44-oji

Lietuvos Nacionalinė Fizikos Konferencija

2021 m. spalio 6 - 8 d., Vilnius

Lietuvos mokslo premijos laureatai
Pasaulio lietuvių mokslo premijos laureatai
Žymūs Lietuvos ir užsienio mokslininkai

Speciali sesija „Fizika ir aukštųjų technologijų pramonė"

http://lnfk.ftmc.lt

PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS

Fizinių ir technologijos mokslų centras · Vilniaus universitetas · ktu kauno technologijos universitetas · Vilnius Tech Vilniaus Gedimino technikos universitetas · Lithuaniae Academia Scientiarum

Konferenciją remia:

EPS Young Minds · BROLIS · inospectra · MONO SPEKTRA · 3photon · Lietuvos lazerių asociacija · Light Conversion · EKSPLA · QS LASERS · VILDoma · TELTONIKA · Science and Technology Park

Draugai: Go Vilnius

Konferencijos data:
2021 m. spalio 6-8 d.

Konferencijos vieta:
Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras
Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

Konferencijos pirmininkas:
Juozas Vidmantis Vaitkus (LFD prezidentas)

Programos komitetas:
Gintaras Valušis (pirmininkas)
Irmantas Kašalynas
Gediminas Račiukaitis
Vidmantas Remeikis
Vladas Vansevičius
Petras Balkevičius
Rigonda Skorulskienė
Giedrius Laukaitis
Sigitas Tamulevičius
Saulius Mickevičius
Romualda Lazauskaitė
Artūras Jukna
Aurelijus Rinkevičius
Darius Abramavičius
Kristijonas Genevičius
Justinas Čeponkus
Jevgenij Chmeliov
Saulius Antanas Juršėnas
Gintautas Tamulaitis
Juozas Vidmantis Vaitkus
Ramūnas Aleksiejūnas
Audrius Dubietis
Algis Petras Piskarskas
Ričardas Rotomskis
Valdas Sirutkaitis
Jūras Banys
Robertas Grigalaitis
Šarūnas Svirskas
Gediminas Gaigalas
Valdas Jonauskas
Andrius Juodagalvis
Gediminas Juzeliūnas
Aušra Kynienė
Gražina Tautvaišienė

Organizacinis komitetas:
Gintaras Valušis
Renata Butkutė
Renata Karpič
Kristina Plauškaitė-Šukienė
Marius Vinciūnas
Milda Tamošiūnaitė
Domas Jokubauskis
Mažena Mackoit Sinkevičienė
Linas Galkauskas

http://lnfk.ftmc.lt

Leidinyje panaudotos D. Jokubauskio, Hernandez-Sorokina ir E. Blaževič nuotraukos

44-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija : pranešimų medžiaga, 2021 m. spalio 6–8 d., Vilnius
ISBN 978-609-95511-8-0

© Fizinių ir technologijos mokslų centras, 2021
© Lietuvos fizikų draugija, 2021
© Vilniaus universitetas, 2021
© Kauno technologijos universitetas, 2021
© Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2021
© Lietuvos mokslų akademija, 2021

TURINYS

ĮŽANGINIS ŽODIS	4
JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ PRANEŠIMŲ KONKURSO LAUREATAI	5
STATISTIKA	6
PROGRAMA	7
PLENARINIAI PRANEŠIMAI	13
KVIESTINIAI PRANEŠIMAI	20
ŽODINIAI PRANEŠIMAI (O1-O18)	34
SPECIALI SESIJA (O19-O22)	53
LIETUVOS FIZIKŲ DRAUGIJOS VEIKLŲ APŽVALGA	58
DISKUSIJA	60
KONCERTAS	61
ŽODINIAI PRANEŠIMAI (O23-O61)	62
STENDINIAI PRANEŠIMAI (P1-P170)	102
AUTORIŲ RODYKLĖ	274
BAIGIAMASIS ŽODIS	284

ĮŽANGINIS ŽODIS

Ši 44-oji Lietuvos nacionalinė fizikų konferencija buvo kitokia nei ankstesnės.

Jos formato išskirtinumą padiktavo jau daugiau kaip pusantrų metų besitęsianti pandemija: nors konferencija ir vyko „gyvai" – nes visi jau pasiilgę tikro ir gyvo bendravimo – pranešimai buvo papildomai transliuojami internetu stengiantis riboti dalyvių srautus ir tuo pačiu išlaikyti kiek įmanoma platesnę auditoriją.

Nors ir įprastinis darbo ritmas laboratorijose per pastaruosius metus buvo apsunkintas karantino reikalavimų, moksliniai kontaktai didžiąja dalimi buvo persikėlę į virtualią erdvę, o ir kelionių į konferencijas bei stažuočių beveik nebuvo, vis tik mokslinis darbas šalies fizikos pasaulyje nebuvo sustojęs – netrūko ir išskirtinių mokslinių rezultatų, ir technologinių proveržių, ir veržlių projektų... Pamatėme ir bendrai ženkliai išaugusį mokslo lygį ir kylantį jo tarptautinį matomumą: tyrėjų rezultatai spausdinami aukščiausio lygio tarptautiniuose moksliniuose žurnaluose, puikuojasi ant įtakingų mokslinių žurnalų viršelių; sukurtos technologijos diegiamos įmonėse arba tampa naujų didelės pridedamosios vertės verslų pagrindu.

Renginys buvo susietas su keletu itin svarbių mokslo įvykių – šiemet sukako 100 metų, kai buvo atkurtas fizikos mokslo dėstymas Lietuvoje, Vilniaus bei Kauno universitetuose, taip pat buvo minimas žymaus branduolinės fizikos atstovo, disidento ir žmogaus teisių aktyvisto Nobelio taikos premijos laureato Andrejaus Sacharovo šimtmečio jubiliejus.

Konferencija išsiskyrė dalyvių gausa – jų buvo daugiau nei 580, iš jų – net 185 – fizikos mokytojai; didžiausias mokslininkų delegacijos buvo iš Vilniaus universiteto 169 ir Fizinių ir technologijos mokslų centro - 123. Konferencija džiugino itin gausiu jaunimo būriu – studentų, doktorantų ir jaunųjų mokslininkų čia buvo net 166.

Konferencijoje buvo perskaityti 6 plenariniai, 13 kviestinių ir 61 žodinis pranešimas; dviejose stendinėse sesijose pristatyta 170 pranešimų, o tiesioginė transliacija internetu truko virš 30 h. Svarbu dar ir tai, jog apie 75 proc. žodinių pranešimų šiame renginyje skaitė doktorantai. Džiugino jų entuziazmas ir aistra mokslui, noras pažinti, suprasti, kurti ir gautus rezultatus praktikoje įdiegti.

Smagu, kad turime Talentų, pasirenkančių fiziką ir technologijos mokslus bei esame dėkingi rėmėjams, kurių parama leido surengti LNFK 44 ir įsteigti apdovanojimus jauniesiems mokslininkams. Tai buvo pirmą kartą Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijos istorijoje surengtas geriausių Jaunųjų mokslininkų pranešimų konkursas. Pranešimus vertino kompetetinga komisija: akad. prof. Vidmantas Gulbinas, pirmininkas (FTMC), JMA akad. Linas Minkevičius (FTMC), prof. Mikas Vengris (VU), JMA akad. Jevgenij Chmeliov (VU), LFD Valdybos narė dr. Mažena-Mackoit-Sinkevičienė (VU/FTMC), JMA akad. prof. Tomas Tamulevičius (KTU), prof. Artūras Jukna (VGTU).

Man yra gera pristatyti šį elektroninį konferencijos tezių rinkinį, kuris apima ne tik mokslinių pranešimų turinį, bet ir dokumentiškai perteikia konferencijos nuotaikas bei ryškiausius jos momentus.

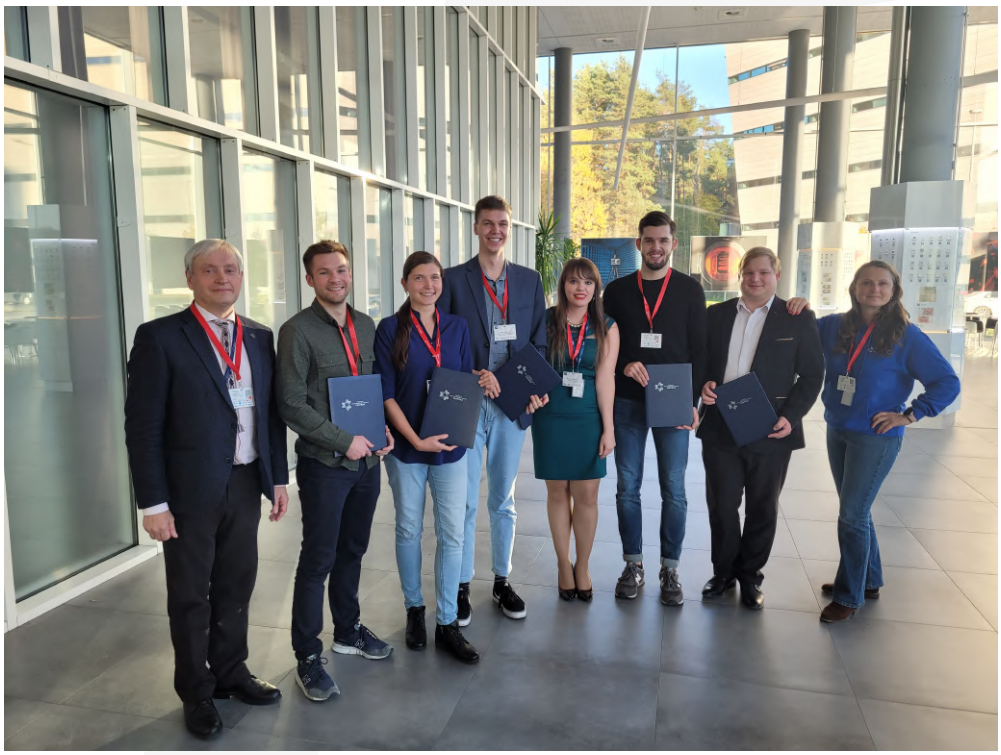
Gintaras Valušis,
LNFK 44 Programos komiteto pirmininkas

JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ PRANEŠIMŲ KONKURSO LAUREATAI

Didysis prizas, įsteigtas **„Teltonika IOT Group”:**
Dovydas Banevičius (VU)
„Trečios kartos organinių šviestukų veikimo parametrų gerinimas įvedant smulkius emiterio struktūros pakeitimus”

„EPS Young Minds” prizais apdovanoti:
Lina Grinevičiūtė (FTMC)
„Periodiškai nanostruktūrizuotos optinės dangos, skirtos lazerio šviesos valdymui”
Lukas Naimovičius (VU)
„Ciano grupėmis modifikuotų rubrenų taikymas NIR fotonų konversijai į regimąją sritį”

„Brolis Group” prizais įvertinti:
Vladislovas Čižas (FTMC)
„Kaitinami metapaviršių emiteriai, skirti THz/sub-THz dažnių ruožui”
Edvinas Radiunas (VU)
„NIR fotonų konversija į matomą sritį: technologija leidžianti gauti našius rubreno sluoksnius“

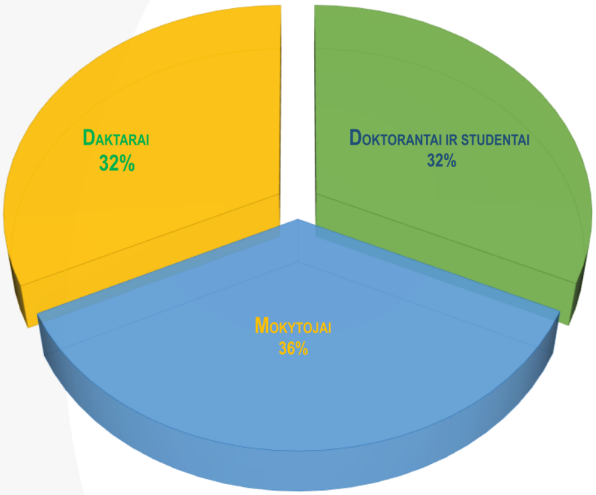


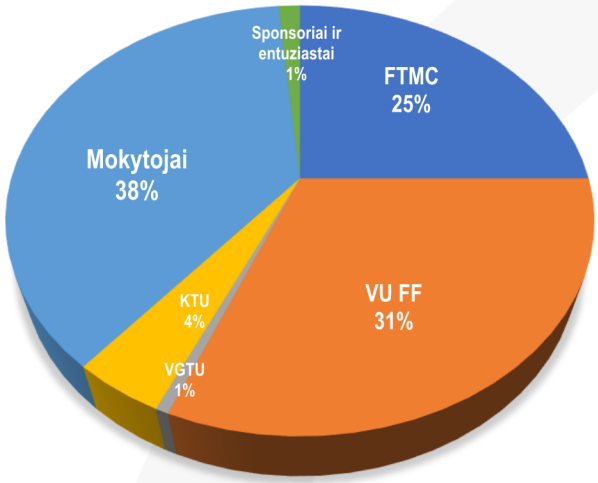
Nuotrauka D. Jokubauskio (FTMC)

