – minėtuose defektuose.



1 pav. InGa_{0.5}N SEM nuotraukoje stebimi defektai: geltonu apskritimu pažymėti V-tipo defektai, raudonu - kilpinis defektas.

Koreliaciją tarp atskirų sričių spinduliuojamo bangos ilgio bei intensyvumo stipriai veikia šių defektų sukelti lokalūs spinduliuotės spektro pokyčiai, kurie ir lemia koreliacijos stiprį tirtuose bandiniuose. Bandiniuose su dideliu taškinių defektų kiekiu, kurie gali veikti tiek kaip spindulinės, tiek nespindulinės rekombinacijos centrai, koreliacija tampa labai silpna arba neegzistuojanti. Šie defektai taip pat stipriai keičia ir bendrą bandinio spektrą, dėl ko tokių junginių spektrinės charakteristikos tampa sunkiau nuspėjamos.

Reikšminiai žodžiai: nitridai, puslaidininkiai, katodoluminescencija, defektai.

Literatūra

- [1] Massabuau, F. et al. (2018a) Alloy fluctuations at dislocations in III-nitrides: identification and impact on optical properties
- [2] Mickevičius, J. et al. (2023a) “Dynamics of double-peak photoluminescence in m-plane InGa_{0.5}N/GaN MQWs,” Journal of Luminescence, 257, p. 119732
- [3] Hou, M. et al. (2017a) “Excitonic localization at macrostep edges in AlGa_{0.3}N/AlGa_{0.3}N multiple quantum wells,” Superlattices and Microstructures, 104, pp. 397–401
- [4] Bruckbauer, J. et al. (2014a) “Cathodoluminescence hyperspectral imaging of trenchlike defects in InGa_{0.5}N/GaN quantum well structures,” Researchgate, 47(13), p. 135107

Poliarizacijai jautri rezonansinė terahercų emisija iš n tipo GaAs/GaAs struktūrų su metaliniais metapaviršiais

Polarization Resolved Resonant Terahertz Emission from n-GaAs/GaAs Structures with Metallic Metasurfaces

Barbora Škėlaitė^{1,2}, Vladislovas Čižas¹, Kęstutis Ikamas³, Vytautas Jakštas⁴, Domas Jokubauskis¹, Andrius Bičiūnas¹, Andrzej Urbanowicz¹, Marius Treideris⁴, Renata Butkutė¹, Linas Minkevičius¹ ir Ignas Grigelionis¹

¹Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

²Vilniaus Universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

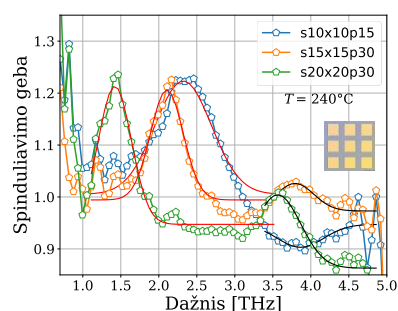
³Vilniaus Universitetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

⁴Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Fizikinių technologijų skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva
barbora.skelaite@ff.stud.vu.lt

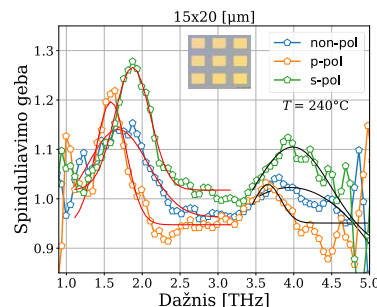
Sparčiai augantis terahercų technologijos taikymo poreikis reikalauja efektyvių, kompaktiškų ir lengvai valdomų kietojo kūno šaltinių [1]. Plačiai žinomi prietaisai (kvantiniai-kaskadiniai lazeriai, plazmoniniai šaltiniai, fotolaidžios antenos) reikalauja arba sudėtingos gamybos technologijos, arba papildomų didelių matmenų ir brangių elementų [2]. Patrauklia alternatyva šioje vietoje gali tapti kompaktiški šiluminiai šaltiniai, kurie yra nesunkiai pagaminami ir nereikalauja didelių ir brangių papildomų įrenginių [3]. Ant šiluminių šaltinių suformuoti metaliniai metapaviršiai leidžia keisti siaurų spinduliuotės linijų dažnį, kurių rezonanso kokybė kambario ir aukštesnėse temperatūrose nenusileidžia 2DEG plazmoninių prietaisų spinduliuotės rezonanso kokybei skysto helio ar azoto temperatūroje [4]. Šiame darbe eksperimentiškai tiriama terahercų spinduliuotė iš šiluminių šaltinių, pagamintų iš n-GaAs/GaAs struktūros su metaliniu metapaviršiumi, suformuotu iš periodinių kvadrato ar stačiakampio formos metaatomų.

Gauti emisijos spektrai kvadrato formos metaatomų (1 pav.) atveju turi rezonansinį pagrindinės harmonikos dažnį ties 2,32 THz, kai kvadrato kraštinės (d) ilgis 10 μm ; 2,11 THz, kai $d = 15 \mu\text{m}$ ir 1,42 THz, kai $d = 20 \mu\text{m}$. Taip pat ties 3,79 THz ir 3,57 THz matomos 3-iosos harmonikos smailės atitinkamai esant 15 μm ir 20 μm ilgio kraštinėms. Tuo tarpu stačiakampio formos metapaviršiumi padengtų šiluminių šaltinių emisijos spektrai (2 pav.) skiriasi esant skirtingoms terahercinių bangų poliarizacijoms. Nepoliarizuotų bangų atveju pagrindinės harmonikos emisijos smailė yra ties 1,68 THz, s-poliarizacijos atveju 1,87 THz ir ties 1,59 THz p-poliarizacijos atveju. Taip pat matomos 3-iosos harmonikos amplitudės nepoliarizuotai, s-poliarizacijos ir p-poliarizacijos elektromagnetinei spinduliuotei atitinkamai ties 3,81 THz, 4,00 THz ir 3,65 THz.

Šiame darbe pademonstruotas poliarizacijai jautrus šiluminis šaltinis suderinamas su terahercine GaAs technologija. Tokiame įrenginyje dvigubą rezonansinį dažnį galima reguliuoti keičiant metaatomo kraštinės ilgį arba pasirenkant šviesos poliarizaciją.



1 pav. Eksperimentiniai THz šiluminių šaltinių su periodiniu iš kvadratinių metaatomų sudarytu metapaviršiumi atspindžio spektrai



2 pav. Eksperimentiniai THz šiluminio šaltinio su periodiniu stačiakampių formos metapaviršiumi atspindžio spektrai dviem statmenoms poliarizacijoms.

Reikšminiai žodžiai: terahercai, šiluminiai šaltiniai, metapaviršius.

Padėka

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. [S-MIP-22-76]

Literatūra

- [1] Alfred Leitenstorfer et al. J. Phys. D: Appl. Phys. **56** 223001 (2023).
- [2] L. Bosco et al. Applied Physics Letters, vol. **115**, pp. 010601 (2019).
- [3] Grigelionis, I. et al. Sensors **23**, 4600 (2023).
- [4] F. Alves et al. Opt. Express, vol. **20**, pp. 21025-21032 (2012).

Scintiliacinių charakteristikų tyrimas MOCVD GaN su chemiškai ėsdintu paviršiumi po apšvitos protonais

Investigation of scintillation characteristics in MOCVD GaN with chemically etched surface after proton irradiation

Gertrūda Pociūtė¹, Tomas Čeponis¹, Vitalij Kovalevskij², Jevgenij Pavlov¹

¹Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

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

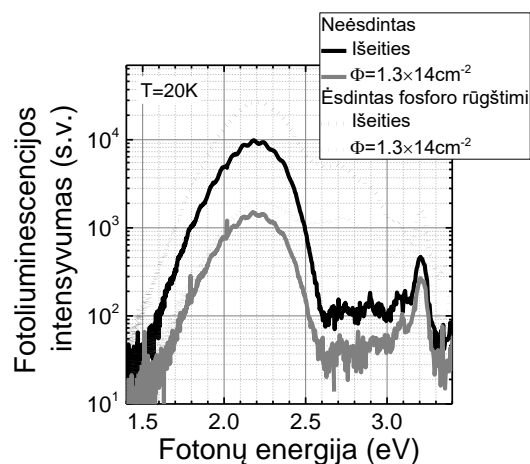
jevgenij.pavlov@tmi.vu.lt

GaN yra patraukli medžiaga dvigubo atsako dalelių sensorių formavimui [1]. Tokie sensoriai gali būti taikomi medicininuose diagnostikos įrenginiuose, radiacijos monitoringui, aukštųjų energijų fizikos eksperimentuose, pvz., naujos kartos dalelių greitintuvo (Future Circular Collider - FCC) eksperimente ir pan. Tačiau GaN scintiliacinės charakteristikos priklauso nuo kristalų kokybės [2]. Technologiniai/radiaciniai defektai ir šviesos ištraukimo efektyvumas (Light Extraction Efficiency - LEE) nulemia GaN scintiliatorių našumą. LEE gali būti padidintas keičiant kristalo paviršiaus geometriją, pvz., naudojant cheminį ėsdinimą (wet etching), kuris gali pakeisti ne tik paviršiaus formą ir plotą, bet ir GaN kristalo paviršiaus kokybę [3,4]. Buvo parodyta, kad cheminis MOCVD GaN paviršiaus ėsdinimas fosforo rūgštimi (85% H₃PO₄) nulemia fotoluminescencijos efektyvumo išaugimą bent du kartus [5]. Tačiau, liuminescencijos smailių intensyvumas kinta apšvitos jonizuojančiąja spinduliuote poveikyje dėl radiacinių defektų formavimosi, kurie nulemia naujų spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos kanalų susidarymą [1]. Siekiant pritaikyti MOCVD GaN medžiagą dvigubo atsako jonizuojančiosios spinduliuotės sensorių formavimui, būtina iširti sluoksnių charakteristikų kaitą aukštųjų energijų spinduliuočių poveikyje.

Šio darbo tikslas buvo iširti chemiškai ėsdintu MOCVD GaN sluoksnių, turinčių didelį dislokacijų tankį, liuminescencines charakteristikas prieš ir po apšvitos 1.6 MeV protonais.

Darbe buvo iširti 3.7 μm storio MOCVD GaN sluoksniai, išauginti Vilniaus universitete MOCVD reaktoriuje ant safyro padėklo (kurio paviršius buvo c plokštumos) prieš tai nusodinus buferinį u-GaN sluoksnį, kurio storis siekė >1 μm. MOCVD GaN sluoksnis buvo lengvai legiruotas Si, kurio koncentracija siekė 10¹⁷ cm⁻³, o dislokacijų tankis buvo lygus ~10⁹ cm⁻². Bandinių paviršiai buvo ėsdinti fosforo rūgštimi (85 % H₃PO₄) 160 °C temperatūroje 30 min. Apšvitos 1.6 MeV protonais buvo atliktos Fizinių ir technologijos mokslų centre Tandetron 4110A jonų greitintuvu. Bandiniai buvo apšvitinti $\Phi \approx 1.3 \times 10^{14}$ cm⁻² protonų įtėkiu.