http://lnfk.ftmc.lt

Dalyviai

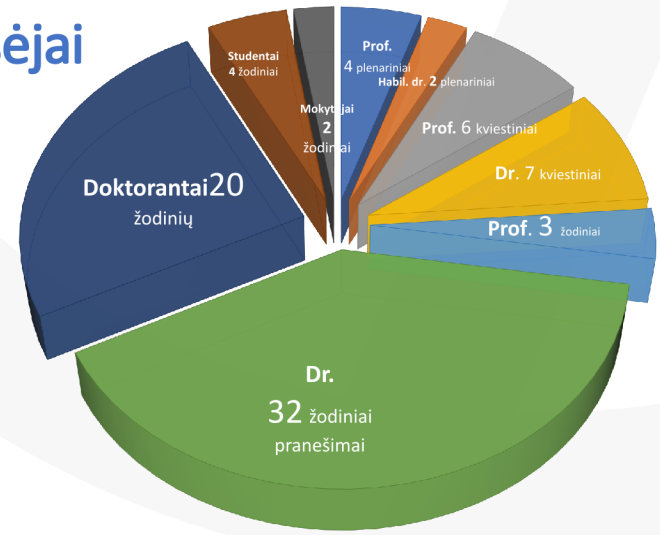
virš 580 registruotų dalyvių

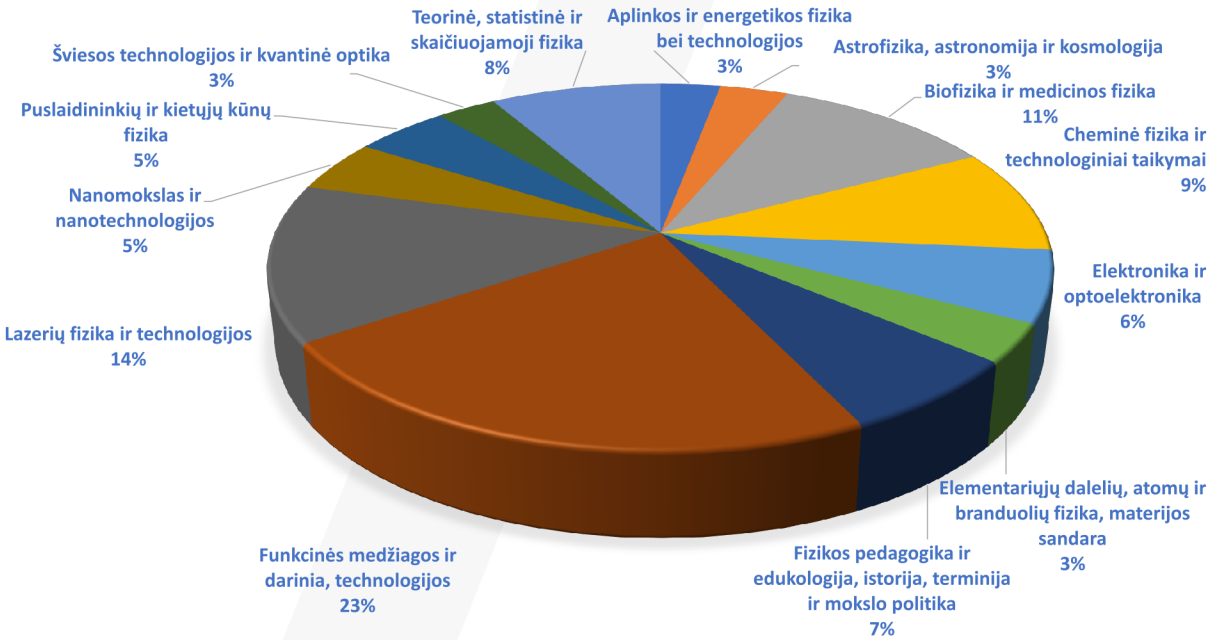




ŠIEK TIEK STATISTIKOS

Pranešėjai





Mokslinės tematikos

http://lnfk.ftmc.lt

Programa

Spalio 6 d., trečiadienis							
8:00	**A101**	**Registracija**					
9:00-9:15	**A101**	**Atidarymas. Sveikinimo žodis. LFD prezidentas Juozas Vidmantis Vaitkus, LMA prezidentas Jūras Banys, konferencijos pirmininkas Gintaras Valušis**					
	A101	**Plenariniai pranešimai. Pirmininkas Gintaras Valušis**					
9:15-10:00	P1	**Gediminas Račiukaitis**	Nuo intensyvaus sužadinimo šviesa fizikos iki lazerinių technologijų				
10:00-10:45	P2	**Kęstutis Staliūnas**	Turbulence control by dynamic non-Hermitian potentials				
10:45-11:05	***Kavos pertraukėlė***						
	A101	**Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas Audrius Dubietis**					
11:05-12:35	K1	**Saulius Juršėnas**	Termiškai aktyvuotos uždelstosios fluorescencijos spinduolių raida				
	K2	**Gediminas Niaura**	Elektrocheminė Ramano spektroskopija				
	K3	**Egidijus Auksorius**	Ultraspartus ir aukštos rezoliucijos akies vaizdinimas su pilnojo lauko optine koherentine tomografija				
12:35-13:30	***Pietų pertrauka + nuotolinė stendinių pranešimų sesija (Zoom)***						
13:30-14:30	**A101**	**Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas Leonas Valkūnas**					
	K4	**Jevgenij Chmeliov**	Sužadinimo energijos dinamika fotosintetiniuose šviesorankos kompleksuose				
	K5	**Paulius Gečys**	Asimetrinio Beselio pluošto taikymai skaidrių terpių apdirbimui				
	Paralelinės sesijos						
14:35-15:35	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Ričardas Rotomskis**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Gediminas Juzeliūnas**	
nuotolinis	O1	Marijus Plečkaitis	TPPS4 molekulinių nanostruktūrų saviorganizacija į didelius „jūros ežių“ tipo agregatus		O5	Teodora Kirova	Ultrahigh-precision Rydberg atomic localization using standing waves and optical vortices
nuotolinis	O2	Agnė Kalnaitytė	Šviesos sukelti Cd kvantinių taškų poveikiai vienaląsčių dumblių autofluorescencijai		O6	Mindaugas Mačernis	Elektroninių ir virpesinių savybių modeliavimas karotinoidams
	O3	Vilmantas Pupkis	Elektrofiziologiniai ir optiniai metodai augalų fiziologijos mįslėms įminti		O7	Augustinas Stepšys	*Ab-initio* algebrinis modelis šešių nukleonų sistemoms
	O4	Austėja Mikalčiūtė	Fotosintetinio FCP komplekso chlorofilų tarpusavio sąveikos modeliavimas		O8	Šarūnas Masys	Nekompensuotųjų ryšių modeliavimas funkcionalizuotuose nanodeimantuose
15:35-15:55	***Kavos pertraukėlė***						
15:55-17:10	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Vidmantas Gulbinas**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkė Olga Rancova**	
	O9	Šarūnas Meškinis	Tiesioginė grafeno/Si(100) heterodarinių sintezė, tyrimas ir taikymas saulės elementams		O14	Artūras Jukna	STEAM vaidmuo fizikos dalyko įsisavinimui Lietuvos vidurinėse mokyklose
	O10	Mindaugas Karaliūnas	Impulsinio tolydaus lydalo sudėties keitimo būdu užaugintų parabolinių kvantinių duobių fotoliuminescencijos tyrimas pasitelkus trupmeninio matumo erdvės modelį		O15	Vidita Urbonienė	Fizikos mokymo galimybės Vilniaus regiono STEAM atviros prieigos centre
	O11	Domantas Peckus	Įvairių formų aukso nanodalelių dinaminių plazmoninių savybių tyrimas skirtuminės sugerties spektroskopijos metodu		O16	Saulius Martinaitis	Post-kognityvinio mokymo metodo taikymas fizikos pamokose KSJMC
nuotolinis	O12	Žilvinas Rinkevičius	Teoriniai titano dioksido nanodalelių geometrinės struktūros evoliucijos tyrimai	nuotolinis	O17	Aidas Sadauskas	Mokinių žinių apie astronominius mastelius nustatymas
	O13	Tomas Daugalas	Tikslingu mechaniniu poveikiu keičiama krūvininkų pernaša vertikaliuose dariniuose su dvimačiu grafeno lakštu imobilizuotu ant metalo	nuotolinis	O18	Artūras Gavėnas	Fizikos tiesos – gyvenimo kelrodžiai
17:15-18:15	**A101**	**Speciali sesija. Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Juozas Šulskus**					
	O19	Sandra Pralgauskaitė	SPEAR projekto įgyvendinimas Vilniaus universitete Fizikos fakultete				
	O20	Dalia Šatkovskienė	Leidinio Lietuvos fizikės 2021 pristatymas				
	O21	Edmundas Kuokštis	Mokinių tarptautinės fizikos olimpiados. Lietuvos pasiekimai, problemos, ateitis				
	O22	Tanausú Hernández Yanes	EPS Young Minds projektai jauniesiems tyrėjams				
	Paralelinės sesijos						
18:30-19:00	**A101**	**Lietuvos fizikų draugijos veiklų apžvalga**			**Holas**	**Stendinė sesija 1**	
						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	
						Instrumentai ir matavimų technologijos	
						Kitos su fizika susijusios temos	
						Nanomokslas ir nanotechnologijos	
						Teorinė, statistinė ir skaičiuojamoji fizika	

Spalio 7 d., ketvirtadienis							
8:30	**A101**	**Registracija**					
	A101	**Plenariniai pranešimai. Pirmininkas Saulius Juršėnas**					
9:00-9:45	P3	**Mikas Vengris**	Medžiaga ir didelio intensyvumo lazerio spinduliuotė – praeitis, tendencijos ir ateities planai				
9:45-10:30	P4	**Vidmantas Gulbinas**	Saulės energetika, praeitis, dabartis ir perspektyvos				
10:30-10:50	***Kavos pertraukėlė***						
	A101	**Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas Gediminas Račiukaitis**					
10:50-12:50	K6	**Tomas Tamulevičius**	Fotoninių struktūrų technologijos ir praktiniai taikymai				
	K7	**Aleksandr Ovsianikov**	Multiphoton Lithography for Biomedical Applications				
	K8	**Linas Minkevičius**	Terahercinė vaizdinimo sistema, pagrįsta spinduliuotės pluoštelio formavimo metodais				
nuotolinis	K9	**Hans Kjeldsen**	Measuring detailed properties of stars and exoplanets				
12:50-13:50	***Pietų pertrauka + nuotolinė stendinių pranešimų sesija (Zoom)***						
	Paralelinės sesijos						
13:50-14:50	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Mikas Vengris**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Vladas Vansevičius**	
	O23	Darius Gailevičius	Superkolimacija panaudojant ašisimetrinę fotoniką		O27	Gražina Tautvaišienė	Kamuolinių žvaigždžių spiečių evoliucijos įvairovė
	O24	Robertas Grigutis	Kūginės trečiosios harmonikos generacija dėl didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniais lazerio impulsais indukuotų tūrinių nanogardelių skaidriuose dielektrikuose		O28	Kastytis Zubovas	Galaktikų aktyvumo istorijos atkūrimas pasitelkiant neuroninius tinklus
	O25	Sergejus Orlovas	Optinės adatos generavimas geometrinės fazės elementais esant netobulom sąlygoms	nuotolinis	O29	Carlos Viscasillas Vázquez	Abundances of neutron capture elements in revealing the evolution of the Galactic disc
	O26	Erikas Atkočaitis	Ar egzistuoja Moore'o dėsnis optiniam atsparumui?		O30	Matas Tartėnas	Juodųjų skylių akrecijos ir grįžtamojo ryšio skaitmeninio modeliavimo tobulinimas
14:50-15:10	***Kavos pertraukėlė***						
15:10-16:40	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Kristijonas Genevičius**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Andrius Juodagalvis**	
	O31	Karolis Kazlauskas	Fotonų konversijos našumo didinimas sluoksniuose apjungiant medžiagų gryninimo bei gamybos iš lydalo metodą		O37	Aleksas Mazeliauskas	Partonų sklaidos atradimas lengvųjų jonų susidūrimuose
	O32	Edvinas Radiunas	NIR fotonų konversija į matomą sritį: technologija leidžianti gauti našius rubreno sluoksnius		O38	Vytautas Dūdėnas	Lengvas svertinis neutrinas Grimus-Neufeld modelyje
	O33	Lukas Naimovičius	Ciano grupėmis modifikuotų rubrenų taikymas NIR fotonų konversijai į regimąją sritį		O39	Simonas Draukšas	Apie Fermionų Masių, Laukų ir Maišymosi Matricų Pernormavimą ant Masės Apvalko ties 1-kilpa
	O34	Dovydas Banevičius	Trečios kartos organinių šviestukų veikimo parametrų gerinimas įvedant smulkius emiterio struktūros pakeitimus		O40	Marijus Ambrozas	Foninių procesų su netikrais leptonais įvertinimas Drell-Yan proceso diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavime
	O35	Tomas Serevičius	Konformacinės netvarkos sąlygoti emisijos reiškiniai kietuosiuose TADF junginių sluoksniuose				
	O36	Paulius Baronas	Spiralinės orbitalės ir sukinio-orbitos sąveika paprastose angliavandenilio molekulėse				
16:45-17:00	**A101**	**Geriausių pranešimų konkurso darbų pristatymas**					
	Paralelinės sesijos						
17:30-18:45	**A101**	**Diskusija Fizika ir aukštųjų technologijų pramonė – iššūkiai, galimybės, politika. Moderuoja Gintaras Valušis**		17:00-18:45	**Holas**	**Stendinė sesija 2**	
						Aplinkos ir energetikos fizika bei technologijos	
						Elektronika ir optoelektronika	
						Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos	
						Šviesos technologijos ir kvantinė optika	
						Lazerių fizika ir technologijos	
						Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika	
19:00 – 19:50	**A101**	**Koncertas ElectroBrass – speciali programa**					
20:00 – 21:00	**Holas**	***Fizikų vakaronė***					

Spalio 8 d., penktadienis							
8:30	**A101**	**Registracija**					
	A101	**Plenariniai pranešimai. Pirmininkas Juozas Vidmantis Vaitkus**					
9:00-9:45	P5	**Romualdas Karazija**	Įžymaus fiziko, Nobelio taikos premijos laureato Andrejaus Sacharovo šimtmetis				
9:45-10:30	P6	**Liudvikas Kimtys**	Fizika Stepono Batoro universitete				
10:30-11:00	K10	**Judita Puišo**	Fizikai Kaune tik šimtas?				
11:00-11:20	***Kavos pertraukėlė***						
11:20-12:50	**A101**	**Kviestiniai pranešimai. Pirmininkas Tomas Tamulevičius**					
	K11	**Mantas Šimėnas**	Struktūriniai faziniai virsmai ir dinaminiai efektai hibridinėse medžiagose				
	K12	**Sigitas Tamulevičius**	Dvimatės tauriųjų metalų nanostruktūros optiniams taikymams				
	K13	**Vytautas Getautis**	Organiniai fotopuslaidininkiai naujos kartos saulės elementams: nuo idėjos link komercializavimo				
12:50-13:45	***Pietų pertrauka***						
	Paralelinės sesijos						
13:45-15:15	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Sigitas Tamulevičius**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Vidmantas Remeikis**	
	O41	Gintautas Tamulaitis	Spartūs scintiliaciniai detektoriai būsimiems CERN aukštų energijų fizikos eksperimentams ir medicininei vaizdinimo įrangai		O47	Kamilė Kandrotaitė	Medžiaginių kaukių filtravimo efektyvumo nustatymas
	O42	Kęstutis Ikamas	Kompaktiški Si ir SiGe KMOP elektroniniai šaltiniai taikymams 250-400 GHz dažnių srityje		O48	Agnė Minderytė	Taršos aerozolio juodąja anglimi lygio nustatymas pėstiesiems ir dviratininkams skirtose vietose Vilniaus mieste
	O43	Ignas Grigelionis	Titano mikrobolometrų taikymas terahercinėje spektroskopijoje su laikine skyra		O49	Rita Plukienė	Branduolinių reaktorių metalinių radiaktyviųjų atliekų charakterizavimas ir klasifikavimas PREDIS projekte
	O44	Vladislovas Čižas	Kaitinami metapaviršių emiteriai, skirti THz/sub-THz dažnių ruožui		O50	Jevgenij Garankin	Dirbtinio neuroninio tinklo naudojimas neutronų ir gama jonizuojančiosios spinduliuotės atskyrimui organiniame scintiliaciniame detektoriuje
	O45	Patrik Ščajev	IR jautrio pagerinimas GeSn fotodioduose lazerinio atkaitinimo pagalba				
	O46	Lina Grinevičiūtė	Periodiškai nanostruktūrizuotos optinės dangos, skirtos lazerio šviesos valdymui				
15:15-15:35	***Kavos pertraukėlė***						
15:35-17:05	**A101**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Gintautas Tamulaitis**			**D401**	**Žodiniai pranešimai. Pirmininkas Jūras Banys**	
	O51	Ramūnas Aleksiejūnas	Krūvininkų difuzijos įtaka InGaN darinių kvantiniam našumui		O57	Aivaras Kazakevičius	1 mJ, 10 W, 10 kHz subpikosekundinis hibridinis lazeris
	O52	Irmantas Kašalynas	Puslaidininkinės GaN struktūros teraherciniam ir infraraudonajam spektro ruožams		O58	Matas Plūkys	Modos mikrolustiniame lazeryje
	O53	Akvilė Zabiliūtė-Karaliūnė	Lazerinių diodų fosforinių keitiklių šiluminio gesinimo slopinimas panaudojant hBN daleles		O59	Edvinas Skliutas	3D lazerinė litografija: priklausomybė nuo bangos ilgio
	O54	Evelina Dudutienė	Aukštos optinės kokybės GaAsBi/GaAs kvantinių duobių fotoliuminescencijos tyrimas	nuotolinis	O60	Viktorija Tamulienė	Kūginė terahercų spinduliuotė žadinama bichromatiniais lazerio impulsais oro plazmoje: kūgio kampo įvertinimas
	O55	Ričardas Norkus	Balistinių fotosrovių sukelta teraherciniu impulsų emisija iš puslaidininkinių heterosandūrų		O61	Agnė Butkutė	Aukšto matmenų santykio 3D stiklinių darinių gamyba selektyvaus lazerinio ėsdinimo technogija
	O56	Karolina Maleckaitė	Raudonai fluorescuojantis klampai jautrus BODIPY fluoroforas				
17:10	**A101**	**UŽDARYMAS. Apdovanojimai. Baigiamasis žodis. Programos komiteto pirmininkas Gintaras Valušis**					

Stendinės sesijos

		Stendinė sesija 1	**Spalio 6 d.** 18:30-19:00
		Dalyviai	***Astrofizika, astronomija ir kosmologija***
	P1	Romas Kisielius	Atominių duomenų įvertinimas taikant astrofizikinius modelius ir astronominius stebėjimus
	P2	Karolis Daugevičius	Stochastiniai efektai žvaigždžių spiečiuose
	P3	Martynas Laužikas	Aktyvių galaktikų kuriamų tėkmių poveikis molekuliniams debesims
	P4	Eimantas Kriščiūnas	Andromedos galaktikos žvaigždžių spiečiai
			Biofizika ir medicinos fizika
	P5	Juras Kišonas	Ūminio Spindulinio dermatito predikcija ir ankstyva diagnostika panaudojant konfokalią atspindžio mikroskopiją
	P6	Algirdas Toleikis	Susukti DNR ir pamatuoti kinezino generuojamą jėgą – pavienių biomolekulių mechaninės savybės
	P7	Saulius Satkauskas	Kalcio jonų įtaka molekulių pernašai pro plazminę membraną ir ląstelių gyvybingumui po ląstelių elektroporacijos
nuotolinis	P8	Diana Adlienė	Gelinės dozimetrijos taikymai spindulinėje terapijoje
nuotolinis	P9	Džiugilė Valiukevičiūtė	Dozimetrinių plėvelių su metalų druskomis kūrimas bei panaudojimo mažų dozių dozimetrijoje tyrimas
	P10	Lena Golubewa	Interaction of green fluorescent graphene quantum dots with human platelets
	P11	Wanessa Melo	Elektroporacijos ir fotodinaminės terapijos poveikis Staphylococcus aureus bioplėvelės matricai
	P12	Rimantė Bandzevičiūtė	Šviesolaidinės ATR IR spektroskopijos taikymas kasos vėžinių audinių tyrimui
nuotolinis	P13	Danielis Rutkauskas	Plataus lauko antros harmonikos generacijos mikroskopija, skirta fibrozės progresavimo analizei esant arterinei plaučių hipertenzijai
	P14	Gerda Anužienė	Patogeninių mikroorganizmų identifikavimas ATR IR spektriniu metodu
	P15	Justė Tamošiūnaitė	Koncentracinio gesinimo matavimai plonose cinko ftalocianino plėvelėse
	P16	Gintarė Dalmantaitė	Naudingų junginių ekstrakcija iš akvakultūros nuotekose kultivuojamų mikrodumblių naudojant didelio stiprio impulsinio elektrinio lauko poveikį
	P17	Gediminas Trinkūnas	Sustiprinto sužadinimų gaudimo LH1-RC-PufX klasteriuose fenomenologija
	P18	Kornelija Buivydaitė	Aukso nanoklasterių, stabilizuotų JSA, susikaupimo efektyvumas ląstelėse
	P19	Aušrinė Navickaitė	Nitellopsis obtusa pH juostų tyrimas fluorescencinės spektroskopijos metodu
	P20	Rokas Mickus	Baltymų kinazių įtaka plyšinių jungčių jautrumui farmakologinėmis medžiagomis
	P21	Alėja Marija Daugėlaitė	Aukštynkeičių nanodalelių ir mezenchiminių kamieninių ląstelių sinergija: tikslinės navikų teranostikos link
	P22	Greta Jarockytė	Kraujo plazmos baltymais stabilizuoti aukso nanoklasteriai personalizuotai navikų teranostikai
	P23	Džiugas Jurgutis	Molekulinio rotoriaus BODIPY-h taikymas mikroklampos nustatymui žmogaus odos mezenchiminėse kamieninėse ląstelėse ir jų diferencijuotose kultūrose
	P24	Evelina Voronovič	Baltymų vainiko įtaka apkonvertuojančių nanodalelių kaupimuisi ląstelėse
	P24/1	Kirill Skovorodko	Klinikinio kaulų scintigrafijos protokolo optimizavimas ir vaizdų kvantifikavimas
			Cheminė fizika ir technologiniai taikymai
	P25	Dovilė Lengvinaitė	Joninių skysčių ir jų mišinių BMR spektrai: įžvalgos iš KM/MD skaičiavimų
	P26	Teodora Kirova	Theoretical and numerical studies of the impact of the magnetic field of radiation on amino acids
	P27	Egidijus Kamarauskas	Skersaryšintų arilpakeistų fluoreno darinių krūvio pernašos savybės
	P28	Oskaras Balkus	Likopeno molekulinių struktūrų ir spektrų modeliavimas tankio funkcionalų metodais superkompiuteriu (1)
	P29	Laurynas Diska	Likopeno molekulinių struktūrų ir spektrų modeliavimas tankio funkcionalų metodais superkompiuteriu (2)
	P30	Rasa Platakytė	Struktūrinė acetilsalicilo rūgšties ir jos šiluminės disociacijos produktų analizė pasinaudojant žemos temperatūros virpesine spektroskopija
nuotolinis	P31	Kristina Zakutauskaite	Heliobakterijos reakcinio centro pigmentų sužadinimo energijų modeliavimas naudojant elektrostatinį modelį
nuotolinis	P32	Joanna Stocka	1-chloromethyl-1-fluorosilacyclohexane conformations and its rearrangements analysis by means of computational and vibrational study
	P33	Ieva Neimantaitė	XIX a. ikonų gruntinio sluoksnio kiekybinė analizė taikant Ramano mikrospektroskopijos metodą
	P34	Gediminas Kreiza	Mėlyni karbazolo-naftiridino spinduoliai našiems organiniams TADF šviestukams
	P35	Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė	Šviesolaidinė paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos (SERS) spektrų registravimo sistema
	P36	Vidmantas Kalendra	Cinko-bakteriochlorofilo A' sąveikos tyrimai Chloroacidobacterium thermophilum reakcijų centruose naudojant EPR spektroskopiją
	P37	Laurynas Butkus	Naujas metodas itin mažai anglies turinčių medžiagų grafitizavimui su automatizuota grafitizavimo sistema AGE-3
	P38	Gabrielė Rankelytė	Netiesinės singuletų anihiliacijos modeliavimas molekulinėje gardelėje
	P39	Laima Kazakevičiūtė-Jakučiūnienė	137Cs ir 239,240Pu aktyvumo koncentracijų pasiskirstymo sausų bei pelkėtų dirvožemių vertikaliuose profiliuose tyrimas
	P40	Sandra Barysaitė	Koncentracinio gesimo modeliavimas dvimatėse sistemose
	P41	Edvardas Kazakevičius	Relaksacijos trukmių pasiskirstymu paremta pilnutinės varžos spektrų analizė
	P42	Jelena Tamuliene	Metodo įvertinti nitroaromatinių junginių standartinį vienelektroninės redukcijos potencialą vandeninėje terpėje modifikacija
			Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara
	P43	Thomas Gajdosik	News from the Grimus-Neufeld model
nuotolinis	P44	Algirdas Deveikis	Kvadrupolinis operatorius ortogonalioje Bargmann-Moshinsky SU(3) grupės bazėje
	P45	Pavel Rynkun	Ce3+ jono energijos spektro ir radiacinių šuolių teorinis tyrimas
			Fizikos pedagogika ir edukologija, istorija, terminija ir mokslo politika
	P46	Saulius Martinaitis	Post-kognityvinio mokymo metodo taikymas fizikos pamokose KSJMC
	P47	Arturas Jukna	STEAM – metodas ugdyti ir tobulinti mokinių gebėjimus fizikos srityje
	P48	Edita Palaimienė	Nuotolinio mokymo galimybių tyrimas fizikos pamokose
			Instrumentai ir matavimų technologijos. Kitos su fizika susijusios temos
	P49	Gediminas Usevičius	Struktūrinių fazinių virsmų hibridiniuose perovskituose ir giminingose medžiagose EPR tyrimai
	P50	Rugilė Bareikaitė	Fotoaktyvių junginių riboflavino ir chlorofilino fotostabilumo tyrimai
	P51	Lukas Ramalis	Skulptūrinių plonų sluoksnių pagrindu suformuoti silicio oksido veidrodžiai didelės galios lazeriams
	P52	Justina Žemgulytė	Didelės galios mikrobangų impulsų rezistorinio jutiklio matavimo sąsaja
nuotolinis	P53	Kamilė Jonynaitė	*Chlorella vulgaris* dumblių apšvita plazma
	P54	Laura Tauraitė	fs lazeriu indukuotų struktūrinių pokyčių stikluose tyrimas Ramano spektroskopija
	P55	Rimvydas Aleksiejūnas	CubeSat antenų spindulių formavimas ir Doplerio poslinkis daiktų interneto taikymams

			Nanomokslas ir nanotechnologijos
	P56	Asta Tamulevičienė	Sidabro nanodalelių, suformuotų lazerine abliacija skystyje, taikymas paviršiuje stiprinamos Ramano sklaidos jutikliams
	P57	Nadzeya Khinevich	Tanino rūgšties ir trinatrio citrato santykio įtaka pusiau monodispersinių sidabro nanodalelių augimo kinetikai
	P58	Augustas Morkvėnas	Grafeno oksido nanodarinių bioakumuliacijos tyrimai salmo trutta ankstyvose vystimosi stadijose
	P59	Vita Petrikaitė	Koloidinio aukso ir sidabro tirpalų sintezė naudojant lazerinę abliaciją
	P60	Andrej Dementjev	Anglies nano struktūrų tyrimas CARS mikroskopijos metodu
	P61	Kernius Vilkevičius	Plazmoninėmis savybėmis pasižymintys periodiniai aukso mikrogumbeliai, suformuoti tiesioginiu lazeriniu rašymo metodu
			Teorinė, statistinė ir skaičiuojamoji fizika
	P62	Juozas Šulskus	Skaičiavimų galimybės naudojant 0.3 PFlops našumo „VU HPC“ Saulėtekis superkompiuterį
	P63	Mantas Jakučionis	Valdomos temperatūros atvyrų kvantinių sistemų dinamika
	P64	Kazimieras Tamoliūnas	Aplinkos poveikis krūvio pernašos būsenoms chlorofilo molekuliniuose dimeruose
	P65	Ligitas Vinciūnas	Bakteriorodopsino baltymo aktyvaus centro modeliavimas naudojant molekulių dinamiką
	P66	Tatjana Pyragienė	Sinchronizacijos slopinimas dviejose sąveikaujančiose neuronų populiacijose
	P67	Vytautas Bubilaitis	Žadinimo-zondavimo spektrų modeliavimas prie didelių žadinimo intensyvumų J agregatuose
nuotolinis	P68	Viktoras Pyragas	Rezervuarinio skaičiavimo taikymas ekstremaliųjų įvykių prognozei ir slopinimui
nuotolinis	P69	Viačeslav Kudriašov	Elektromagnetiškai indukuoto praskaidrėjimo ir lokalizacijos efektai sąveikaujančių Rydbergo atomų sistemose
	P70	Aušra Kynienė	Ar^(2+) jono jonizacija elektronais
	P71	Delianas Palinauskas	8-vinil-BODIPY molekulės darinių modeliavimas tankio funkcionalo metodais
nuotolinis	P72	Tomas Klinavičius	Skirtingų skaitinių optinio atsako modeliavimo metodų tinkamumo pasirinktoms fotoninėms struktūroms tyrimas
	P73	Pranas Juknevičius	Elektroninio sužadinimo dinamikos dvimatėse sistemose aprašymas pasitelkiant neuroninius tinklus
	P74	Aleksejus Kononovičius	Trumpeninio Gauso triukšmo sąlygoti taškiniai procesai
	P75	Artūras Acus	Neigiamas mechaninės bangos energijos srautas
	P76	Artūras Acus	Bendro pavidalo bekoordinatės multivektorių eksponenčių formulės Cliffordo algebrose Cl(p,q) kai p+q=3
	P77	Domantas Burba	Mažesnio už bangos ilgį periodo optinė gardelė šaltiesiems atomams
	P78	Giedrius Žlabys	Complete energy conversion between light beams carrying orbital angular momentum using coherent population trapping for a coherently driven double-Λ atom-light-coupling scheme
	P79	Edvinas Gvozdiovas	Nuo sukinio priklausanti optinė gardelė su siauresniais nei difrakcijos riba barjerais