Darbe buvo iširta fotoluminescencijos spektrų kaita po apšvitos protonais (paveikslas 1). Krūvininkų dinamikos tyrimai buvo atlikti pasitelkiant mikrobangomis zondojuojamo fotolaidumo (microwave probed photoconductivity - MW-PC) kinetikų metodą.



1 pav. Fotoluminescencijos spektrų kaita neėsdintame ir ėsdintame MOCVD GaN sluoksniuose prieš ir po apšvitos protonų pluošteliumi.

Pranešime bus aptarta radiacinių defektų įtaka fotoluminescencijos spektro smailių intensyvumų kaitai fosforo rūgštimi ėsdintuose MOCVD GaN sluoksniuose.

Reikšminiai žodžiai: GaN, cheminis ėsdinimas, apšvyta protonais, liuminescencija.

Literatūra

- [1] T. Ceponis, K. Badokas, L. Deveikis, J. Pavlov, V. Rumbauskas, V. Kovalevskij, S. Stanionyte, G. Tamulaitis, E. Gaubas, *Sensors* **19**(15) 3388 (2019).
- [2] E. Gaubas, T. Ceponis, A. Jasiunas, V. Kovalevskij, D. Meskauskaitė, J. Pavlov, V. Remeikis, A. Tekorius, J. Vaitkus, *Appl. Phys. Lett.* **104** 062104 (2014).
- [3] T. Ceponis, J. Pavlov, A. Kadys, A. Vaitkevicius and E. Gaubas, *Materials* **16** 3424 (2023).
- [4] Y. Yao, Y. Ishikawa, Y. Sugawara, D. Yokoe, M. Sudo, N. Okada, K. Tadatomo. *Superlattice Microst.* **99** 83-87 (2016).
- [5] T. Ceponis, J. Pavlov, A. Kadys, A. Vaitkevicius and E. Gaubas, *Materials* **16** 3424 (2023).

Stipraus kolegiravimo Mg^{2+} jonais poveikis šviesos emisijai ceriu legiruotuose daugiakomponenčiuose granatiniuose sintiliatoriuose

Impact of heavy Mg^{2+} codoping on light emission in Ce-doped multicomponent garnet scintillators

Arnoldas Solovjovas¹, Saulius Nargelas¹, Miroslav Kucera², Yauheni Talochka¹, Žydrūnas Podlipskas¹, Zuzana Lucenicova², Gintautas Tamulaitis¹

¹ Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3., LT-10257 Vilnius

² Charles University, Faculty of Mathematics and Physics, Ke Karlovu 2027/3, 12116, Prague

arnoldas.solovjovas@ff.vu.lt

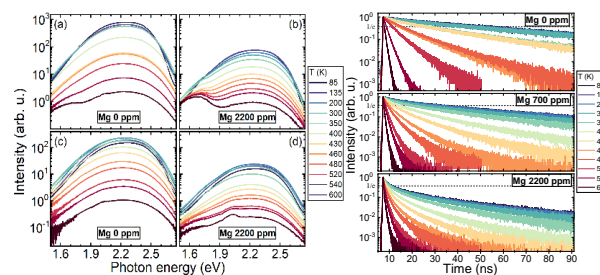
Sintiliuojančių medžiagų jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriams savybės yra labai svarbios šių detektorių taikymui didelės energijos fizikos eksperimentuose (CERN ir kitose didelėse infrastruktūrose), mediciniuose vaizdinimo prietaisuose, saugumo sistemose. Taikymams minėtose srityse yra aktualūs sintiliatorių našumas, didelis medžiagos tankis, radiacinis atsparumas, kaina. Pastaruoju metu itin svarbu pagerinti sintiliatorių greitaveiksmumą. Itin didelio dėmesio sulaukia monokristaliniai ceriu legiruoti gadolinio aliuminio galio granatai (GAGG:Ce). Jie patrauklūs dėl didelio medžiagos tankio, itin aukšto fotokonversijos našumo (>50000 fot/MeV) ir didelės sintiliacinio atsako spartos. Parodyta, kad šių kristalų kolegiravimas divalenciais jonais leidžia paspartinti liuminescencijos gesimą, kas yra aktualu sintiliatorių taikymuose didelės energijos fizikos eksperimentuose.

Šiame darbe yra tiriamas stipraus kolegiravimo Mg jonais poveikis $(Lu, Gd)_3(Ga, Al)_5O_{12}:Ce, Mg$ (LuGGAG) daugiakomponenčių granatinių sintiliatorių, užaugintų skystos fazės epitaksijos (angl. *Liquid Phase Epitaxy*) metodu, šviesos emisijos savybėms. Šis sluoksnų auginimo metodas yra patrauklus dėl mažesnių kaštų ir leidžia lanksčiau keisti elementinę auginamo sluoksnio sudėtį nei Czochralski metodas, naudojamas aukštos kokybės monokristalams auginti. Tyrime buvo naudojami LuGGAG sintiliatoriai, kuriuose kolegiravimas Mg jonais kinta nuo 0 ppm iki 2200 ppm. Tyrimai atlikti naudojant šviesos sugerties metodus ir fotoluminescencijos spektroskopiją su laikine skyra. Tirtų bandinių optinės sugerties spektrams matuoti naudotas Perkin Elmer 950 spektrofotometras. Femtosekundinio Yb:KGW lazerio (Pharos, *Light Conversion*) ir optinio parametrinio stiprintuvo (Orpheus, *Light Conversion*) sistema spinduliuojanti 250 fs trukmės impulsus buvo naudojama selektyviam Ce^{3+} jonų sužadimui, o fotoluminescencijos spektrai ir gesimo kinetikos buvo registruojamos Hamamatsu CCD kamera ir 200 ps laikinės skyros Becker&Hickl laike koreliuotų pavienių fotonų skaičiavimo sistema. Tyrimai atlikti bandinius patalpinus kriogeninėje sistemoje, leidžiančioje keisti temperatūrą nuo 80 K iki 600 K.

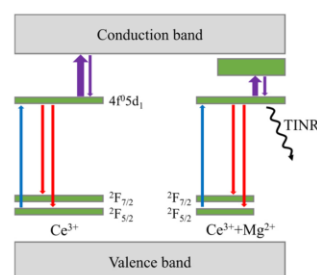
Ištirtos fotoluminescencijos spektrų ir gesimo kinetikų temperatūrinės priklausomybės (1 pav. ir 2 pav.)

rodo mažėjantį fotoluminescencijos intensyvumą ir spartėjantį gesimą, didėjant kolegiruojančio Mg jonų kiekiui. Skaičiavimai rodo, kad emisijos savybių pokyčio priežastis yra besiformuojantys nespindulinės rekombinacijos centrai - $Ce^{3+}+Mg^{2+}$, kai kolegiruojantis Mg jonas atsiduria greta aktyvatoriaus jono Ce^{3+} (žr. 2 pav.).

Pastarieji centrai sukuria nespindulinės rekombinacijos kanalą, su nuo temperatūros nepriklausančia 10,6 ns rekombinacijos trukme ir termiškai aktyvuoto liuminescencijos gesinimo kelią su 0,2 eV barjeru, kuomet įprastų Ce^{3+} centrų fotoluminescencijos terminio gesinimo barjeras yra 0,48 eV.



1 pav. Fotoluminescencijos spektrų ir gesimo kinetikų temperatūrinės priklausomybės nekolegiruotame (Mg 0 ppm) ir Mg kolegiruotuose bandiniuose (Mg 700 ir Mg 2200 ppm)



2 pav. Ce^{3+} ir $Ce^{3+}+Mg^{2+}$ centrų LuGGAG matricioje energijos lygmenų schema

Reikšminiai žodžiai: sintiliatoriai, fotoluminescencija, granatai, spektroskopija.

Perovskitinių saulės elementų fotolaidumo savybių tyrimas

Investigation of the photoconductive properties of perovskite solar cell

Ernestas Kasparavičius¹, Andrius Dušauskas², Vidmantas Gulbinas^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

Vilniaus universitetas, Universiteto g. 3, 01513 Vilnius

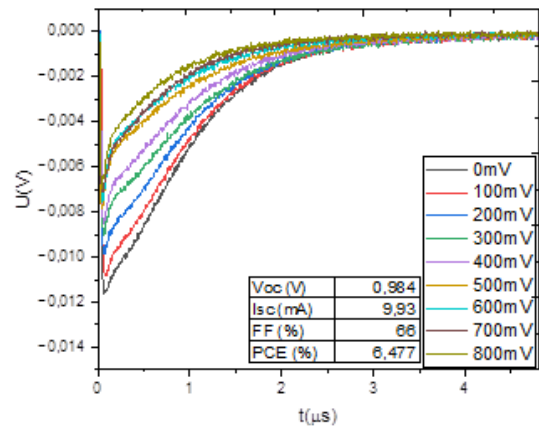
ernestas.kasparavicius@ftmc.lt

Išskatiniai degalai, tokie kaip nafta, vis dar yra vienas iš pagrindinių energijos šaltinių, o kylančios išskatinių degalų kainos skatina ieškoti alternatyvų energijos šaltinių, kurie galėtų patenkinti augantį energijos poreikį. Saulės elektrinės yra vienas iš perspektyviausių atsinaujinančių energijos šaltinių tipų, o tinkamai išvysčius saulės elektrines, galima visiškai patenkinti visuomenės energijos poreikius be išskatinių degalų [1]. Perovskitinės saulės elementai, kurie per pastarąjį dešimtmetį sulaukė didelio mokslinio ir pramoninio susidomėjimo, pasiekė rekordinius efektyvumo rodiklius (nuo 3,8 % iki 26,1 %) [2]. Skyles transportuojantis sluoksnis turi didžiulę reikšmę PSE efektyvumui – jis yra atsakingas už skylių atskirimą iš perovskito ir nepageidaujamų rekombinacijos procesų prevenciją blokuodamas elektronus [3]. Perovskitinės saulės elementai turi paprastą gamybos technologiją ir gali būti montuojami ant kitų saulės elementų (silicio saulės elementų, CIGS saulės elementų) siekiant gauti efektyvesnius tandeminius saulės elementus. Šio tipo saulės elementai leidžia absorbuoti platesnį šviesos spektrą, taip pasiekus didesnę efektyvumą. Tandeminių saulės elementų efektyvumas, kuris pasiekė rekordinius 33,7 % [2], buvo pasiektas naudojant savaime surinktas monosluoksnių medžiagas (SAM), kurios dėl paprastų formavimo metodų ir ekonomiškų saulės elementų konstrukcijos sulaukia vis didesnio mokslininkų ir įmonių visame pasaulyje susidomėjimo [4]. Tačiau šiuo metu trūksta duomenų apie savaime surinktų monosluoksnių medžiagų laidžiųjų nešiklių transporto savybes, kurios lemia saulės elementų efektyvumą. Platesnis savaime surinktų monosluoksnių medžiagų tyrimas leistų atlikti tikslų medžiagų atranką ir sukurti efektyvesnius perovskites saulės elementus.