		Stendinė sesija 2	**Spalio 7 d.** 17:00-18:45
		Dalyviai	***Aplinkos ir energetikos fizika bei technologijos***
nuotolinis	P80	Vitaliy Romanenko	^{239,240}Pu balanso vertinimas Kuršių mariose
nuotolinis	P81	Darius Valiulis	Atmosferinio gyvsidarbrio koncentraciją įtakojantys veiksniai Maitri vietovėje, Antarktidoje
nuotolinis	P82	Daria Pashneva	Relationship indoor air quality from urban black carbon level
	P83	Arūnas Gudelis	Radionuklidų tūrinio aktyvumo tyrimas pažemio atmosferoje ir Neries vandenyje
nuotolinis	P84	Touqeer Gill	Variability of aerosol main chemical components in Lithuanian rural environment: a 5-years study
	P85	Marina Konstantinova	Gama spektrų modeliavimas įvairios geometrijos metalinių AE atliekų bandiniuose
	P86	Lina Davulienė	Klimato fizikos naujienos pagal IPCC6
			Elektronika ir optoelektronika
	P87	Benas Bužinskas	Terahercinis spalvotas struktūrinių defektų vaizdinimas mene ir pramonėje
nuotolinis	P88	Andrius Kamarauskas	Įtampa valdomas Fabri Pero rezonansas silicio plokštelėje
nuotolinis	P89	Rokas Gegevičius	Mobile Ions Determines Multiphase Performance Dynamics of Perovskite LEDs
	P90	Martyna Mazuronytė	Švino bromido perovskitiniai šviesos detektoriai
	P91	Paulius Ragulis	Energijos kaupimas iš bevielio ryšio tinklų
	P92	Karolis Stašys	MPE auginimo sąlygų įtaka Kvantinių kaskadinių lazerių paviršiaus kokybei
nuotolinis	P93	Lukas Dvylys	Naftiridino fragmentus turinčių elektroaktyvių organinių junginių sintezė ir savybės
	P94	Kamilė Bareikaitė	Photophysical properties of pyrimidine-based TADF emitters
	P95	Simonas Driukas	Struktūriniai ir fotoliuminescencinių savybių pokyčiai elektriniu lauku paveiktose perovskitinėse plėvelėse
	P96	Sandra Pralgauskaitė	Lazerinių diodų su AlGaAs stačiakampėmis ir parabolinėmis kvantinės duobėmis žemo dažnio triukšmo charakteristikos
	P97	Giedrė Čepurnaitė	Dujų detekcijai skirtų kvantinių kaskadinių lazerių įtaisų formavimas
			Šviesos technologijos ir kvantinė optika. Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika
	P98	Algirdas Jasinskas	Comparative Study of different Quantum Well Active Regions for Mid-IR VCSELs
	P99	Andrea Zelioli	Optimization of InGaAs MQW technology for NIR VECSELs
	P100	Arnas Pukinskas	A3-B5-Bi kvantinių darinių technologijos infraraudoniesiems šviestukams
	P101	Monika Jokubauskaitė	GaAsBi/GaAs:Be kvantinės duobės su 10% bismuto
	P102	Elena Valkiūnaitė	Dviejų liuminescencijos juostų nepoliniuose InGaN/GaN kvantinių duobių spektruose tyrimas
	P103	Oleksandr Masalskyi	Direct impact of hot carriers on the operation of a p-n junction solar cell
	P104	Džiugas Litvinas	Changes in generated carrier recombination dynamics upon photodegradation of MAPbI3 perovskite
	P105	Mažena Mackoit-Sinkevičienė	Simulation of one-axis squeezing with atomic fermions in optical lattices
			Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos
	P106	Alireza Shahidi	3D spausdinimo technologija, skirta objektų iš keramikos kompozitinių medžiagų kūrimui
	P107	Alexandr Belosludtsev	A study of ultrathin chromium films‘ optical properties
	P108	Povilas Bertašius	Sluoksniuotų kompozitų su anglies nanovamzdeliais elektromagnetinis suderinamumas
nuotolinis	P109	Paulius Andriūnas	Masės pernašos modelio pritaikomumas išplėsto austenito tyrimui
	P110	Robertas Maldžius	Popieriaus elektrostatinio spūdžio tyrimai
	P111	Vilma Kavaliukė	Prustito elektrinių savybių tyrimas kompleksinės pilnutinės varžos spektroskopija
	P112	Modestas Čeikauskas	Didelės amplitudės mikrosekundinės trukmės magnetinių laukų matavimas, naudojant jutiklius iš manganitų sluoksnių
	P113	Jorūnas Dobilas	Magnetinių laukų matavimas žemose temperatūrose naudojant plonus manganitų-kobaltitų polikristalinius sluoksnius
	P114	Mykola Koliada	Hibridinis magnetovaržinis jutiklis iš manganito-grafeno struktūros, suformuotos ant Al2O3 padėklo
	P115	Artyom Plyushch	0.7Pb(Mg1/3Nb2/3)O3-0.3PbTiO3 (PMN-0.3PT keramini sluoksniai pagaminti tepimo metodu
	P116	Artyom Plyushch	Multiferoinės kompozitinės medžiagos fosfato matricų pagrindu
	P117	Šarūnas Svirskas	Kalcio įtaka dielektrinei BaZrxTi1-xO3 kietųjų tirpalų relaksacijai
	P118	Gabrielė Kareivaitė	Neįprasta trans-stilbeno fluorescencinių savybių priklausomybė nuo temperatūros
	P119	Julianija Nikitina	Fano tipo rezonansas moduliuotose vienasluoksnėse dangose šviesos kampiniam ir dažniniam selektyvumui
	P120	Saulius Daugėla	Temperatūrinės ir dažninės Bi1-xLaxFeO3 elektrinių savybių ypatybės

	P121	Vadzim Haronin	Growth of Strontium Titanate film by Pulsed Laser Deposition
	P122	Robertas Grigalaitis	Dielektrinės dispersijos metastabiliuose $BiCrO_3$ and $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$ junginiuose ypatumai
	P123	Ilona Zamaraitė	Dvigubos histerezės kilpos $Sn_2P_2S_6$ kristaluose
	P124	Sergejus Balciunas	Dipolio tvarkymosi ypatumai mišriuose katijonų halidų perosvkituose
	P125	Martynas Kinka	ZIF metalo organinių karkasų ligandų dinamikos tyrimas dielektrinės spektroskopijos metodu
	P126	Roland Tomasiunas	Investigation of ALD transition metal oxide films for GaN optoelectronics applications
	P127	Anastasija Supranovič	Termografinių fosforų spektrinių savybių charakterizavimas optinės termometrijos taikymams
	P128	Darius Virbukas	Plonų 6ScAlSZ sluoksnių, suformuotų garinant elektronų spinduliu, savybių tyrimas
nuotolinis	P129	Lukas Bastakys	Chromo oksido ir chromo oksido kompozitų dangų suformuotų plazminiu purškimu tribologinės savybės
	P130	Darya Meisak	Usage of conductive materials for microwave components miniaturization
	P131	Edita Palaimienė	$Ag_{0.92}Li_{0.08}NbO_3$ keramikos dielektrinė ir IR spektroskopija
	P132	Edita Palaimienė	Anglies gelių elektromagnetinės savybės
	P133	Edita Palaimienė	Plačiajuostė $Ba_{0.17}Ca_{0.83}TiO_3$ keramikos dielektrinė spektroskopija
	P134	Edita Palaimienė	PMDS kompozitų su Ag nanodalelėmis dielektrinė spektroskopija
	P135	Laurynas Tumėnas	Ypač didelės molekulinės masės polietileno (UHMWPE) struktūrinių savybių tyrimas
	P136	Darija Astrauskytė	Titano oksido plonų sluoksnių, suformuotų naudojant atominio storio sluoksnio nusodinimo technologiją, kristalizacijos ir optinių savybių tyrimas
	P137	Marina Tretjak	Žemo dažnio triukšmo ir krūvio pernašos mechanizmų kompozituose su anglies nano dalelėmis tyrimas
	P138	Marek Kolenda	Poliškumo Inversija GaN Sluoksniuose panaudojant ALD-Al_2O_3 Tarpinį Sluoksnį / Growth and Investigation of Polarity Inversed GaN Layers on ALD-Al_2O_3
	P139	Yaraslau Padrez	Plonų laidžių plėvelių elektromagnetinės savybės mikrobangų ir teraherciniame dažnių diapazonuose
	P140	Mantas Drazdys	Plonų dielektrinių sluoksnių, formuojamų atominio storio sluoksnio nusodinimo metodu, augimo greičio dinamikos tyrimas
	P141	Hassan Zhairabany	Titano koncentracijos įtaka deimanto tipo anglies dangų struktūrai ir savybėms
	P142	Mantas Sriubas	Plonų TiO_2 sluoksnių paviršiaus modifikavimas Au ir Ag nanodalelėmis
	P143	Kęstutis Mažeika	Katijonų pakaitos $MFe(Mn)O_3$ (M=Bi,Gd,Y,La) feroikuose įtaka Mesbauerio spektrams ir magnetinėms savybėms
	P144	Andrius Ibenskas	Aukštos temperatūros supramolekulinių fazių su C–H···F ir C–H···N ryšiais modeliavimas
	P145	Tomas Šalkus	Natrio jonų kietieji laidininkai: $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ ir $Na_3MnPO_4CO_3$
nuotolinis	P146	Mindaugas Ilickas	Cinko oksido nanodalelių sintezė vakuuminio plazminio purškimo metodu ir struktūrinių savybių tyrimas
	P147	Aleksandras Iljinas	Indžio-alavo oksido plonų sluoksnių auginimas magnetroninio nusodinimo vakuume metodu ant polimerinių padėklų
	P148	Oleg Kiprijanovič	Kumuliaciniai ir magneto-kumuliaciniai reiškiniai S-N riboje plonų YBaCuO sluoksnių spartaus S-N perjungimo metu
	P149	Artūras Jukna	Magnetinių sūkurių koherentinio judėjimo deguonimi nuskurdintu YBCO dariniu tyrimai
			Lazerių fizika ir technologijos
	P150	Paulius Kizevičius	Plokščios specialios THz optikos elementų gamybos femtosekundiniais lazeriniais impulsais tyrimas
	P151	Simas Melnikas	Drėgmės ir dengimo paklaidų įtaka plačiajuosčio čirpuoto veidrodžio su porėtu išoriniu sluoksniu spektriniams parametrams
	P152	Deividas Andriukaitis	Mikro-fluidinio makro-molekulių separatoriaus gamyba tiesioginiu femtosekundiniu lazeriniu rašymu
	P153	Edvinas Aleksandravičius	Filamentacijos slopinimas netiesinėje Kero terpėje lūžio rodiklio moduliacija
	P154	Arnas Žemaitis	Metalinių paviršių tekstūravimo proceso spartinimas naudojant femtosekundinį lazerį
	P155	Sergejus Orlovas	Elektronų greitinimas čirpuotais radialinės poliarizacijos impulsiniais šviesos pluoštais
	P156	Vytautas Jukna	Aberacijų korekcija Besselio-Gauso pluošto fokusavimui į mažo diametro stiklinį cilindrą
	P157	Erminas Kozlovskis	Sūkurinių Beselio pluoštų superpozicijų pritaikymas skaidrių terpių mikroapdirbimui
nuotolinis	P158	Karolis Mundrys	Optinių femtosekundinių impulsinių Airy pluoštų generavimas fazinių elementų pagalba
nuotolinis	P159	Jaroslav Kodz	Sanjako efektu pagristas optinis izoliatorius
	P160	Gabrielius Kontenis	Dinaminis aukštesnės eilės Beselio pluoštų maišymas – optinio grąžto formavimas
	P161	Ignas Lukošiūnas	Paviršinių bangų pritaikymas erdviniam filtravimui pasitelkus plonasluoksniais bangolaidžiais
	P162	Vaida Marčiulionytė	Didelio pasikartojimo dažnio žalia šviesa žadinamo superkontinuumo generacija ir optinis pažeidimas CaF_2 ir BaF_2 kristaluose
	P163	Ernestas Nacius	Erdviškai praslinktu aksikonu generuojamų asimetrinių Beselio pluoštų panaudojimas skaidrių terpų mikroapdirbime
	P164	Miglė Kuliešaitė	UV-VIS šviesos generacijos fotoninių kristalų šviesolaidyje tyrimas
	P165	Gaudenis Jansonas	Interferometriniai netiesinio lūžio rodiklio matavimai ties 3,2 μm
	P166	Jonas Banys	Efektyvūs vieno bei dviejų lėkių valdomo pradinio čirpo Yb strypiniai šviesolaidiniai stiprintuvai naudojantys Gires – Tournois interferometrinius veidrodžius
	P167	Vytenis Barkauskas	Apšvitos dozės didelio intensyvumo lazerių laboratorijoje
	P168	Marius Navickas	Paviršinių darinių formavimas dielektrinėse terpėse femtosekundiniais lazerio impulsais
	P169	Raimundas Burokas	Depoliarizacijos kompensavimas didelės galios Yb:YAG stiprintuve, panaudojant stikle įrašytas nanogardeles
	P170	Gabrielė Stanionytė	Subnanosekundinių impulsų parametrinio stiprinimo sistemos tyrimas

PLENARINIAI PRANEŠIMAI








http://lnfk.ftmc.lt

Nuotraukos D. Jokubauskio (FTMC)

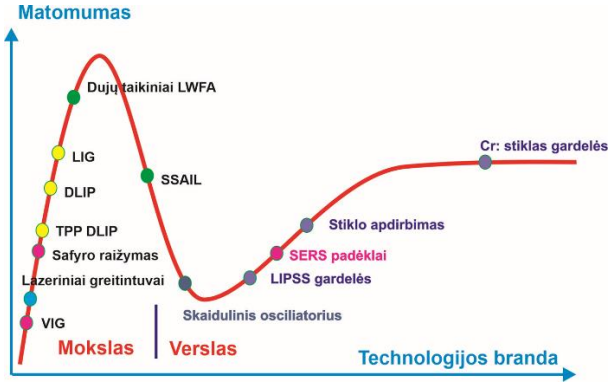
Nuo intensyvaus sužadinimo šviesa fizikos iki lazerinių technologijų

From physics of intense excitation by light to laser technologies

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

Amžina diskusija, kiek mokslas turi tarnauti visuomenės poreikiams, ir kiek mokslininko smalsumo tenkinimui. Kadangi visuomenės pažanga neatsiejama nuo mokslinių atradimų, visgi svarbu paanalizuoti kaip mokslinės žinios pavirsta naujais produktais ar plačiai naudojamomis technologijomis. Pabandžiau kritiškai pažvelgti, ką nuveikėme FTMC Lazerinių technologijų skyriuje ir tam panaudojau *Gartner Hypo Cycle* [1] metodą, taikomą technologijų brandos ir lūkesčių įvertinimu. Naujos idėjos gimsta iš minčių chaoso, pradiniai rezultatai sukelia žavesio ir begales lūkesčių. Tačiau noras giliau suprasti ir bandyti realiai panaudoti tas pradines žinias, dažniausia sukelia nusivylimus ir tik nuoseklus darbas parodo šviesą kantriausiems. Nusivylimo ir vėl pakilimo fazės nėra tikrasis mokslas ir be verslo įsijungimo nepasieksime panaudojimo plato.

1 paveiksle sudėta keletas mokslinių „žalių“ idėjų ar jau pasiekusių technologijų lygį, daugiausiai iš lazerinio medžiagų apdirbimo srities. Keturios dešinėje jau veikia įmonėse ir mokslo pagalbos prireikia patobulinimas. Skaidulinis osciliatorius jau nusileido iš „susižavėjimo“ viršūnės ir po nemažų investicijų į atžalinę įmonę, manau, greitu laiku pradės didinti savo matomumą bet jau. kaip patikrintas produktas.



1 pav. Gartnerio pasitikėjimo ciklas ir FTMC lazerinių technologijų skyriaus branda.

SSAIL – lazeriu asistuoto selektyvaus polimerų padengimo metalu technologiją, kurią sukūrėme kartu su FTMC Katalizės skyriumi [2], dar vienas pavyzdys, kur susižavėjimo viršūnė jau praėjo. Bendravimas su didelėmis užsienio kompanijomis, kurios domisi šia technologija elektronikos, automobilių ar kitiems taikymams, privertė suglausti sparnus ir leistis ant žemės. Žavu, gera, bet technologijos pranašumas (jis yra) ne tenai kur mes mąstėme. Taigi, esame tame taške, kur be verslo nelabai ką gali benuveikti.

Tačiau verslu nereikia aklai pasitikėti. Kombinuodami infraraudonąją ir ultravioletinę lazerio spinduliuotę, sukūrėme patentuotą technologiją greitam safyro padėklų raižymui – labai svarbus etapas LED ar lustų gamyboje. Žavi fizika, kaip intensyvia lazerio spinduliuote paveikta medžiaga (safyras) dinamiškai kinta, sukurdama tarpines būsenas daugiafotonei šviesos sugerčiai. Poveikis stipriausias kai suderiname abiejų fotonų srautus [3]. Deja, įmonė su kuria kartu sukūrėme technologiją, pasirinko reklamavimosi o ne diegimo kelią.

Lazerinės mikroapdirbimo technologijos yra brangus malonumas, todėl jau senai ieškome kelių efektyviam ultratrumpų impulsų lazerių generuojamų fotonų panaudojimui. Labai svarbu optimizuoti energijos srautą, ateinantį į apdirbamą medžiagą. Darbai, mūsų pradėti 2008 metais, atvėrė tyrimų sritį, kur kas mėnesį skelbiami nauji lazerinės abliacijos našumo rekordai [4] ir stimuliavo naujos klasės lazerių, dirbančių impulse voros režimus ar labai dideliu GHz pasikartojimo dažniu gamybą. Technologija, kuri savaime neturi savo taško ant Gartnerio kreivės, bet ji yra daugelio mūsų kuriamų technologijų pagrindas.

Dabar link susižavėjimo viršūnės kylame su purkštukais dujų taikiniams, naudojamiems lazeriniams plazminės bangos elektronų greitintuvams. Jiems pagaminti iš lydyto kvarco naudojame keletą skyriuje sukurtų technologijų skaidrių medžiagų apdirbimui. Deja gaminius galime išbandyti tik užsienyje, kur veikia galingi, labai didelio intensyvumo lazeriai. Mus (mūsų purkštukus) mato, įsijungiame į H2020 projektus, bet kartu pradedame matyti savo technologijų ribojimus (gal jau pradėjome kristi kreive? Jei tai tiesa, vadinasi bręstame su technologija). Kartu kyla naujas susižavėjimas. Jei mūsų įmonės gali pagaminti reikiamus lazerius ELI – ekstremalios šviesos infrastruktūrai, matyt laikas vysti lazerinius dalelių greitintuvus. Pradiniai rezultatai su kolegomis iš Prancūzijos suteikia pamatuotų vilčių [5].

Po pradinio žavesio ir nusivylimo visada ateis naujas nušvitimas, jei kantriai ir kryptingai sieksi tikslo. Svarbiausia, kad idėjų pradinėje kilimo srityje niekada netrūktų.

Reikšminiai žodžiai: Gartner's hype cycle, lazerinės technologijos, mokslo ir verslo sąsaja.

Literatūra

[1] M. Blosch, J. Fenn, Understanding Gartner's hype cycles, https://www.gartner.com/en/documents/3887767
[2] K. Ratautas, et al., *Results in Physics,* **16**, 102943 (2020)
[3] M. Gedvilas et al., Lith. J. Physics, **61**, 124-142 (2021)
[4] A. Žemaitis, et al, *Scientific Reports*, **9**, 12280 (2019)
[5] L. Rovige et al., Phys. Rev. Accelerators and Beams, **23**, 093401(9), (2020)

Turbulence control by dynamic non-Hermitian potentials

Kęstutis Staliūnas
Universitat Politecnica Catalunya, Barcelona, Spain
Laser Research Center, Vilnius University, Vilnius, Lithuania
kestutis.staliunas@icrea.cat

We propose a new method for a smart control of turbulence, in particular of optical turbulence, by modifying the energy flow cascade of turbulence. The method is based on the asymmetric coupling between the spatial excitation modes due to non-Hermitian background potentials.

The non-Hermitian potentials are known, since recently, to introduce unidirectional coupling between the waves. A particular case of non-Hermitian potentials are the PT-symmetric potentials. The unidirectional coupling in wavenumber domain is on the root of recently proposed exotic effects as unidirectional invisibility, unidirectional lasing, and others. We consider the unidirectional coupling in an extended wavevector-frequency domain. We demonstrate that such a unidirectional coupling towards larger (smaller) wavenumbers-frequencies can increase (reduce) the energy flow to turbulent states, and therefore influence the strength and the character of the turbulence [1].

The study is based on the Complex Ginzburg-Landau Equation which is a universal model for the pattern formation and turbulence in a wide range of systems, and in particular in active nonlinear optical systems, like spatially extended lasers. We show that enhancement or reduction of the turbulence is indeed governed by the introduced direction of the energy flow, controlled by the phase shift between the real and imaginary parts of the temporal oscillation part of the non-Hermitian potential.

The proposed turbulence control mechanism can be applied to efficiently control the radiation in micro-lasers, in particular in Broad Area Edge Emitting lasers.

Literatūra

[1] S.B. Ivars, M. Botey, R. Herrero, and K. Staliūnas, Turbulence control by non-Hermitian potentials, PRL submitted, 2021

Medžiaga ir didelio intensyvumo lazerio spinduliuotė – praeitis, tendencijos ir ateities planai

Matter and high-intensity laser radiation – the past, the trends and the future plans

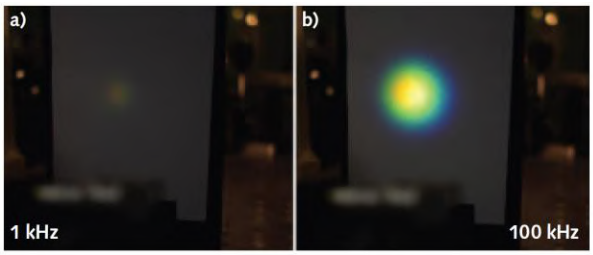
Mikas Vengris[1], Lukas Rimkus[1], Lukas Kontenis[2], Jonas Berzinš[2], Mangirdas Malinauskas[1] and Audrius Dubietis[1]

[1] Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio 10, LT-10222 Vilnius
[2] Light Conversion, Keramikų 2B, LT10233 Vilnius
mikas.vengris@ff.vu.lt

Ultratrumpųjų impulsų lazeriai taikomi medžiagų ir šviesos sąveikoms tyrinėti jau ne vieną dešimtmetį. Per tą laiką atlikta nemažai svarbių tyrimų, ištobulinti ne tik patys lazeriniai šviesos šaltiniai, bet ir juos naudojančios eksperimentų metodikos, atrasti naujų taikymai medžagotyroje, netiesinėje optikoje ir mikro bei nanoinžinerijoje. Dalis šių tyrimų, atliekamų Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centre apdovanoti 2019 metų Lietuvos mokslo premija. Pranešime trumpai pristatysime šį darbų ciklą, atkreipdami dėmesį į svarbiausius darbus ir temas bei jų tarpusavio sąsajas.

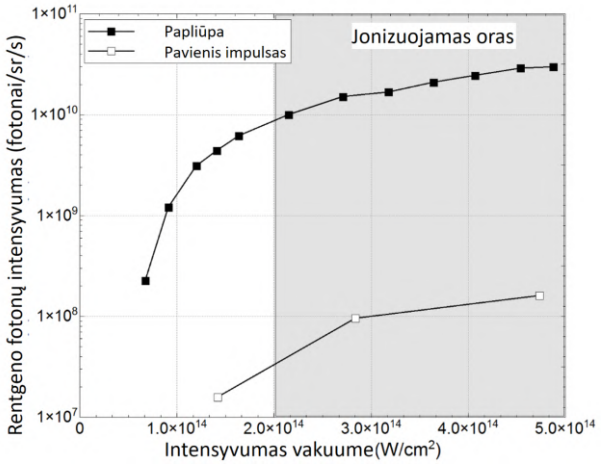
Per pastarąjį dešimtmetį išryškėjo nauja svarbi kryptis femtosekundinių lazerių technologijoje: auga ne lazerio generuojamų impulsų energija, o jų pasikartojimo dažnis. Nors ši tendencija labai greitai paplito pramoniniuose lazerių taikymuose, mokslininkų tarpe vis dar gyva nuomonė, jog moksliniams tyrimams parankiausi Ti:Safyro lazeriai, spinduliuojantys impulsus vieno ar kelių kHz dažniu, o siekiant atverti naujas tyrimų galimybes tinkamiausias kelias yra didinti jų impulsų energiją.

Nors kartais šis požiūris tebėra teisingas, kai kada tai tik mąstymo inercija. Šiame pranešime nagrinėsime priežastis, dėl kurių didelio pasikartojimo dažnio lazerinės Yb:KGW sistemos yra (ar gali būti) pranašesnės, atliekant netiesinės optikos (1 pav.), ultrasparčiosios spektroskopijos ar vaizdinimo eksperimentus ir net generuojant ir registruojant antrinę spinduliuotę [1] XUV ar renteno srityje.



1 pav. Baltos šviesos kontinuumas, sugeneruotas a) 1 kHz ir b) 100 kHz pasikartojimo dažnio impulsais – kurį lengviau užregistruoti?

Kitas svarbus aspektas, kurį lazerių technologijos pasiekė būtent didelio pasikartojimo dažnio Yb:KGW lazerinėse sistemose – tai lazeriai generuojantys femtosekundinių impulsų papliūpas arba serijas. Trukmės tarp impulsų serijose gali būti ~100 ps, ~10 ns ar ~10 μs Pirmieji tokių impulsų papliūpų privalumai išryškėjo lazerinio medžiagų apdirbimo eksperimentuose [2], tačiau kita produktyvi tokių impulsų taikymo sritis – femtosekundinės rentgeno spinduliuotės generacija, panaudojant impulsų poras, kuriose pirmasis nedidelės energijos impulsas, patekęs į kietą taikinį, sukuria plazmą, o antrasis, apie dešimt kartų didesnės energijos už pirmąjį, sąveikaudamas su plazma, generuoja rentgeno spinduliuotę. Pademonstruota, kad papliūpomis veikiantis 100 W vidutinės galios lazeris leidžia paprastai generuoti femtosekundinę rentgeno spinduliuotę laboratorijos sąlygomis nenaudojant vakuumo ir pasiekti rentgeno intensyvumus, iki šiol stebėtus tik itin sudėtingose daugelio milidžaulių lazerinėse sistemose [3]. Taip pat parodyta, kad papliūpų režimas leidžia padidinti generuojamos rentgeno spinduliuotės intensyvumą daugiau nei 100 kartų, nors suminė kaupinančios papliūpos energija yra lygi pavienio impulso energijai (2 pav.).