Buvo tyrinėjamas polimerinis PEDOT:PSS sluoksnis saulės elemente. Tikslas buvo naudojant fotojudrumo matavimo metodą nustatyti, kaip šviesos intensyvumas, sklindantis per saulės elementą, bei taikoma išorinė įtampa paveikia saulės elemento krūvininkų judėjimo dinamiką ir kaip ši dinamika skiriasi naudojant skirtingus STL sluoksnius.

Norint pamatyti, kaip naudojama išorinė įtampa veikia saulės elemento generuojamą įtampą ir fotosrovę, kurių parametrai labai panašūs į naudojamus intensyvumo priklausomybės matavimui. Išorinė įtampa buvo generuojama generatoriumi. Ši įtampa priešinosi saulės elemento vidiniam elektriniam laukui. Rezultatai rodomi 1 pav. Tiek foto srovės, tiek generuojamos įtampos matavimai buvo atlikti taip pat, kaip ir intensyvumo priklausomybės matavimas. Matome, kad

padidinus įtampą sumažėjo ištraukiama įtampa ir foto srovė. Tai taip pat lemia greitesnę įkrovų rekombinaciją.



1 pav. Išorinės įtampos poveikis generuojamai įtampai ir generuojamoms fotosrovėms saulės elemente, kai MeO-2PACz naudojamas kaip skylių transportuojantis sluoksnis

Reikšminiai žodžiai: perovskitiniai saulės elementai, fotolaidumas, savitvarkiai monosluoksniai

Literatūra

- [1] J. S. Shaikh, N. S. Shaikh, A. D. Sheikh, S. S. Mali, A. J. Kale, P. Kanjanaboos, C. K. Hong, J. H. Kim, P. S. Patil, Mater. Des. 2017, 136, 54.
- [2] <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [3] Pham, H. D., Yang, T. C.-J., Jain, S. M., Wilson, G. J., Sonar, P., Development of Dopant-Free Organic Hole Transporting Materials for Perovskite Solar Cells. Adv. Energy Mater. 2020, 10, 1903326.
- [4] A. Al-Ashouri, A. Magomedov, M. Roß, M. Jošt, M. Talaikis, G. Chistiakova, T. Bertram, J. A. Márquez, E. Köhnen, E. Kasparavičius, S. Levcenco, L. Gil-Escrig, C. J. Hages, R. Schlattmann, B. Rech, T. Malinauskas, T. Unold, C. A. Kaufmann, L. Korte, G. Niaura, V. Getautis and S. Albrecht, Energy Environ. Sci., 2019, 12, 3356–3369. G. Lushnikov, J.-H. Ko, and S. Kojima, Appl. Phys. Lett. **84**, 4798 (2004).

Impulsinių krūvininkų dreifo charakteristikų tyrimas Si dalelių sensoriuose su vidiniu stiprinimu

Pulsed charge carrier drift characteristics of Si low gain avalanche particle sensors

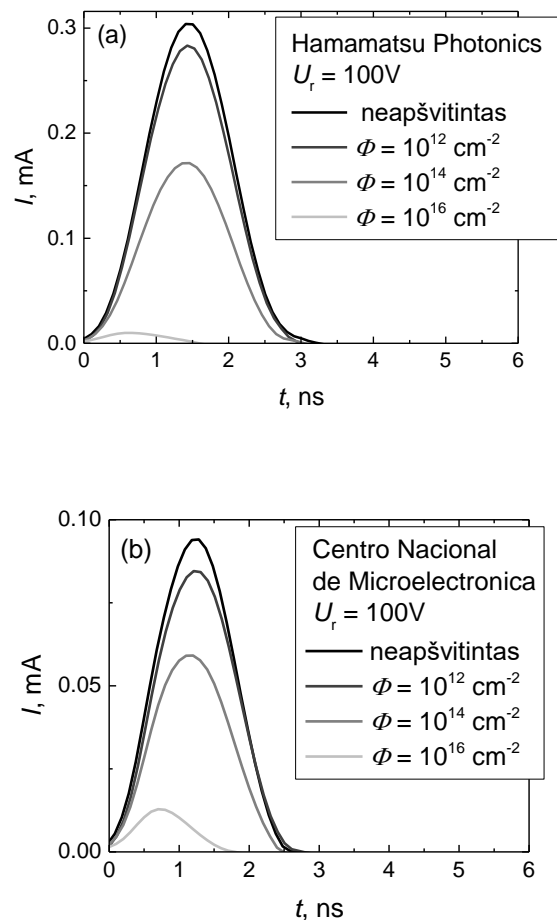
Margarita Biveinytė, Laimonas Deveikis, Tomas Čeponis, Eugenijus Gaubas
Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
margarita.biveinyte@ff.stud.vu.lt

Silicis – šiuo metu plačiausiai elektronikoje naudojama puslaidininkinė medžiaga. Silicio pagrindu pagaminti dalelių sensoriai yra plačiai taikomi aukštųjų energijų bei branduolinės fizikos eksperimentuose. Vienas didžiausių iš jų – Europos branduolinių mokslinių tyrimų organizacijos (CERN) vykdomi tyrimai didžiajame hadronų priešpriešinių srautų greitintuve (angl. Large Hadron Collider – LHC). Tačiau aukštųjų energijų spinduliuotė, kurios aplinkoje funkcionuoja eksperimentuose naudojami dalelių sensoriai, priklausomai nuo tipo ir energijos, sąveikaudama su medžiaga sukuria įvairius lygmenis draustinių energijų tarpe, kurie nulemia pagamintų prietaisų funkcinę charakteristikų pakitimą [1]. Seklūs lygmenys keičia efektyvų legirantų tankį. Vidutinio gilumo lygmenys veikia kaip pagavimo centrai mažinantys krūvio surinkimo efektyvumą, o gilūs lygmenys nulemia nuotėkio srovės išaugimą, kuris yra ir triukšmų šaltinis [2]. Kita vertus, dalelių sensorių funkcinę charakteristikų pokyčių analizė, prieš ir po apšvitų aukštųjų energijų dalelėmis, gali būti pritaikoma dozimetriškai [2]. Todėl, dalelių sensorių charakterizavimas juos apšvitinus aukštųjų energijų dalelėmis leidžia įvertinti radiacinę pažeidimą, jų ilgaamžiškumą bei suteikia žinių, reikalingų kuriant naujas medžiagas bei sensorių struktūras ir ieškant naujų taikymo būdų.

Silicio dalelių sensoriai su vidiniu stiprinimu (angl. Low Gain Avalanche Detectors – LGAD), dėl aukštos laikinės skyros bei didesnio atsparumo radiacinei pažeidai, šiuo metu yra numatyti, kaip alternatyva dabar LHC naudojamiems p-i-n struktūros dalelių sensoriams, po jo atnaujinimo į didelio šviesumo LHC (angl. High Luminosity LHC) [3]. Šiame darbe ištirti prototipiniai dviejų skirtingų gamintojų (Hamamatsu Photonics ir Centro Nacional de Microelectronica) $1,3 \times 1,3 \text{ mm}^2$ aktyviosios srities ploto, CERN standarto silicio pagrindu pagaminti $n^+p\bar{p}p^+$ struktūros dalelių sensoriai su vidiniu stiprinimu. Bandinių rinkiniai buvo sudaryti iš neapšvitintų bei 24 GeV energijos skvarbiaisiais protonais, $10^{12} - 10^{16} \text{ p/cm}^2$ įteklių intervale apšvitintų sensorių.

Siekiant įvertinti krūvio surinkimo efektyvumą bei jo kaitą, nulemtą protonų apšvitais, šiame darbe pasitelkta injektuoto krūvio dreifo srovių kinetikų matavimo metodika (angl. Transient Current Technique – TCT), skirta impulsinių dalelių detektorių signalų registravimui ir analizei.

Pranešime bus pristatyta TCT eksperimento metodika, įranga bei aptarta apšvitais įtaka LGAD struktūros dalelių sensorių funkcinėms savybėms.



1 pav. Hamamatsu Photonics (a) ir Centro Nacional de Microelectronica (b) gamybos LGAD detektorių TCT kinetikų kaita, augant protonų įtekliui.

Reikšminiai žodžiai: silicis, aukštųjų energijų fizika, dalelių detektoriai, LGAD, CERN, LHC.

Literatūra

- [1] C. Claeys, E. Simoen, *Basic radiation damage mechanisms in semiconductor materials and devices* (Springer, Berlin, 2002).
- [2] S. N. Ahmed, *Physics and Engineering of Radiation Detection* (Elsevier, Great Britain, 2007).
- [3] B. Schmidt, *J. Phys. Conf. Ser.* **706** (2), 022002 (2016).

Radiacinių defektų spektroskopija silicio pin struktūros dalelių sensoriuose

Spectroscopy of radiation defects in silicon pin particle sensors

Augustas Baliukonis¹, Tomas Čeponis¹, Eugenijus Gaubas¹, Jevgenij Pavlov¹, Vytautas Rumbauskas¹, Marius Burkanas², Jonas Venius²

¹Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

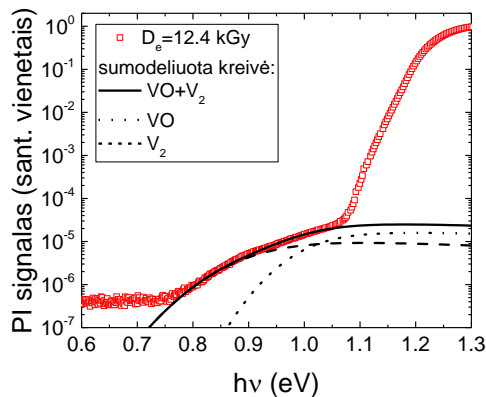
²Nacionalinis vėžio institutas, Santariškių g. 1, LT-08660, Vilnius

augustas.baliukonis@ff.stud.vu.lt

Mažo ploto spinduliuotės jutikliai yra plačiai naudojami šiuolaikinėje onkologijoje, pavyzdžiui, išorinėje Rentgeno / gama spindulių arba elektronų pluošto apšvitoje, taip pat gama spindulių brachiterapijoje. Švitinimo tikslumui yra reikalingi mažo aktyvaus tūrio spinduliuotės jutikliai generuojantys įrašomus elektrinius signalus. Pavyzdžiui dozimetrijai brachiterapijoje yra reikalingi mažų matmenų (<1 mm) didelio jautrumo jutikliai, kad būtų galima registruoti ¹⁹²Ir spinduliuotę [1]. Tačiau spinduliuotė neigiamai veikia spinduliuotės jutiklius, sukuria defektus, kurie nulemia jutiklių funkcinę charakteristikų degradaciją, pvz.: išaugusi nuotėkio srovė, sumažėjęs generuojamas elektrinis signalas. Todėl siekiant užtikrinti patikimą spinduliuotės registravimą, padidinti jutiklių tarnavimo laiką, labai svarbu charakterizuoti radiacijos nepaveiktus bei apšvitintus jutiklius, identifikuojant radiacinius defektus, įvertinant jų koncentracijas, įtaką jutiklių funkcinėms charakteristikoms.

Tyrimams pasirinkti OSRAM pagaminti komerciniai silicio (Si) *pin* diodai, kaip potencialūs mažo ploto ($S=0.35 \text{ mm}^2$) spinduliuotės jutikliai. Jutikliai apšvitinti 6 MeV elektronais ir 6 MeV Rentgeno spinduliais skirtingomis dozėmis nuo 0,7 iki 20 kGy, Nacionaliniame Vėžio Institute.

Jutiklių elektrinių charakteristikų įvertinimui pasitelktos volt-amperinių (I-V) ir volt-faradinių (C-V) charakteristikų matavimų metodikos. Spinduliuotės sukurtų defektų tyrimui pasitelktos giliųjų lygmenų kinetinės spektroskopijos (DLTS) ir fotojonizacijos spektroskopijos (PIS) metodikos.



1 pav. Fotojonizacijos spektras bandinyje ašvitintame 6 MeV elektronais.

I-V charakteristikų matavimai parodė, kad didėjant apšvitos dozei didėja ir nuotėkio srovė jutikliuose, tai sietina su padidėjusia radiacinių defektų, veikiančių kaip rekombinacijos centrai koncentracija. Iš PIS spektro laiptelių (1 pav.) įvertinta dominuojančių radiacinių defektų optinės aktyvacijos energija.

PI spektro laiptelių modeliavimui pasirinktas Kopylov- Pikhtin [2] artynys:

$$\sigma(h\nu) = M_{ik}^2 \int_0^{\infty} \frac{e^{-(E+E_f-h\nu)^2/\Gamma^2} \sqrt{E} dE}{h\nu(E+E_f)^2} \quad (1)$$

Jame papildomai įvertinama elektron-fononinė sąveika kurią apibūdina išplitimo parametras Γ . Modeliuojant skirtingomis dozėmis apšvitintų jutiklių PI spektrus įvertintos dominuojančių radiacinių defektų optinės aktyvacijos energijos (E_{OA}) ir Γ parametro vertės pateiktos 1 lentelėje.

1 lentelė. Identifikuotos foto aktyvios gaudyklės elektronais ir Rentgenų apšvitintuose Si *pin* struktūros dioduose, jų optinės aktyvacijos energija E_{OA} ir išplitimo parametras Γ .

Priskiriama defektui	E_{OA} (eV)	Γ
VO	1.0	0.085 ± 0.005
$V_2^{(-)}$	0.9	0.13 ± 0.02

Reikšminiai žodžiai: jutiklis, dozimetrija, radiacinis defektas, spektroskopija.

Literatūra

- [1] EPO patent - SYSTEM AND METHOD FOR BRACHITHERAPY PROCEDURE PLANNING AND VERIFICATION, Authors: Eugenijus Gaubas, Tomas Čeponis, Kornelijus Pūkas, Vytautas Rumbauskas, Milita Užgirytė, Jonas Venius, Kęstutis Akelaitis, Aleksandras Cicinas. Application No. EP21210650.4, submission date: 2021 11 26.
- [2] A.A. Kopylov, A.N. Pikhtin, Influence of temperature on spectra of optical absorption by deep levels in semiconductors, Sov. Phys. Solid State 16 (1975) 1200-1203.

Kryptingas koherentinis šiluminis spinduliavimas iš tiesinių ir apskritų n-GaN gardelių

Directive coherent thermal emission from linear and circular n-GaN surface relief gratings

Vytautas Janonis¹, Algirdas Selskis¹, Pawel Prystawko², Irmantas Kašalynas¹

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

²Didelių slėgių fizikos institutas (Lenkijos mokslų akademija), Sokolowska 29/37,01-142, Varšuva, Lenkija

vytautas.janonis@ftmc.lt

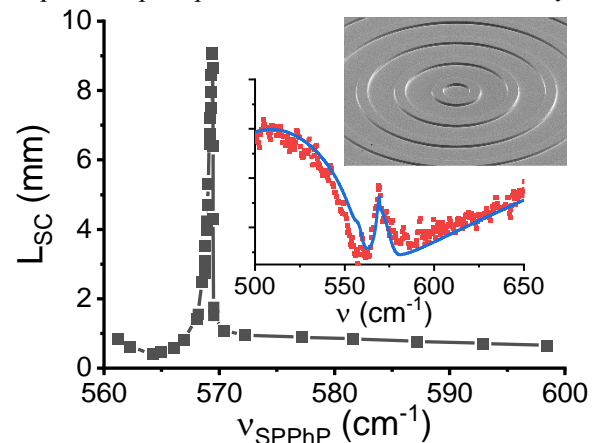
Terahercų (THz) ir infraraudonosios (IR) spinduliuotės ruožų spektroskopijos, jutiklių, energijos valdymo bei spinduliacinės temperatūros kontrolės taikymai skatina inovatyvių elektromagnetinės spinduliuotės charakteristikų valdymo metodų paiešką. Paviršinių plazmonų poliaritonų sužadimais paremti komponentai yra plačiai nagrinėjami ir taikomi spinduliuotės energijos bei kryptingumui valdyti regimame – ultravioletiniame spektuose. [1] Deja THz-IR ruožuose spinduliuotės energija yra mažesnė, rezonansinės linijos dėl palyginti didelio plazmonų slopinimo yra išplitusios, ir palyginamos su rezonansiniu dažniu, o tai stabdo aukštos kokybės optinių komponentų vystymą. Šiame spektriniame ruože pasiūlytas sprendimas – panaudoti hibridinius paviršinių plazmonų – fononų poliaritonus (PPFP), kuriuose platus plazmoninių poliaritonų spektrinis ruožas susiejamas su itin mažais fononinių svyravimų nuostoliais puslaidininkyje [2]. Rezultate hibridiniai PPFP iš seklios n-GaN gardelės generavo tiek laike tiek erdvėje koherentinį šiluminės spinduliuotės profilį, kurio didžiausias koherentiškumas turėtų būti pasiekiamas ties dažniu, atitinkančiu gardelės periodą $17.5 \mu\text{m}$ (571 cm^{-1})[3].

Šiame darbe pristatomi hibridinių poliaritonų spinduliavimo charakteristikų rezultatai skirtingo formos ir užpildos, bet fiksuoto periodo ($P = 17.5 \mu\text{m}$) sekliose n-GaN gardelėse. Pagaminti bandiniai patvirtino didelio kryptingumo koherentinį PPFP spinduliavimą, kurį pavyko stebėti net be kolimuojančios optikos.

Sugerties, pralaidumo ir atspindžio spektrinės charakteristikos buvo modeliuojamos pasitelkiant tiksliosios susietųjų bangų analizės metodą (angl.: *Rigorous Coupled Wave Analysis*). Ištyrėme skirtingų užpildos faktorių ($0 < FF < 1$) seklių n-GaN gardelių spinduliuojamosios gebos spektrus bei jų kryptingumo charakteristikas. Kai $FF = 0.25$, spėtas mažas hibridinių PPFP svyravimų slopinimas leido pasiekti mažiausią rezonansinės linijos plotį siekiantį 1 cm^{-1} , bei didelį kryptingumą siekiantį 0.11 laipsnio. Nustatytas teorinis tiesinės gardelės erdvinis koherentiškumas siekė iki 9.5 mm (1 pav.). Gauti rezultatai leidžia tikėtis hibridinius PPFP panaudoti globaliai koherentinių šiluminių spinduliuotės šaltinių kūrimui [5].

Remiantis teorinės tyrimo dalies rezultatais ant vieno lusto pagamintos keturios gardelės, kurios skyrėsi forma (tiesinė, apskritiminė) ir užpilda ($0.25, 0.50, 0.75$). Šiluminis spinduliavimas iš kiekvienos gardelės buvo išmatuotas Furje spektrometru, bandinį kaitinant iki 500 C temperatūros. Gardelė su tiesinės formos grioveliais buvo panaudota poliaritoninių dispersijos charakteristikų tyrimui, kuris parodė PPFP rezonansines pirmos ir antros

eilės modas, kurių išmatuotos dispersinės charakteristikos gerai sutapo su skaičiavimo rezultatais. Kituose trijuose bandiniuose gardelę sudarė apskritiminės formos grioveliai (žr. 1 pav. intarpa.), kur užpildos faktorius buvo $0.25, 0.50$ arba 0.75 . Sužadinus hibridinius PPFP tokios formos gardelėje, šie spinduliuoja apskritimiškai poliarizuotą koherentinį pluoštą, kurį dėl didelio kryptingumo mums pirmą kartą pavyko išmatuoti tiesiogiai, nenaudojant papildomos surinkimo optikos. Išmatuotas vieno iš bandinių spektras kartu su modeliavimo rezultatu parodyti 1 pav. intarpe. Matomas geras sutapimas tarp eksperimento ir skaičiavimo rezultatų.



1 pav. Suskaičiuota dažninė, sekliose n-GaN gardelėje sužadintų hibridinių PPFP, erdvinio koherentiškumo priklausomybė, kai gardelės $FF = 0.25$. Intarpuose pavaizduota eksperimentinės emisijos (taškai) bei suskaičiuoti spinduliuojamosios gebos (linija) spektrai; taip pat –pagamintos apskritos n-GaN gardelės su $FF = 0.25$ SEM centrinės dalies SEM nuotrauka.

Reikšminiai žodžiai: koherentinė šiluminė spinduliuotė, paviršiniai plazmonų – fononų poliaritonai.

Dėkojame už finansinę paramą Lietuvos mokslo tarybai, per projektą “T-HP” (Projekto nr: 01.2.2-LMT-K-718-03-0096).

Literatūra

- [1] Baranov, D.G. et al. Nat. Mater. 18, 920–930 (2019).
- [2] V. Janonis, S. Tumėnas, P. Prystawko, J. Kacperski, and I. Kašalynas, Appl. Phys. Lett. 116(11), 1–5 (2020).
- [3] V. Janonis, R. M. Balagula, I. Grigelionis, P. Prystawko, and I. Kašalynas, Opt. Express 29(9), 13839 (2021).
- [4] V. Janonis, J. Kacperski, A. Selskis, R.M. Balagula, P. Prystawko, and I. Kašalynas, Opt. Mater. Express 13, 2662-2673 (2023).
- [5] V. Janonis and I. Kašalynas, Patent application EP4105693A1, published 21 December 2022).