2 pav. Sugeneruotos rentgeno spinduliuotės intensyvumo priklausomybė nuo kaupinančios lazerinės spinduliuotės intensyvumo papliūpų ir pavienių impulsų režime.

Pademonstruoti ir sugeneruotos spinduliuotės taikymai rentgeno vaizdinime bei rentgeno spektroskopijoje.

Reikšminiai žodžiai: femtosekundiniai lazeriai, antrinė spinduliuotė, pasikartojimo dažnis.

Literatūra

[1] M.Vengris, L. Kontenis and J.Berzinš. Laser Focus World, 2021 May 19, p.60.
[2] C. Gaudiuso, P. N. Terekhin, A. Volpe, S. Nolte, B. Rethfeld, and (2004).
[3] M. Gambari, R. Clady, A. Stolidi, O. Uteza, M. Sentis, and A. Ferre, Scientific Reports 10 (2020).

Saulės energetika, praeitis, dabartis ir perspektyvos

Solar energetics, past, present and prospects

Vidmantas Gulbinas[1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio 3, 10257, Vilnius
[2]Vilniaus Universitetas, Fizikos fak. Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio 9, 10222, Vilnius
vidmantas.gulbinas@ftmc.lt

Karšta ir kupina ekstremalių atmosferos reiškinių vasara dar kartą priminė apie globalias atmosferos taršos ir su ja susijusias energetikos problemas. Energetika, kurios pagrindą sudaro anglies produktų deginimas atsakinga už didelę dalį atmosferos taršos. Atmosferoje vyksta žmonijos sukelti pokyčiai, kurie gali būti gali būti labai nemalonūs ar net pražūtingi. Naujos technologojos gali padėti jų išventi ar bent sušvelninti.

Saulė - neišsenkantis energijos šaltinis, bet jos pavertimas į kitas žmonijai reikalingas energijos rūšis nėra paprastas uždavinys. Yra daug transformacijos būdų, bet šiandien ypatingas dėmesys skiriamas fotovoltiniams saulės elementams. Saulės elementais dengti stogai ir apstatyti laukai jau tampa įprastu vaizdu. Didžioji šių elementų dalis pagrįsta silicio technologia sukurta prieš pusę šimtmečio. Šiuo metu vystoma visa eilė naujų technologijų, kurios tikimasi bus efektyvesnės ir pigesnės.

Įžymaus fiziko, Nobelio taikos premijos laureato Andrejaus Sacharovo šimtmetis

Centenary of outstanding physicist and Nobel Peace Prize laureate Andrei Sakharov

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

Šių metų gegužės mėnesį Vilniuje buvo plačiai paminėtas Andrejaus Sacharovo gimimo šimtmetis. Tačiau tuose renginiuose jis buvo pristatytas pirmiausia kaip žmogaus teisių gynėjas, kovotojas už demokratiją. Sacharovo metai dar nesibaigė, tad verta prisiminti jį ir kaip įžymų mokslininką.

A. Sacharovas gimė Maskvoje 1921 m., jo tėvas buvo fizikos dėstytojas. Antrojo pasaulinio karo metais Andrejus baigė sutrumpintas fizikos studijas Maskvos universitete ir dirbo šaudmenų gamykloje, kur pasiūlė keletą išradimų. Baigiantis karui, jis įstojo į aspirantūrą MA Fizikos institute ir, vadovaujamas akad. I. Tammo, parengė mokslų kandidato disertaciją. 1948 m. Tammas jį įtraukė į savo grupę, kuri turėjo teoriškai nagrinėti vandenilinės bombos sukūrimo galimybes. A. Sacharovas net dvidešimt metų dirbo „objekte“ – slaptame branduolinių tyrimų centre Arzamas-16, kur sprendė termobranduolinio ginklo sandaros ir veikimo problemas. Remiantis jo idėja, 1953 m. SSRS buvo sukurta pirmoji vandenilinė bomba. Ginkluotės kūrimu jis užsiėmė ne savo noru, bet, jo paties žodžiais tariant, dirbo „iš širdies“, nes plazmos ir branduolinio sprogimo nagrinėjimas buvo graži fizika, o antra, manė tokiu būdu kuriantis šalies galią, užtikrinančią taiką po baisaus karo. Už specialių valstybės užduočių įvykdymą Sacharovui buvo triskart suteiktas Socialistinio darbo didvyrio vardas bei kiti aukšti apdovanojimai.

A. Sacharovas 1950 m. sumanė ir taikų branduolinės sintezės reakcijos panaudojimą – reaktorių, vėliau pavadintą tokamaku. Jis kartu su I. Tammu išplėtojo šio reaktoriaus teoriją; tačiau jį kurti buvo pavesta kitiems mokslininkams. Nors buvo tikėtasi, kad toks įrenginys pradės veikti po 10–15 m., jis nėra baigtas kurti iki šiol. Sacharovas pasiūlė ir antrą, dabar taip pat plėtojamą, būdą gauti valdomą termobranduolinę sintezę naudojant lazerius.

Išskyrus gyvenimo pabaigą, Sacharovas neturėjo galimybių išvykti į mokslines konferencijose užsienyje, palaikyti ryšių su kitų šalių mokslininkais, greitai įsijungti į aktualių fizikos problemų sprendimą. Atviroje SSRS mokslinėje spaudoje buvo skelbta tik apie trisdešimt jo straipsnių, bet jų tematika stebėtinai plati: elementariųjų dalelių, atomo branduolio fizika, astrofizika, kosmologija. Aukštai vertinami du jo darbai iš kosmologijos, sprendžiantys esmines jos problemas. Visata tuoj po Didžiojo sprogimo turėjo būti visai homogeniška, tad kas lėmė pradinius tankio nevienalytiškumus, dėl kurių vėliau galėjo susiformuoti žvaigždės ir galaktikos? A. Sacharovas 1965 m. iškėlė idėją, kad pradiniai nevienalytiškumai atsirado vykstant kvantinėms fliuktuacijoms. Tiesa, jis naudojo dar netikslų Visatos modelį, tad negalėjo aprašyti nevienalytiškumų augimo. Ankstyvojoje Visatoje turėjo susidaryti ne tik elementariosios dalelės, bet ir jų antidalelės, o dabartinėje Visatoje vyrauja tik medžiaga. Sacharovas 1967 m. žengė esminį žingsnį sprendžiant šią problemą: nustatė, kad medžiagos ir antimedžiagos antisimetrija galėjo atsirasti, jei buvo pažeista: CP invariantiškumas, barioninio krūvio tvermės dėsnis bei termodinaminė pusiausvyra (Sacharovo sąlygos). Kituose originaliuose darbuose jis nagrinėjo ciklinius Visatos raidos modelius bei daugelio ne tik erdvės, bet ir laiko matmenų galimybę, branduolinių reakcijų paspartinimą miuonais, pasiūlė labai stipraus magnetinio lauko gavimo būdą ir kt.

SSRS ir kitose šalyse pradėjus branduolinio ginklo bandomuosius sprogdinimus, Sacharovas suprato kylančius pavojus ir siūlė uždrausti tokius bandymus. Dėl to įvyko jo konfliktas su N. Chruščiovu. Manydamas, kad dviejų politinių sistemų taikus sambūvis ir suartėjimas yra galimi tik SSRS tapus demokratine valstybe, Sacharovas atvirai pasisakė už demokratines permainas, protestavo prieš žmogaus teisių pažeidimus SSRS, tapo vienu iš Žmogaus teisių komiteto kūrėjų, gynė disidentus. Toje veikloje jam daug padėjo antroji žmona Jelena Boner. 1975 m Sacharovui „už žmogaus teisių gynimą, kovą už nusiginklavimą bei bendradarbiavimą tarp visų tautų“ buvo suteikta Nobelio taikos premija. Antra vertus, komunistinė valdžia netrukus iš jo atėmė visus valstybės apdovanojimus ir ištrėmė į uždarą Gorkio miestą. Tik prasidėjus M. Gorbačiovo pertvarkai, Sacharovas galėjo grįžti į Maskvą. Jis buvo išrinktas SSRS liaudies deputatų suvažiavimo delegatu ir tapo vienu iš demokratinės opozicijos vadovų. Sacharovas pritarė Sąjūdžio veiklai Lietuvoje, bet ne Baltijos šalių nepriklausomybės siekiui. Jis norėjo tik demokratizuoti SSRS ją išsaugant.

A. Sacharovas mirė 1989 m. nuo širdies smūgio, eidamas šešiasdešimt devintuosius metus.

Pažymint A. Sacharovo nuopelnus kovojant už žmogaus teises SSRS bei paramą Lietuvos disidentams, 1991 m. jo vardu buvo pavadinta aikštė Vilniuje (deja, ji net jubiliejaus proga nebuvo tinkamai sutvarkyta). O 2003 m. Sacharovas buvo apdovanotas Vyčio Kryžiaus ordino Didžiuoju Kryžiumi (po mirties).

Tokamakas, vandenilinė bomba, ankstyvoji Visata, branduolių sintezės reakcija, žmogaus teisės.

Literatūra

[1] A. Sacharov. Atsiminimai. V.: Briedis, 2021.
[2] Б.Л. Альтшулер. О научных трудах А.Д. Сахарова. Успехи физических наук **161**, 3 (1991).

Fizika St. Batoro universitete Vilniuje 1919-1939 metais

Physics at St. Batory university in Vilnius during 1919-1939

Liudvikas Kimtys
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9-3, LT-10221 Vilnius
Liudvikas.Kimtys@ff.vu.lt

Pranešime pateikiama fizikos studijų bei mokslinių darbų apžvalga Stepono Batoro universitete (SBU), pasinaudojant kai kuriomis istorinėmis publikacijomis [1, 2], o taip pat prof. H. Horodničiaus archyviniais dokumentais.

Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, kuriame ir buvo įsteigtas Fizikos institutas (*Zakład Fizyczny*), veiklą pradėjo 1919 m. rugsėjo 15 d., kada įvyko pirmasis fakulteto tarybos posėdis, nors SBU buvo iškilmingai atidarytas 1919 m. spalio 11 d. 1919-1920 m. m. visame SBU buvo 547 studentai. Matematikos ir gamtos mokslų fakultete tuo laiku studijavo 87 matematikai, fizikai, chemikai ir gamtininkai. Fizikos institute dirbo 2 profesoriai (V. Dzievulskis, J. Patkovskis), vyr. asistentas (I. Pivnikevičius) ir jaunesnysis asistentas (J. Kademacis)

1919-jų metų pabaigoje fakultetas įsikūrė apleistame pastate Naugarduko g. 22. Fizikos dėstymui buvo įrengta specializuota didžioji auditorija su demonstracijų kabinetu bei mokomoji laboratorija. 1920 m. institute buvo trys katedros: fizikos (vėliau padalinta į dvi), teorinės fizikos bei astronomijos observatorija. 1922 m. observatorija įsikūrė naujuose pastatuose Čiurlionio gatvėje. Skaičius studentų visame universitete sparčiai didėjo ir 1921-1922 m. m. fakultete jau studijavo 330 studentų.

Mokslo tiriamieji darbai institute prasidėjo 1923-1924 m. m., buvo apgintos pirmosios fizikos disertacijos (H. Nievodničanskis ir A. Cukermanas). Teorinės fizikos reikšmingi darbai buvo skirti Brauno judėjimo, reliatyvumo teorijos, kosmologijos (J. Veisenhofas), multipolinio spinduliavimo (J. Bliatonas), teoriniai bei eksperimentiniai spektro linijų pločio (A. Jablonskis). Iš eksperimentinių darbų paminėtini: dujų dispersijos ir refrakcijos (B. Cynkas), gyvsidabrio garų sugerties ir fluorescencijos spektrų savybių (S. de Valdenas, H. Nievodničanskis), molekulinės spektroskopijos (J. Patkovskis), plonų metalinių sluoksnių optinių savybių (V. Dzievulskis), rentgeno spindulių (V. Staševskis) tyrimai. Svarbiausiais pripažįstami H. Nievodničanskio darbai, apvainikuoti magnetinio dipolinio spinduliavimo eksperimentiniu įrodymu. Pagrindiniai instituto mokslininkų rezultatai yra publikuoti žurnaluose *Nature*, *Phys. Rev*. ir kt. Svarbius tyrimus atliko ir H. Horodničius, vadovaujamas A. Jablonskio, už kuriuos jam 1943 m. buvo suteiktas mokslų daktaro laipsnis.

1939 m., pasikeitus politinei situacijai Rytų Europoje, SBU, kuriame per 20-ties metų laikotarpį studijavo 14044 studentų, veiklą nutraukė. Personalui buvo sudarytos galimybės išvykti iš Vilniaus į Lenkiją ir į kitas šalis. Iš SBU fizikų 1940-siais Vilniuje pasiliko tik H. Horodničius ir iki 1948 m. - A. Garnišas J. Maleika ir B. Kaliūga.

Vilniaus universiteto (VU) laikinasis valdytojas (iki prof. M. Biržiškos išrinkimo rektoriumi) prof. Ignas Končius pavedė P. Brazdžiūnui, A. Puodžiukynui ir A. Žvironui perimti SBU fizikos padalinių turtą. A. Žvironui susirgus, jį pavadavo K. Baršauskas. Iš SBU pusės už turto perdavimą buvo atsakingas H. Nievodničanskis. Yra žinoma, kad jis neslėpė vilties viską atgauti atgal, „palankiai pasikeitus aplinkybėms“. Todėl perdavimas vyko labai sklandžiai. (Po karo A. Garnišas į Lenkiją slapta išvežė visus perdavimo dokumentus.)

Buvusio SBU Fizikos instituto bazėje, perkėlus darbuotojus iš Kauno universiteto, 1940 m. buvo sudaryta Fizikos katedra (prof. P. Brazdžiūnas (katedros vedėjas), doc. A. Puodžiukynas, doc. A. Žvironas, asist. A. Jucys, asist. H. Horodničius, asist. J. Heršmanas, asist. A. Garnišas, 3 pagalbinio personalo darbuotojai), kuri funkcijonavo iki Vilniaus universiteto uždarymo 1943 m.