Tyrinėjimas neišvengiamo karštų nešiotųjų efekto GaAs p-n jungtyje

Exploring the unavoidable hot carrier effect in GaAs p-n junction

Oleksandr Masalskyi^{1,2}, Jonas Gradauskas^{1,2}, Ihor Zharchenko^{1,3}, Steponas Ašmontas¹, Algirdas Sužiedėlis¹, Aldis Šilėnas¹, Aurimas Čerškus^{1,4} and Aleksej Rodin⁵

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

²Vilnius Gediminas Technical University, Faculty of fundamental sciences, Saulėtekio av. 11, LT-10223 Vilnius

³Vilnius Gediminas Technical University, Faculty of electronics, Saulėtekio av. 11, LT-10223 Vilnius

⁴Vilnius Gediminas Technical University, Faculty of mechanics, Plytinės st. 25, LT-10105 Vilnius

⁵Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių st. 231, LT-02300 Vilnius

ihor.zharchenko@vilniustech.lt

The realm of solar cell technology is evolving, and as we delve deeper into harnessing the power of sunlight, we often find ourselves pushing against the boundaries of established theory. The Shockley-Queisser limit [1] that is about 33% for single junction solar cells, is a theoretical base that puts maximum possible efficiency for the solar cells and it is the desired limit in the way for solar cell efficiency boosting. However, there exists an aspect that this limit does not encompass – the phenomenon of hot carriers [2]. These high-energy carriers, existing well above the average energy, possess the potential to wield a profound influence on the net output signal of a solar cell.

In this presentation, we unveil the negative influence of hot carrier photocurrent in the formation of photoresponse across GaAs p-n junction – an influence that introduces a polarity opposite to that of classical electron-hole pairs generation-caused photocurrent [3]. Our exploration uncovers a substantial portion, more than 36% [3], of the incident solar radiation that has the capacity to heat the carriers. Equally significant is the revelation that even absorption of below-bandgap solar photons exerts a considerable influence that further complicates the pursuit of higher efficiency cells [4].

The presence of the hot carrier component in the photocurrent remains consistent regardless of the wavelength of the incident radiation. It is dominant when the excitation is below the bandgap, and it is initiated by the surplus energy from the incident photons that is not utilized for electron-hole pair generation. Typically, the short-circuit photocurrent resulting from the hot carriers decreases as the cell's temperature decreases (see Fig. 1). This feature creates favorable conditions for the operation of a solar cell.

Furthermore, we introduce insights that shed the light a specific aspect of our research: the hot carriers can be heated up to 454 K under standard room conditions and up to 262 K under liquid nitrogen conditions in p-n junction that is exposed by laser light of 1.064 μm wavelength and 0.7 MW/cm^2 power. As a result of carriers' heating the hot carrier photocurrent has a recombinative nature.

In conclusion, our findings suggest that minimizing the hot carrier effect holds the potential to enhance solar cell efficiency. Furthermore, we propose that the revision of the venerable Shockley-Queisser theory by incorporating the direct influence of hot carriers will redefine our understanding of the theoretical limits of solar cell efficiency.

Keywords: hot carriers, p-n junction, GaAs, single junction solar cell, Shockley-Queisser theory.

References

- [1] W. Shockley, H. J. Queisser, *J. Appl. Phys.* **32**, 510 (1961).
- [2] G. Conibeer, *Materials today*, **10**, 11 (2007)
- [3] J. Gradauskas, S. Ašmontas, et al., *Appl. Sci.* **10**, 1 (2020).
- [4] O. Masalskyi, J. Gradauskas, *Ukr. J. Phys. Opt.* **23**, 3 (2022).

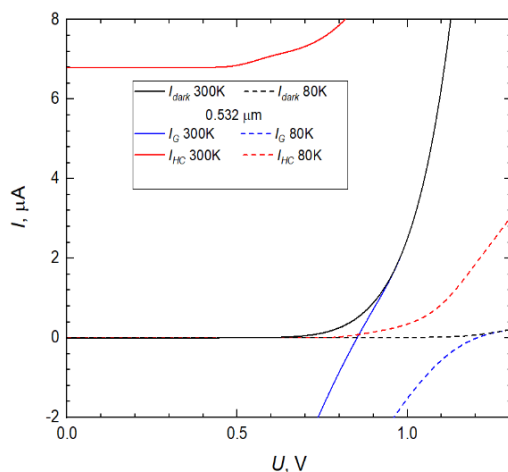


Fig. 1. Current-voltage characteristics in the dark (black lines) and under pulsed 0.532 μm laser illumination at room (solid lines) and liquid nitrogen (dashed lines) temperature. The red lines represent the hot carrier photocurrent, while the blue lines represent the generation photocurrent

Cinku legiruotas cezio švino jodido perovskitas optoelektroniniams taikymams

Zinc alloyed cesium lead iodide perovskite for optoelectronic applications

Abdul Mannan Majeed, Edvinas Radiunas, Patrik Ščajev

Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio Ave. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania
patrik.scajev@ff.vu.lt

Alloying engineering is an effective technique which is applied extensively to enrich semiconductors and modulate their intrinsic properties for electronic and optoelectronic applications. In this work we investigate the synthesis, deposition and characterization of lead iodide doped perovskite thin films. In this work we analyze the effect of Pb substitution by Zn [1] to the structural, optical, chemical and morphological properties of solution processed mixed cesium lead perovskite ($\text{CsPb}_x\text{Zn}_{x-1}\text{I}_3$). These mixed perovskite thin films were deposited on the RCA cleaned and ozone treated glass substrates by using the spin coating technique in nitrogen filled glovebox. The degradation of the processed thin films shows that $x = 0.3-0.6$ provides the most stable brown samples. Lower zinc content provides yellow perovskite phase while at higher Zn concentrations mixed phases are observed and discoloration appears.

The surface morphology of the samples has been investigated by using scanning electron microscope (SEM) and showed that the variations in the concentration from 30% to 60% of Zn changes the grain size. Atomic force microscopy (AFM) images showed sample thicknesses up to 400 nm and roughnesses ten times smaller (Fig. 1). The variation of the chemical composition in the perovskite layers was analyzed and confirmed by using EDX (Energy Dispersive X-ray). Samples for the optical characterisation were encapsulated with cover glasses to prevent water and oxygen induced degradation. The band gap energy was obtained from absorbance in the visible and short infrared region by using absorption spectrometer. Cutoff at about 700 nm was observed due to the direct interband transitions. The influence of the light on the degradation and restoration of these perovskite films has been analyzed at different time intervals by using photoluminescence spectra and decay times. For the Zn in 30% to 60% range, the most stable single perovskite phase appeared.

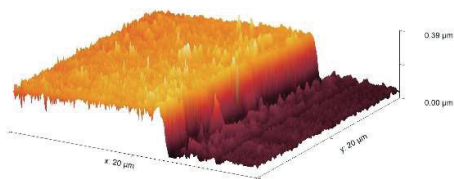


Fig. 1. AFM cross section for $x = 0.6$ layer.

The measurements of the time-resolved photoluminescence decays at peak ~ 700 nm wavelengths provided the longest carrier lifetimes of 400 ns in the $x = 0.3-0.6$ layers confirming their best alloy composition. Layers with the best composition and morphology provided narrow amplified spontaneous emission peak [2] at 710 nm (Fig. 2), which indicated high electrical and optical quality.

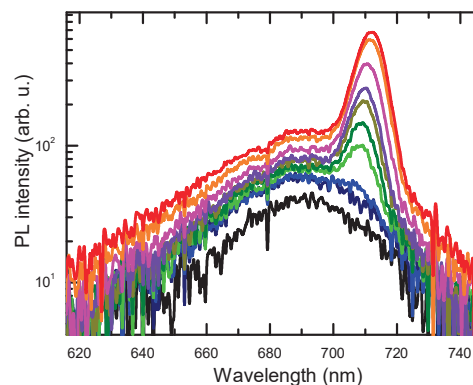


Fig. 2. Amplified spontaneous emission spectra at different intensity pulsed excitations.

Keywords: perovskites, alloying, carrier lifetime, amplified spontaneous emission.

References

- [1] X. Shen, Y. Zhang, S. V. Kershaw, T. Li, C. Wang, X. Zhang, W. Wang, D. Li, Y. Wang, M. Lu, L. Zhang, C. Sun, D. Zhao, G. Qin, X. Bai, W. W. Yu, and A. L. Rogach, *Nano Lett.* 2019, 19, 1552–1559.
- [2] C. Cho, A. Palatnik, M. Sudzius, R. Grodofzig, F. Nehm, and K. Leo, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2020, 12, 35242–35249.

YBaCuO plonų sluoksnių, perjungtų nanosekundiniais srovės impulsais, ominių sričių parametrai

Parameters of ohmic areas of the YBaCuO thin films switched by nanosecond electrical pulses

Oleg Kiprijanovič, Linas Ardaravičius, Steponas Ašmontas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
oleg.kiprijanovic@mail.lt

Šiomet H. Lorencio, 1902 m. fizikos Nobelio premijos laureato, gimimui sukanka 170 metų. Mokslo pasaulis prisimena jį kaip iškilų mokslininką, kuris priartino kvantinės fizikos ir reliatyvumo teorijos sukūrimą. Žymiam mokslininkui įamžinti, jo vardu pavadinta jėga, veikianti krūvininką, judantį elektriniame ir magnetiniame laukuose.

Pastaruoju metu atspausdinti aiškinantys impulsinės srovės poveikį YBaCuO plonus sluoksnius darbai [1, 2]. Nepasiekus kritinės srovės, Meisnerio jėga išstumia sukurtą tekančios superlaidžios srovės magnetinį lauką \mathbf{B} . Laukas ir srovė koncentruojasi kraštuose, Pirlio ilgio atstume λ_{eff} , Londono prasiskverbimo gylio analogo plonuose sluoksniuose. Pasiekus kritinę srovę, Lorencio jėga, veikianti koncentruotą srovę (1) ir stumianti ją į sluoksnio vidų, susilygina su Meisnerio jėga.

$$\vec{f}_L = [\vec{j} \times \vec{B}] \quad (1)$$

Dėl Meisnerio ir Lorencio jėgų konfrontacijos S-N riba, pločio λ_{eff} ir didelės srovės tankio, pereina į nestabilią išlenktą būseną. Dėl šių priežasčių pasireiškia kumuliaciniai reiškiniai, dėka kurių vyksta sluoksnio perjungimas iš superlaidžios būsenos į normalią - S-N perjungimas. Teoriškai apskaičiuoti tikslius perjungtų sričių parametrus kol kas nėra galimybės.

Pagal pasiūlytame darbe [2] S-N perjungimo aprašomąjį modelį, impulso užaugimo metu skersai sluoksnio formuojasi siauras N zonos kanalas apie 50 μm ilgio. Vėliau, pačio impulso metu, vyksta jo plėtimasis ir, atitinkamai, temperatūriniai pokyčiai. Įvertinti perjungtų sričių geometrinis ir temperatūrinis parametras buvo panaudota dviejų lygčių sistema.

Pirmoje sistemos lygtyje perjungtos srities bendra varža susideda iš 50 μm kanalo ir praplėtusios srities ilgio L varžų. Atsižvelgta į varžų didėjimą augant temperatūrai. Antroje lygtyje, adiabatiniam artėjime, išsiskyrusių pagal Džaulio-Lenco dėsnį 50 μm kanale ir praplėtosioje srityje galių suma prilyginama impulso galiai. Pradinės 50 μm kanalo temperatūros priaugimas ΔT_{kan} įvedamas kaip parametras. Ieškomas srities ilgis L ir jos temperatūros priaugimas ΔT_L . Galutinė kanalo temperatūra lygi pradinės kanalo ir praplėtusios srities temperatūrų sumai.

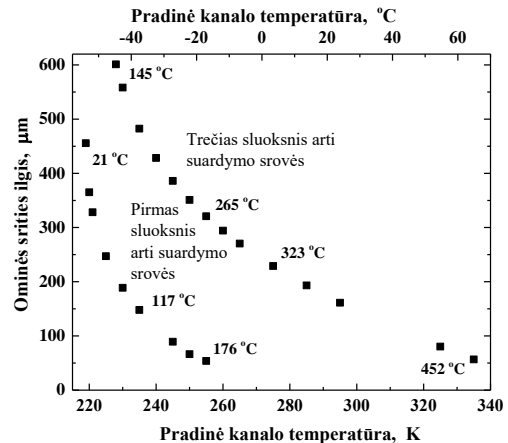
Buvo paimta po 5 taškus iš trijų $V-I$ priklausomybių, nustatytų naudojant vienodos geometrijos bandinius su skirtingais kritinės srovės tankiais ir, atitinkamai, skirtingais λ_{eff} . [1]. Sluoksnių dydžių vertės, įtakojančios S-N perjungimą, pateiktos 1 lentelėje.

Sprendimai parodė, kad pradiniuose priklausomybių taškuose visų trijų sluoksnių ominių sričių ilgių vs pradinės T_{kan} grafikai turi tiesinį augimą. Viršijant tam tikrą T_{kan} reikšmę, lygties sprendimai tampa fiziškai nepriimtini.

1 lentelė. Trijų bandinių sluoksnių parametrai, įtakoiantys S-N perjungimą.

T_c (K)	j_c (A/cm ²)	α_p (1/K)	ρ_{el} ($\Omega \cdot \text{m}$)	λ_{eff} (μm)
85	$2 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^{-2}$	$6 \cdot 10^{-6}$	3.1
89	$3 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^{-2}$	$4.4 \cdot 10^{-6}$	1.64
90	$5.2 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^{-2}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	1.155

Taškuose arti suardymo srovės pirmo ir trečio sluoksnių ominių sričių ilgių vs pradinės kanalo temperatūros kreivės pateiktos 1 pav. Tos pačios priklausomybės kreivė antram sluoksniui po augimo turi pertrūkį su staigiu ominės srities trumpėjimu iki kanalo matmenų, o jos temperatūra didėja arti prie 800 °C.



1 pav. Ominės srities ilgio priklausomybė nuo kanalo pradinės temperatūros. Skaičiai prie kreivių rodo galutinę kanalo temperatūrą.

Gauti rezultatai priklauso nuo įvestų į lygčių sistemą parametrų. Jie atitinka situacijoms, kurios stebimos eksperimento metu ir, mūsų nuomone, verti dėmesio.

Reikšminiai žodžiai: YBaCuO ploni sluoksniai, Lorencio jėga, S-N perjungimas, ominių sričių ilgis, ominių sričių temperatūra.

Literatūra

- [1] O. Kiprijanovič, L. Ardaravičius, J. Gradauskas, Č. Šimkevičius, S. Keršulis, S. Ašmontas, Supercond. Sci. Technol. **33**, 095013 (2020). <https://doi.org/10.1088/1361-6668/aba35>
- [2] O. Kiprijanovič, L. Ardaravičius, Thin Solid Films **748**, 139159 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2022.139159>

Elektronų pernaša 2D AlGaN/(AlN)/GaN ir 3D GaN dariniuose stipriame elektriniame lauke

Electron transport in 2D AlGaN/(AlN)/GaN and 3D GaN structures in a strong electric field

Linus Ardaravičius, Oleg Kiprijanovič, Emilis Šermukšnis, Artūr Šimukovič,
Justinas Jorudas, Liudvikas Subačius, Irmantas Kašalynas
Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, LT-10257, Vilnius
linus.ardaravicius@ftmc.lt

Gallium nitride (GaN) has many attractive properties for high-power and high-frequency applications due to a wide bandgap of 3.4 eV and a high electron peak velocity of $\sim 3 \times 10^7$ cm/s achieved at high electric fields [1]. In particular, the velocity of two-dimensional electron gas (2DEG) in nitride-based heterostructures varies from 1×10^7 to 3×10^7 cm/s depending on the presence of barrier layer [2]. In this work, layers for the AlGaN/AlN/GaN sample (U79) were grown on 6H-polytype SiC substrate. A nominally undoped $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ barrier layer was grown capping it with GaN and SiN_x passivation layers. A similar structure, but without an AlN spacer - AlGaN/GaN (U78) was developed on a 4H-polytype SiC substrate where a $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ barrier was capped by a GaN layer. Lightly doped GaN epitaxial layers were grown on semi-insulating GaN substrates. The ohmic contacts were fabricated of a Ti/Al/Ni/Au metal stack annealed in nitrogen ambient. The mesas were formed either by plasma reactive ion etching or by implantation of Al ions into a depth. The TLMs of width $w = 250 \mu\text{m}$ and of length $L = 6, 12.5, 25, 35, 45, 55, 65 \mu\text{m}$ were used to evaluate the contact resistance $R_c = 1-22.5 \Omega$ at low electric fields. The Hall effect experiments in Van der Paw geometry at temperature of 300 K revealed the density n and mobility μ values of 2DEG channels in used samples to be of $8.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and $9.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and of $1.9 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ and $1.9 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, respectively. The GaN epilayers with a thickness of $d = 10 \mu\text{m}$ demonstrated three-dimensional electron density (3DEG) and low-field mobility values of $1.1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ and $1021 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ at 300 K. More details about the device growth and processing have been reported elsewhere [3, 4]. Current-voltage (I - U) characteristics were measured at room temperature using voltage pulse duration of 2 ns and 3 ns for the samples from U79 and U78, respectively, where the average electric field was determined as $E=U/L$. The pulse duration for the GaN sample was 20 ns. The use of nanosecond duration pulses enables minimization of lattice self-heating effects and avoiding of space-charge domain formation in GaN [5]. Current density value of 1.24 A/mm at the highest field were reached for U79 with a $45 \mu\text{m}$ channel length while the highest current density value of 1.8 A/mm were measured for U78 with a $35 \mu\text{m}$ channel length. The highest current density of 320 A/mm² was measured for the 3D GaN. The strongest electric field of 75 kV/cm was applied to U78 with a channel length of 12.5 μm and showed current saturation. Electron drift velocity v_{dr} was estimated from data of measured current density j and the Hall electron density ($v_{\text{dr}} = j/en$, where e is elementary charge) with a highest value of 1.2×10^7 cm/s

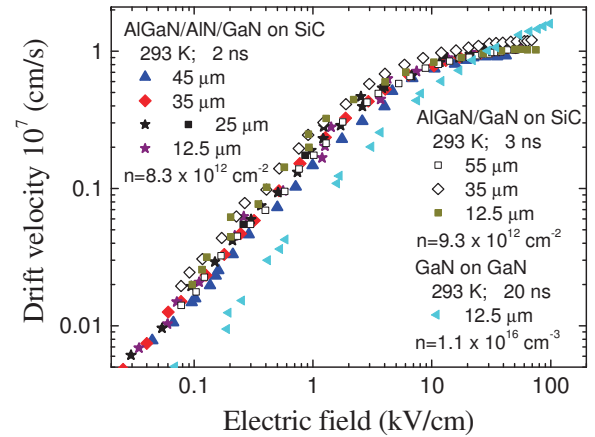


Fig. 1. Electron drift velocity dependence on the average applied electric field at room temperature in AlGaN/(AlN)/GaN heterostructures grown on SiC substrate and GaN grown on GaN substrate.

at 69 kV/cm for U78 heterostructure while the lowest value of 0.9×10^7 cm/s at 42 kV/cm was obtained for U79 heterostructure (Fig. 1). The electron velocity in the hetero-structures grown without the AlN spacer on SiC substrate was found to be 10-20 % lower than that measured for AlGaN/GaN structures but grown on sapphire substrate [2]. The highest electron velocity of 1.6×10^7 cm/s at 95 kV/cm was attained for the GaN. The drift velocity at high fields in the 2D GaN channel is lower than that in the 3D GaN as a result of stronger hot-phonon effect. Self-heating of the contacts leading to the increase of the contact resistance can play the role in determining the excess noise temperature in GaN-based heterostructures [4].

Keywords: electric field strength, nanosecond electrical pulses, electron drift velocity, GaN, AlGaN/(AlN)/GaN, 2D-3D electron gas

References

- [1] H. Morkoç, *Nitride Semiconductor Devices: Fundamentals and Applications* (Weinheim, Wiley-VCH, 2013).
- [2] L. Ardaravičius, A. Matulionis, J. Liberis, O. Kiprijanovic, M. Ramonas, L.F. Eastman, X. Chen, and Y. J. Sun, *Phys. Status Solidi A* **202**, 808 (2005); L. Ardaravičius, M. Ramonas, J. Liberis, O. Kiprijanovič, A. Matulionis, J. Xie, M. Wu, J.H. Leach, and H. Morkoç, *J. Appl. Phys.* **106**, 073708 (2009).
- [3] R. M. Balagula, L. Subačius, J. Jorudas, V. Janonis, P. Prystawko, M. Grabowski, and I. Kašalynas, *Materials* **15**, 2066 (2022).
- [4] E. Šermukšnis, J. Jorudas, A. Šimukovič, V. Kovalevskij, and I. Kašalynas, *Appl. Sci.* **12**(21), 11079 (2022).
- [5] R. M. Balagula, L. Subačius, P. Prystawko, and I. Kašalynas, *J. Appl. Phys.* **133**, 205702 (2023).