Iš SBU perimtosios aparatūros ir prietaisai, o taip pat ir gausi fizikos mokslinė literatūra, buvo efektyviai panaudotos tiek VU, tiek ir Vilniaus pedagoginio instituto studijose bei moksliniuose darbuose. Kai kuriuos spektroskopijos darbus, kurie SBU buvo pradėti A. Jablonskio iniciatyva, VU Fizikos fakultete tęsė H. Horodničius, A. Misiūnas, V. Norkūnas, A. Valužis.

VU Fizikos muziejuje saugomi optiniai spektrografai, kuriais naudojosi H. Nievodničanskis, A. Jablonskis, J. Patkovskis ir kt., daug elektrinių matavimų prietaisų.

Reikšminiai žodžiai: fizikos istorija.

Literatūra

[1] A. Hrynkiewicz, Postępy Fizyki. **46**, 591 (1995).
[2] Fizikos istorija Lietuvoje / P. Brazdžiūnas, H. Horodničius, H. Jonaitis (ats. red.) ir kt., V.: Mokslas, 1988. P. 212.

KVIESTINIAI PRANEŠIMAI

http://lnfk.ftmc.lt

Termiškai aktyvuotos uždelstosios fluorescencijos spinduolių raida

Progress of Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitters

Saulius Juršėnas[1], Karolis Kazlauskas[1], Tomas Serevičius[1], Gediminas Kreiza[1], Dovydas Banevičius[1], Rokas Skaisgiris[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio 3, LT-10257, Vilnius
saulius.jursenas@ff.vu.lt

Pranešime aptarsime trečiosios kartos termiškai aktyvuotos uždelstosios fluorescencijos (TADF) spinduolių pastarųjų metų pažangą, siekiant jų taikymo našių organinių šviestukų (OLED) technologijoms. TADF spinduolių veikimo fotofizikinis modelis ženkliai pakito po pirmųjų Chihaya Adachi darbų, pasirodžiusių beveik prieš dešimtmetį, apie sėkmingus uždelstosios fluorescencijos taikymus organinių šviestukų gamyboje. Kartu spačiai tobulėjo ir teorinio modeliavimo galimybės, TADF spinduolių dizainas bei cheminė sintezė, suprasta aplinkos įtaka bei jos galimybės spinduliuotės valdyme. Pasakojimą apie TADF spinduolių pažangą iliustruosime pavyzdžiais iš mūsų laboratorijos atliekamų naujausių tyrimų, ypatingą dėmesį kreipdami į molekulinių savybių dizainą ir spinduolių konformacinės netvarkos valdymą, siekiant pagerinti OLED prietaisų spalvines savybes, našumą bei ilagamžiškumą.

Elektrocheminė Ramano spektroskopija

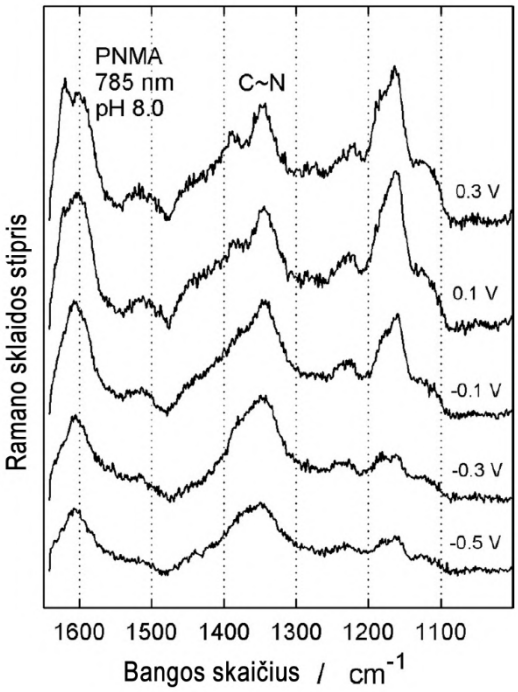
Electrochemical Raman spectroscopy

Gediminas Niaura, Albertas Malinauskas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
gediminas.niaura@ftmc.lt

Mokslininkų domėjimasis elektrochemija didėja kadangi elektroniniai-cheminiai virsmai, vykstantys fazių riboje elektrodas-tirpalas, lemia daugelį procesų susijusių su katalize, energijos perdirbimu, gyvybės reiškiniais [1]. Siekiant suprasti elektrocheminės fazių ribos struktūrą ir procesus molekuliniame lygmenyje būtina taikyti metodus kurie pasižymi aukštu jautriu ir gali suteikti molekulinės informacijos. Šiomis savybėmis pasižymi paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (angl. SERS), nanodalelių padengtų apsauginiu sluoksniu sustiprinta Ramano spectroskopija (angl. SHINERS) ir rezonansinė Ramano spektroskopija (RR). Elektrocheminė Ramano spektroskopija apjungia įvairius Ramano spektroskopijos ir elektrocheminius tyrimo metodus ir leidžia atlikti spektrinius tyrimus *in-situ* esant kontroliuojamam elektriniam potencialui.

Pranešime bus palyginti skirtingi elektrocheminės Ramano spektroskopijos metodai ir aptarti jų privalumai ir trūkumai. Ypatingas dėmesys bus skiriamas specifinių Ramano sklaidos žymenų, nusakančių fazių riboje esančių molekulinių grupių struktūrą ir sąveikas, nustatymui [2]. Pavyzdžiui, metileno grupių tiesioginė sąveika (kontaktas) su metalo paviršiumi gali būti atpažinta pagal valentinio simetrinio dažnio $\nu_s(CH_2)$ sumažėjimą 20−30 cm^{-1} [3]. Baltymų denatūracija fazių riboje ir savitvarkių monosluoksnių (SAM) formavimosi stadijos gali būti spektriškai atpažintos naudojant šį žymenį. Svarbus elektrocheminės Ramano spektroskopijos privalumas yra galimybė tiesiogiai stebėti metalas-adsorbatas ryšio virpesį ir analizuoti elektrinio potencialo įtaką cheminio ryšio stipriui. Šiuose tyrimuose svarbu apjungti Ramano spektroskopijos ir adsorbcijos kompleksų teorinio modeliavimo metodus. Ypatingai didelę reikšmę virpesinių modų priskyrimams SERS ir SHINERS spektruose turi izotopinio pakeitimo metodas. Mūsų tyrimuose buvo naudojamos ne tik stabiliais izotopais modifikuotos adsorbuotos molekulės, bet ir metalo elektrodas ($^{65}Cu/^{63}Cu$). Svarbiausias kintamasis elektrocheminės Ramano spektroskopijos tyrimuose yra elektrinis potencialas. Potencialo sukelti struktūriniai pakitimai adsorbuotose molekulėse gali būti efektyviai ištirti analizuojant potencialo-skirtuminius Ramano spektrus. Adsorbuotų molekulių virpesiniai spektrai gali kisti tiek dėl tiesioginės elektrinio lauko įtakos (virpesinis Štarko efektas) tiek ir dėl sąveikos su metalu ir kitomis adorbuotomis molekulėmis bei tirpalo komponentais. Elektrocheminė Ramano spektroskopija leidžia efektyviai tirti joninių porų susidarymą fazių riboje.

Panaudodami daugiabangę rezonansinę Ramano spektroskopiją mes tyrėme plonų laidžiųjų polimerų plėvelių, suformuotų ant Au elektrodo, struktūrą [4]. Keičiant lazerinės spinduliuotės bangos ilgį (325, 442, 532, 633 ir 785 nm), galima rezonansiškai tirti atskiras polimerines struktūras. Spektrus žadinat su 785 nm spinduliuote, galima nustatyti ar plėvelėje yra molekulinių struktūrų (poliaronų) garantuojančių elektrinį laidį. Poli(N-metilanilinas), skirtingai nei polianilinas pasižymi elektriniu laidžiu esant tirpalo pH>4. Rezonansiniuose Ramano spektruose aiškiai matosi, kad poliaroninių struktūrų juosta ties 1350 cm^{-1} egzistuoja plačioje potencialų srityje. Taigi šioje potencialų srityje plėvelė turėtų būti laidi.



1 pav. Poli(N-metilanilino) plėvelės rezonansiniai Ramano spektai, esant skirtingiems Au elektrodo potencialams. Spektrai žadinti su 785 nm lazerine spinduliuote.

Reikšminiai žodžiai: Ramano spektroskopija, potencialas, elektrocheminė fazių riba, SERS, SHINERS.

Literatūra

[1] N.M. Sabanes, and K.F. Domke, ChemElectroChem. **4**, 1814 (2017).
[2] I. Matulaitienė, Z. Kuodis, A. Matijoška, O. Eicher-Lorka, G. and Niaura, J. Phys. Chem. C **119**, 26481 (2015).
[3] I. Razmutė-Razmė, Z. Kuodis, O. Eicher-Lorka, and G. Niaura, Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 4564 (2010).
[4] R. Mažeikienė, G. Niaura and A. Malinauskas, Spectrochim. Acta A **262**, 120140 (2021).

Ultraspartus ir aukštos rezoliucijos akies vaizdinimas su pilnojo lauko optine koherentine tomografija

Full-field Optical Coherence Tomography for ultrafast high-resolution eye imaging

Egidijus Auksorius[1], Dawid Borycki[2,3], Piotr Węgrzyn[2,3], Ieva Žičkienė[1], Slawomir Tomczewski[2,3], Karolis Adomavičius[1], Mounika Rapolu[2,3], Kamil Liżewski[2,3] and Maciej Wojtkowski[2,3]
[1]Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland
[3]International Center for Translational Eye Research, ul. Skierniewicka 10a 01-230 Warsaw, Poland
egidijus.auksorius@ftmc.lt

Optical Coherence Tomography (OCT) has become a standard of care for diagnosing and monitoring eye diseases. However, despite its rapid development, high-resolution *in vivo* imaging with penetration into deeper tissue layers is still a major challenge for classical OCT. Namely, OCT is limited by the presence of coherent noise that is due to the use of spatially coherent lasers, necessary for scanning and confocal detection. The noise, which manifest itself as speckle or crosstalk, effectively limits the achievable imaging depth and spatial resolution, which in turn reduce its diagnostic capabilities. Recently, to speed up OCT imaging, Fourier-domain Full-Field OCT (FF-FD-OCT) has been introduced that uses a multipixel (2D) detector (camera) to parallelize signal acquisition. We have shown that destroying spatial coherence of a laser not only allows removing crosstalk noise [1], which is common with camera detection, but also reduces speckle size when imaging retina [2]. We have optimized the system by employing a multimode fiber for crosstalk reduction [3] and by implementing a fast preview mode [4] that enabled acquisition of high-resolution, high-contrast OCT images deep in retina [5].

Fig. 1(a) shows the FD-FF-OCT system that consists of a fast-tunable laser source, a Linnik interferometer and an ultrahigh-speed 2-D camera. The laser light is delivered to the interferometer by the help of 300 meters multimode fiber (with 50 μm core). Interference between photons backscattered from the retina and reflected from the reference mirror is detected by the camera after recombination with the beamsplitter. A stack of multispectral interferometric images is acquired within just 10 ms by tuning (in the range of ~80 nm) the wavelength of the laser while the camera acquires 60000 images per second. To derive retinal volumes, Fourier transform is performed on each pixel. The illumination path features a rod mirror that separated illumination path from that of the backscattered light to implement a fast preview mode with an additional (line) camera. OCT images in Fig. 1 were acquired *in vivo* from a human volunteer. Multiple 3D volumes were generated (each acquired in <10 ms) and stitched together to obtain a large field of view (FOV) of the retina (1.7 x 1.7 mm), as shown in *enface* (XY) projection in Fig. 1(b) and in axial (XZ) projection in Fig. 1(e). The images clearly demonstrate that high-contrast high-resolution images can be acquired all the way to the choroid. In conclusion, FD-FF-OCT, unlike other OCT techniques, is less sensitive to coherent noise and therefore allows imaging various retinal layers with higher quality and contrast promising to become a viable clinical tool in ophthalmology.

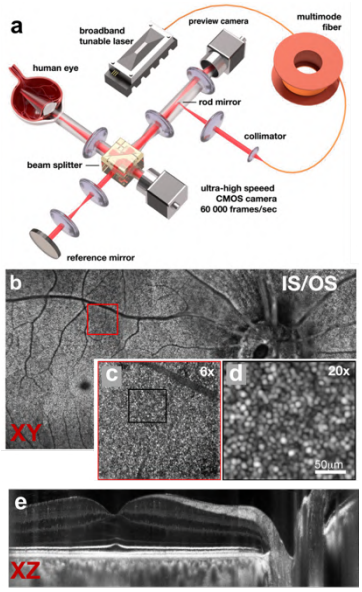


Fig. 1. (a) FD-FF-OCT system. (b) A large field-of-view and 15 μm thick image of inner segment/outer segment (IS/OS) of the retina. Red box in (b) image is shown zoomed-in to various degrees below in (c) and (d). The image reconstruction was numerically compensated (22nd order Zernike polynomials) for ocular aberrations revealing photoreceptor structure, seen clearly in (d). (e) Cross-sectional image along the papillomacular axis of the human retina.

Key words:Retinal imaging, Optical Coherence Tomography.

References

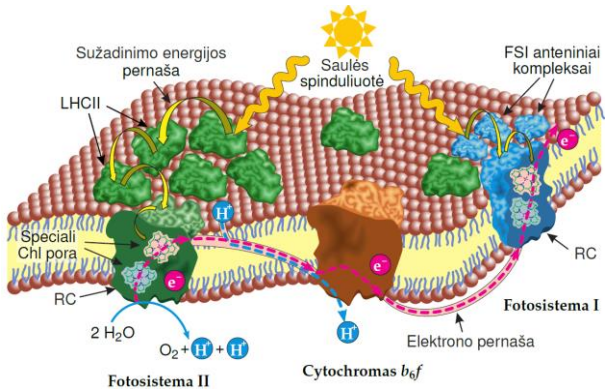
[1] P. Stremplewski, E. Auksorius, P. Wnuk *et al.*, Optica, 6(5), 608 (2019).
[2] E. Auksorius, D. Borycki, and M. Wojtkowski, Biomed. Opt. Exp., 10(12), 6390 (2019).
[3] E. Auksorius, D. Borycki, and M. Wojtkowski, Opt. Lett., 46(6), 1413 (2021).
[4] E. Auksorius, Opt. Lett., 46(18), 4478 (2021).
[5] E. Auksorius, D. Borycki, P. Wegrzyn *et al.*, arXiv preprint arXiv:2107.10672, (2021).