Paviršinės rekombinacijos greičio augimas Si po švitinimo greitaisiais neutronais

Increase of surface recombination velocity in Si after high energy neutron irradiation

Paula Baltaševičiūtė¹, Algirdas Mekys¹, Darius Jurčiukonis²,
Juožas Vidmantis Vaitkus¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

²Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
paula.baltaseviciute@ff.stud.vu.lt

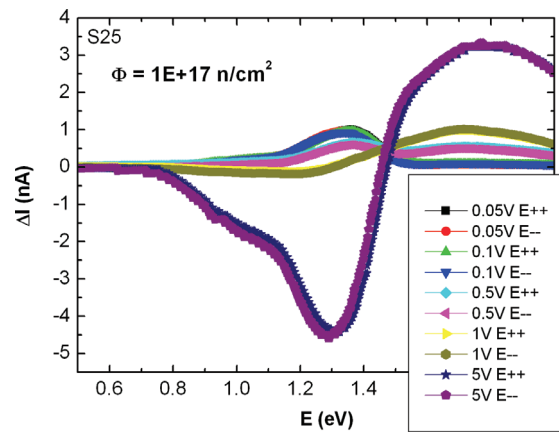
Atliekant eksperimentus su didelės energijos dalelėmis svarbu yra žinoti jų trajektorijas po tarpusavio sąveikos. Į šalis lekiančių dalelių padėtys yra nustatomos pasitelkiant radiacinius detektorius, kurie atlikdami darbą degraduoja. Stambiuose tyrimų centruose keisti degradavusius detektorius yra brangus ir ilgas darbas, todėl siekiama pasigaminti kuo ilgiau veikiančius detektorius tiriant įvairias medžiagas. Viena iš plačiai naudojamų medžiagų yra silicis, kurio gamybos technologiniai procesai yra per daug metų gerai išvystyti, tuo pačiu lemia ir jo panaudojimo patogumą ir pigumą.

Šiame darbe buvo tiriami greitųjų dalelių detektoriai pagaminti pagal CERN užsakymą. Tai diodinės struktūros su ant vieno paviršiaus esančiais pailgos formos kontaktais, lemiančiais erdvinę skyrą ir vienu bendru kontaktu iš priešingos pusės, vadinami STRIP detektoriais. Tyrimams buvo pasirinkti du gretimi to paties paviršiaus kontaktai, skirti nustatyti elektrinę foto srovę, keičiant šviesos pluošto energiją nuo 0,45eV iki 3,5 eV. Šis diapazonas apima Si draustinės juostos kraštą (1,12 eV) Detektoriai buvo apšvitinti greitaisiais neutronais (1MeV) iki įtėkių $1E+17$ n/cm².

Kadangi jau anksčiau buvo pastebėtas foto srovės spektrinės formos pasikeitimas priklausomai nuo elektrinio lauko, spektrai buvo matuojami su keliomis skirtingomis įtampomis (kvanto energiją didinant, o tada mažinant). Įdomu pastebėti, jog esant didžiausiam įtėkiui ($1E+17$ n/cm²) netgi stebimas srovės sumažėjimas fotožadinant tam tikrame spektriniame ruože (1 pav.). Spekto pavidalas su srovės mažėjimu ir didėjimu vietoje įsisotinimo leido daryti išvadas apie kvantinio našumo pasikeitimą bei buvo pasiūlytas dviejų bandinio sluoksnių modelis [1], leidžiantis paaiškinti stebimą efektą. Modelis įskaito tai, kad bandinio paviršiuje yra kitoks krūvininkų judris nei tūryje, nulemiantis krūvininkų gebėjimą pasiekti rekombinacijos vietas. Pasitelkiant fotosrovės matematinį ryšį su kitais medžiagos parametrais (gyvavimo trukme, judriu, paviršinės rekombinacijos greičiu) galima atlikti matematinį išraiškų priderinimą ir nustatyti tuos parametrus, bei susieti su švitinimo įtėkiu.

Esant šviesos sugerčiai virš draustinės energijos tarpo, Si foto sugerties koeficientas šiame diapazone sotinasi [2], tačiau stebima fotosrovė mažėja ir vėliau didėja. Šis reiškinys buvo susietas su kvantinės išėigos augimu dėl giliųjų radiacinių defektų jonizacijos [3]. Pastarieji siejami su defektiniais klasteriais, apibūdinamais kaip netvarkios medžiagos sritimis,

kurios kuriasi daugiausiai po švitinimo greitaisiais neutronais.



1 pav. Foto srovės spektrinės priklausomybės esant skirtingoms pridėtoms įtampoms bei dviem skirtingom eksperimento eigom (energijos didėjimo E++ ir mažėjimo E--). Kvantinio harmoninio osciliatoriaus potencinė energija ir kelios banginės funkcijos

Reikšminiai žodžiai: radiaciniai detektoriai, fotolaidumas, judris.

Literatūra

- [1] J.V.Vaitkus, et al, Lith. J. Phys. 63, 66–72 (2023).
- [2] G.G. McFarlane, J. Phys. Chem. Solids 8, 388-392 (1959).
- [3] J.V.Vaitkus, et al, J.Phys.D: Appl. Phys. 55, 395104 (2022).

Priverstinė spinduliuotė ir optinis stiprinimas InGaN dariniuose

Stimulated emission and optical gain in InGaN structures

Jūras Mickevičius, A.Širvinskytė, R.Aleksiejūnas

Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

juras.mickevicius@ff.vu.lt

Nitridiniai puslaidininkiai yra tyrinėjami jau kelis dešimtmečius, siekiant pritaikyti juos fotoninių prietaisų – šviestukų ir lazerių – gamyboje. InGaN/GaN kvantinių duobių panaudojimas aktyviojoje srityje leido sukurti aukšto efektyvumo šviestukus, emituojančius mėlynoje spektro srityje, tačiau efektyvumas stipriai krenta emisijai žalioje spektro srityje. Emisijos spektro poslinkis paprastai pasiekiamas, didinant indžio kiekį InGaN lydinyje, tačiau tokie dariniai pasižymi prastesne struktūrine kokybe, didesne defektų koncentracija. Didesnis indžio kiekis taip pat lemia stipresnę vidinį elektrinį lauką bei didesnes sudėties fluktuacijas – abu šie efektai stipriai įtakoja krūvininkų pernašos ir rekombinacijos procesus. Nors nuolatinis auginimo technologijos tobulinimas leidžia gerinti kokybę, o darinių struktūros modifikavimas įgalina keisti optines savybes, vis dar yra ieškoma optimalaus auginimo sąlygų ir optinių savybių derinio.

Šiame darbe buvo tiriama priverstinės spinduliuotės parametrų koreliacija su indžio kiekiu ir/ar kvantinės duobės pločiu InGaN/GaN dariniuose. Buvo tirtos trys bandinių grupės – InGaN epitaksiniai sluoksniai su skirtingu indžio kiekiu, InGaN/GaN kvantinės duobės su skirtingu indžio kiekiu bei InGaN/GaN kvantinės duobės su skirtingo pločio duobėmis. Visi bandiniai buvo užauginti ant safyro padėklų, naudojant cheminio metalorganinio junginio nusodinimo iš garų fazės (MOCVD) technologiją. Bandiniai buvo charakterizuojami, naudojant fotoluminescencijos (FL) metodiką, matavimus atliekant plačiame sužadinių intervale. Optinis stiprinimas buvo tiriamas, naudojant kintamo juostelės ilgio (VSL) metodiką. Visi matavimai buvo atliekami kambario temperatūroje.

Tirtų InGaN/GaN darinių FL spektrai, išmatuoti žemo sužadimo sąlygomis, apėmė plačią spektrinę sritį nuo 380 iki 520 nm – didinant indžio kiekį darinyje, FL juosta slinko į ilgabangę pusę bei plėtėsi, atspindėdama augantį lokalizuotų krūvininkų rekombinacijos indėlį. Didinant sužadimą, bandinių FL spektrai slinko į trumpabangę pusę, o viršijus tam tikrą sužadimą (priverstinės spinduliuotės slenkstį), spektre atsirado antra juosta, atspindinti priverstinius šuolius. Dariniuose su mažu indžio kiekiu antroji juosta atsirado ant ilgabangio pagrindinės FL juostos šlaito, tuo tarpu dariniuose su dideliu indžio kiekiu – ant trumpabangio šlaito. Toks priverstinės spinduliuotės juostos padėties pasikeitimas atsiranda dėl augančios krūvininkų lokalizacijos įtakos.

Gauti rezultatai atskleidė, jog priverstinės spinduliuotės slenkstis mažėja, didinant indžio kiekį iki

10-12% tiek kvantinėse duobėse, tiek epitaksinuose sluoksniuose – dominuoja teigiama krūvininkų lokalizacijos, kuri apsaugo krūvininkus nuo nespindulinės rekombinacijos centrų, įtaka. Tolimesnis indžio kiekio didinimas lemia vis prastesnę darinio kokybę, kurios nebeatsveria krūvininkų lokalizacija, ir priverstinės spinduliuotės slenkstis auga. Kvantinių duobių dariniuose slenkščio augimą galima sulėtinti, didinant duobės plotį – geresnis elektrono ir skylės banginių funkcijų persiklojimas lemia didesnę optinį stiprinimą bei mažesnę priverstinės spinduliuotės slenkstį. Tuo tarpu, epitaksinuose sluoksniuose slenkstis išauga tiek, kad priverstinės spinduliuotės nesimato net ir prie aukščiausių eksperimentuose naudotų sužadinių.

Reikšminiai žodžiai: InGaN, fotoluminescencija, priverstinė spinduliuotė, optinis stiprinimas

XDraw algoritmo taikymai difrakcijos modeliavimui naudojant 3D vektorinius pastatų duomenis

Applications of XDraw algorithm for diffraction modeling using 3D vector building data

Rimvydas Aleksiejūnas¹, Karolis Stankevičius¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

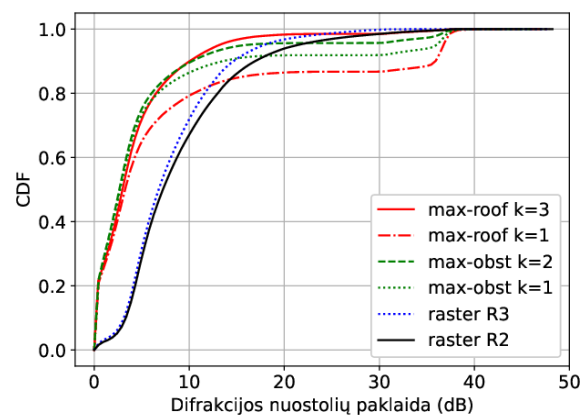
karolis.stankevicius@ff.vu.lt

Naujos kartos belaidžio judriojo ryšio tinklai diegiami aukštesniuose gigahercų dažniuose, artimuose submilimetrinėms bangoms. Populiariausia 5G tinklų dažnių juosta yra 3,5 GHz, tačiau planuojama naudoti 26 arba 28 GHz ir aukštesnes dažnių juostas. Aukštesni radijo dažniai lemia papildomus difrakcijos nuostolius, ypač tankiai apstatytose miestų teritorijose. Tikslus difrakcijos nuostolių prognozavimas yra svarbus belaidžio tinklo planavimui ir optimizavimui. Iki šiol korinio ryšio aprėpties prognozavimui dažniausiai buvo naudojami rastriniai pastatų stogų aukščio duomenys, kurių skiriamoji geba yra iki vieno metro [1]. Skaitmeniniam difrakcijos nuostolių įvertinimui, kai naudojami rastriniai kliūčių aukščio duomenys, taikomi greiti apytiksliai algoritmai, tokie kaip XDraw ir įvairios jo realizacijos [2]. Šiuo metu daug susidomėjimo sulaukia vektoriniai 3D miestų modeliai, pasižymintys submetrinio detalumu. Tačiau vektorinių duomenų analizės algoritmai yra lėti ir nėra veiksmingų greitų skaitinių metodų.

Šio darbo tikslas – sukurti greitą skaitmeninį difrakcijos algoritmą, kuris veiktų su didelio tikslumo vektoriniais 3D pastatų duomenimis. Tai turėtų leisti pasiekti didesnę radijo bangų nuostolių įvertinimo tikslumą, lyginant su rastriniais skaičiavimais. Siūlomame modelyje difrakcijos nuostoliai apskaičiuojami pagal ITU-R P.526 rekomenduojamą modelį. Metodas pagrįstas atstumu tarp aukščiausios kliūtės radijo bangų kelyje ir radijo spindulio centro linijos nustatymu. Šis atstumas vėliau naudojamas Frenelio difrakcijos integralui apskaičiuoti, kuris parodo difrakcijos nuostolius dėl kliūčių išilgai kelio. Difrakcijos nuostolius galima toliau tikslinti lyginant su sklaidimo modeliais kalibruotais pagal matavimo rezultatus, pavyzdžiui, Hata tipo modeliais.

Siūlomas algoritmas sukurtas remiantis rastrinio XDraw metodo principais [2], tačiau sklaidimo geometrijai aprašyti naudojami vektoriniai pastatų duomenys. XDraw yra $O(N^2)$ algoritmas, analizuojantis sklaidimą žiedais, pradėdant nuo antenos taško ir tolstant link analizuojamos srities kraštų. Analizės sritis padalijama į vienodai nutolusius kvadratinis tinklelio elementus, kurių kiekvienas aplankomas tik vieną kartą. Kiekviename kvadrate randami radijo spindulių susikirtimai su esamais pastatais, įvertinama difrakcija ir pridedami anksčiau aplankyti taškai, esančių arčiau antenos, difrakcijos rezultatai. Siūlomi du anksčiau apskaičiuotų taškų aproksimacijos būdai: aukščiausios kliūtės (*max-obst*) ir aukščiausio stogo (*max-roof*) difrakcijos nuostolių metodai.

Difrakcijos nuostoliai apskaičiuoti 600 m spinduliu aplink bazinės stoties anteną 900 MHz dažnyje naudojant pastatų duomenis iš Amsterdamo miesto 3D BAG [3] atvirų duomenų rinkinio yra pateikti 1 pav. Čia pavaizduotas skirtumas tarp geometriškai tikslaus ir aproksimuotų modelių.



1 pav. Difrakcijos nuostolių įvertinimo paklaidos kumuliatyvinė pasiskirstymo funkcija (CDF) naudojant vektorinius (*max-roof*, *max-obst*) ir rastrinius (*raster*) aproksimacijos metodus

Mažiausia aproksimacijos paklaida gaunama taikant XDraw metodą *max-roof*, kai į analizę yra įtraukiamos bent $k = 3$ ankstesnės kliūtys. Toliau didinant k , šio algoritmo tikslumas reikšmingai nepagerėja. Vektoriniai XDraw algoritmai yra lėtesni už rastrinius, tačiau juos galima lygiagretinti ir taip padidinti greitaveiką. Geriausi lygiagretinimo rezultatai Python aplinkoje pasiekiami naudojant nepriklausomais CPU procesais pagrįstas *multiprocessing* bibliotekas. Gauti rezultatai rodo vektorinių XDraw algoritmų pranašumą, leidžiantį pasiekti aukštesnį tikslumą dėl mažesnio geometrinės informacijos praradimo, lyginant su rastriniais XDraw algoritmais, kai pastatų aukščio duomenų apdorojimui pagreitinti taikomos $O(N^2)$ tipo aproksimacijos.

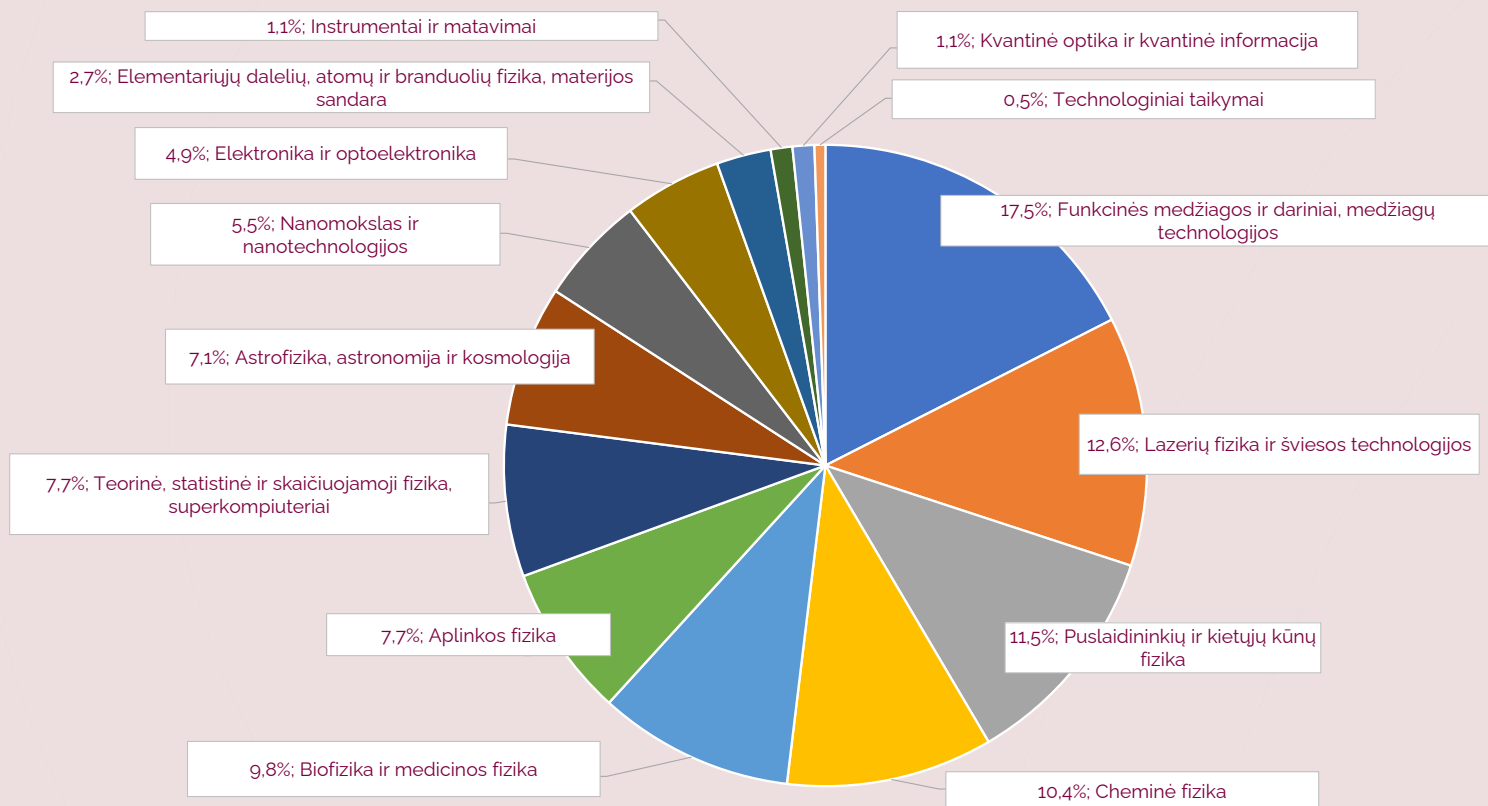
Reikšminiai žodžiai: difrakcijos nuostoliai, XDraw algoritmas, 3D vektoriniai pastatų duomenys, ITU-R P.526 modelis, aprėpties analizė.

Literatūra

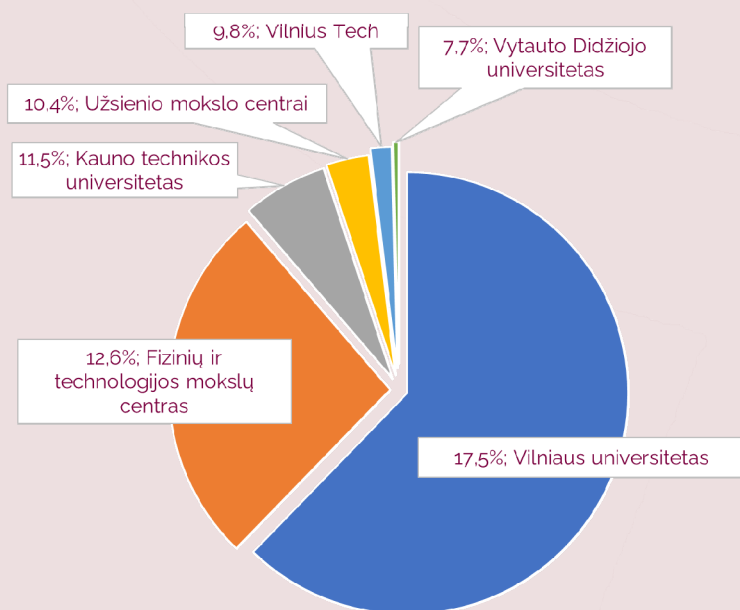
- [1] A. Colpaert, Vinogradov and S. Pollin, *Sensors* **18**, 4311 (2018).
- [2] J. Zhang, S. Zhao and Z. Ye, *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens* **14**, 2017–2029 (2021).
- [3] R. Peters, B. Dukai, S. Vitalis, J. van Liempt, and J. Stoter, *Photogramm Eng & Rem Sens* **88**, 165–170 (2022).

Apie konferenciją skaičiais

PRANEŠIMŲ PASISKIRSTYMAS PAGAL TEMAS



PRANEŠIMŲ PASISKIRSTYMAS PAGAL MOKSLO ĮSTAIGAS



DALYVIŲ PASISKIRSTYMAS

Virš 320 dalyvių,
250 pranešimų