Sužadinimo energijos dinamika fotosintetiniuose šviesorankos kompleksuose

Excitation energy dynamics in photosynthetic light-harvesting complexes

Jevgenij Chmeliov[1,2]
[1]Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius
[2]Molekulinių darinių fizikos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
jevgenij.chmeliov@ff.vu.lt

Fotosintezė yra vienas svarbiausių Žemės gyvuosiuose organizmuose vykstančių procesų, kurio metu augalų, dumblių ir fotosintetinių bakterijų sugertos šviesos energija yra išsaugojama angliavandenių cheminio ryšio energijos pavidalu. Augaluose pirminiai fotosintezės vyksmai vyksta chloroplastų tilakoidų membranose esančiuose pigmentų (chlorofilų bei karotenoidų molekulių) ir baltymų superkompleksuose – vadinamosiose fotosistemose (1 pav.). Pigmentų spektrinės savybės bei jų tarpusavio išsidėstymas baltyminėje aplinkoje užtikrina itin efektyvią šviesos energijos sugertį ir sugeneruotų molekulių elektroninių sužadinimų – eksitonų – pernašą per šviesorankos anteną į fotosistemų centre esančius reakcijų centrus, kuriuose ši energija yra panaudojama krūviams atskirti.



1 pav. Augalų fotosintetinės membranos schematinė sandara

Minėti vyksmai pasižymi ypatingai dideliu kvantiniu našumu: įprastomis apšvietimo sąlygomis virš 80% šviesorankos antenoje šviesa sugeneruotų molekulinių sužadinimų pasiekia reakcijų centrus. Kita vertus, saulėtą dieną dėl baigtinės veikimo spartos reakcijų centrai įsisotina ir nespėja panaudoti visų sugertų fotonų energijos krūviams atskirti. Dėl to ženkliai išauga stipriomis oksidacinėmis savybėmis pasižyminčio singuletinio deguonies susidarymo pavojus. Pasirodo, stiprių fotopažeidimų augalai sugeba išvengti per milijonus evoliucijos metų išvystę keletą fotoapsaugos mechanizmų. Efektyviausias iš jų, veikiantis molekuliniu lygmeniu ir įsijungiantis ar išsijungiantis vos per keletą minučių priklausomai nuo apšviestumo sąlygų, išsklaido šviesorankos antenoje susikaupusį perteklinį sužadinimą šilumos pavidalu ir yra žinomas kaip nefotocheminis gesinimas.

Taigi pigmentų ir baltymų šviesorankos kompleksai fotosintezėje atlieka dvigubą vaidmenį: jie dalyvauja sugeriant šviesos fotonus ir pernešant jų energiją į reakcijų centrus, tačiau tuo pačiu yra atsakingi ir už fotosistemose savireguliaciją ir apsaugą nuo fotopažeidimų. Pastarasis vaidmuo leidžia augalui greitai prisitaikyti prie besikeičiančių aplinkos sąlygų, tačiau įvertinama, kad jo racionalus valdymas leistų net iki 30% padidinti augalų biomasės gamybą. Paskutinius du dešimtmečius daugelyje pasaulio laboratorijų vyko intensyvus abiejų šių vyksmų tyrinėjimas – tiek išskiriant fotosintetinius kompleksus ir atliekant jų įvairius laikinės skyros spektroskopinius matavimus, tiek nustatant jų erdvinę struktūrą bei kuriant teorinius sužadinimo energijos pernašos bei gesinimo modelius.

Pranešimo metu bus apžvelgti kelerių pastarųjų metų darbai, kurie buvo atlikti bendradarbiaujant su kitais Lietuvos ir užsienio mokslininkais siekiant išsiaiškinti sužadinimo energijos pernašos šviesorankos antenose ypatumus, sukurti šios pernašos mikroskopinį struktūra paremtą modelį bei atskleisti nefotocheminio gesinimo molekulinius mechanizmus.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, pigmentų ir baltymų kompleksai, energijos pernaša, nefotocheminis gesinimas, laikinės skyros fluorescencija.

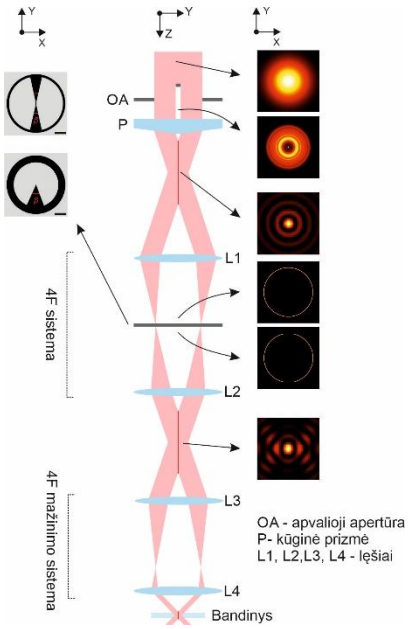
Asimetrinio Beselio pluošto taikymai skaidrių terpių apdirbimui

Asymmetrical Bessel beam for transparent material processing

Juozas Dudutis, Miglė Mackevičiūtė, Jokūbas Pipiras, Valdemar Stankevič, Gediminas Račiukaitis, Paulius Gečys
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
paulius.gecys@ftmc.lt

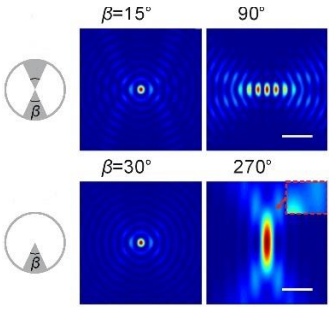
Beselio pluoštai yra tikslūs Helmholco lygties sprendiniai [1], todėl tokie pluoštai nepatiria difrakcijos, o jų skirstinys yra sudarytas iš intensyvios centrinės smailės ir be galo didelio skaičiaus aplinkinių žiedų. Praktikoje yra generuojami Beselio pluoštai, nedifraguojantys tik ribotame sklidimo nuotolyje, visgi yra itin patrauklūs skaidrių medžiagų apdirbimui formuojant ištęstas pažaidas stiklo tūryje. Pastaraisiais metais juntamas itin didelis susidomėjimas asimetriniais Beselio pluoštais ir jų taikymu mikro-apdirbimui [2–6].

Asimetrinis Beselio pluošto skirstinys gali būti generuojamas panaudojus kūginę prizmę bei papildomai moduliuojant pluoštą asimetriniais optiniais elementais arba apertūromis. Šiame darbe pristatysime asimetrinio Beselio pluošto generacijos tyrimą papildomai moduliuojant Beselio pluoštą piltuvėlio bei trikampio formos amplitudinėmis kaukėmis bei tokių pluoštų taikymą stiklų apdirbimui.

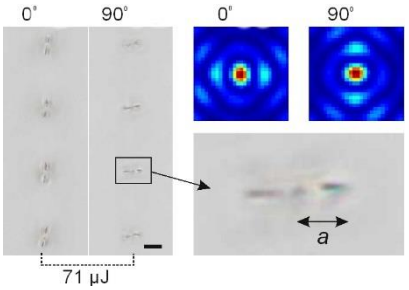


1 pav. Asimetrinio Besselio pluošto generavimo principinė schema.

Tyrimų metu Beselio pluoštas buvo generuojamas 170° viršūnės kampo kūgine prizme bei papildomai naudojant 4F atvaizdavimo sistemas siekiant kontroliuoti generuojamo pluošto erdvinio skirstinio geometrines charakteristikas. Papildomai į 4F sistemos Furjė plokštumą buvo statomos amplitudinės kaukės siekiant įvesti generuojamo pluošto asimetriškumą. Eksperimento schema pavaizduota 1 pav. Eksperimentų metu buvo naudojamos skirtingų kampų piltuvėlio bei trikampio formos amplitudinės kaukės. Amplitudinių kaukių įtaka generuojamo Beselio pluošto elipsiškumui vaizduojama 2 pav. Tuo tarpu stiklo tūryje atliktų pažeidimų nuotraukos vaizduojamos 3 pav. Kaip matyti įvestas pluošto asimetriškumas leido generuoti asimetrinius įtrūkius. Tuo tarpu sukant kaukę Beselio centrinės smailės atžvilgiu XY plokštumoje buvo įmanoma keisti pluošto asimetriškumo orientaciją bei kryptingų tūrinių modifikacijų formavimosi kryptį.



2 pav. Sumodeliuoti kūgine prizme generuojamo asimetrinio pluošto skirstiniai XY plokštumoje panaudojant skirtingų kampų piltuvėlio ir trikampio formos amplitudines kaukes.



3 pav. Tūrinės modifikacijos stikle, įrašytos Beselio pluoštu, panaudojant 25° trikampio formos kaukę.

Literatūra

[1] A. P. Stabinis and G. Valiulis, *Ultratrumpųjų Šviesos Impulsų Netiesinė Optika* (Leidykla TEV, 2008).
[2] J. Dudutis, P. Gečys, and G. Račiukaitis, Opt. Express **24**(25), 28433–28443 (2016).
[3] R. Meyer, R. Giust, M. Jacquot, J. M. Dudley, and F. Courvoisier, Appl. Phys. Lett. **111**(23), 231108 (2017).
[4] K. Mishchik, R. Beuton, O. Dematteo Caulier, S. Skupin, B. Chimier, G. Duchateau, B. Chassagne, R. Kling, C. Hönninger, E. Mottay, and J. Lopez, Opt. Express **25**(26), 33271 (2017).
[5] M. Jenne, D. Flamm, K. Chen, M. Schaefer, M. Kumkar, and S. Nolte, Opt. Express **28**(5), 6552–6564 (2020).
[6] J. Baltrukonis, O. Ulčinas, S. Orlov, and V. Jukna, J. Opt. Soc. Am. B **37**(7), 2121 (2020).

Fotoninių struktūrų technologijos ir praktiniai taikymai

Technologies and Practical Applications of Photonic Structures

Tomas Tamulevičius
Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas
Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
tomas.tamulevicius@ktu.lt

Šviesai skindant per skersine ar išilgine kryptimi dėsningai periodiškai moduliuotas sritis ji gali būti kryptingai išsklaidoma, efektyviai atspindima arba praeiti visiškai nepatyrusi intensyvumo nuostolių. Paprasčiausi tokių struktūrų pavyzdžiai yra vienmatės difrakcinės gardelės tačiau tai gali būti ir sudėtingi jų rinkiniai kaip hologramos ar metapaviršiai. Parenkant šviesą difraguojančių struktūrų periodą, geometriją bei optines savybes galima dėsningai valdyti pasirinkta kryptimi atskeliamą monochromatinės šviesos intensyvumą [1] ar polichromatinės šviesos spalvą [2]. Tai leidžia šias struktūras pritaikyti lazerio pluošto dalikliams ar optinės pasaugos nuo padirbinėjimo ženklams.

Daugiasluoksnės optinės struktūros išilgine sklidimo kryptimi priklausomai nuo sandaros gali veikti kaip antirefleksinės dangos, veidrodžiai ar šviesos sugėrikliai. Tam paprastai naudojamos plačiame optiniame diapazone skaidrios ir nesugeriančios dielektrinės medžiagos pasižyminčios kontrastingu lūžio rodikliu. Tačiau tam galima pasitelkti ir optiškai sugeriančias medžiagas, pvz. nanokompozitines dangas su tauriųjų metalų nanodalelėmis [3]. Paviršiaus plazmonų rezonansui būdinga sugertimi pasižyminčios dangos leidžia esminiai praplėsti efektyvios sugerties bei šviesos kritimo kampų darbinį intervalą.

Siekiant išgauti rekordinius difrakcijos efektyvumus galima pasitelkti daugiasluoksniuose dialektiniuose veidrodžius suformuotas difrakcines gardeles. Specializuotoje Littrow konfigūracijoje veikiantys difrakciniai elementai gali pasižymėti artimu 100% efektyvumu aktualiu ultra trumpų impulsų generavimo sistemose [4].

Jeigu skaidrių daugiasluoksnių dielektrinių dangų nusodinimas yra plačiai naudojama technologija įvairiai lazerinei optikai tuo tarpu sugeriančių sluoksnių taikymai yra vis dar vystomi. Reaktyvus magnetroninis metalo dulkinimas argono jonais acetileno atmosferoje leidžia nusodinti dielektrines amorfinės deimanto tipo anglies matricos dangas su įterptomis metalo nanodalelėmis (DLC:Me). Valdant nusodinimo sąlygas galima keisti metalo nandalelių koncentracija ir skirtinį taip kryptingai valdant dangų optines savybes [4].

Siekiant suformuoti artimų bangos ilgiui matmenų paviršines struktūras susiduriamas su optinės litografijos apribojimais. Kontaktinė UV litografija patikimai veikia iki 0,5-1,0 μm būdingų struktūrų matmenų. Holografinė litografija yra patraukli alternatyva kai reikalingas raštas yra periodinis. Naudojant trumpabangę (UV ar mėlyną) šviesą galima pasiekti 150-300 nm būdingų matmenų struktūras nes teorines šios litografijos apribojimas siekia pusę bangos ilgio. Šias struktūras galima naudoti refraktometriniams jutikliams [5]. Naudojant nuolatinės veikos lazeriu įrašymui pasitelkiamos fotojautrios medžiagos tačiau jos apsunkina tolimesnį periodinių struktūrų panaudojimą. Tiesiogine lazerinė abliacija daugelio spindulių interferenciniu lauku yra patraukli alternatyva nes įgalina periodinių struktūrų formavimą praktiškai bet kokioje medžiagoje. Buvo parodyta, kad 600-1000 nm periodo difrakcines gardeles galima suformuoti nanokompozitinėse DLC:Ag dangose [6] ar nikelio folijoje [2], kuri yra suderinama su apsaugos nuo padirbinėjimo ženklų tiražavimo technologija.

Holograminis efektas optinėse pasaugos nuo padirbinėjimo priemonėse yra stebėtojui pagavus vaizdinys tačiau tuo pačiu ir pilnai analitiškai aprašomas fizikinis reiškinys. Pasitelkus kūginės difrakcijos aprašymą buvo sukurtas algoritmas, kuris gali tiksliai suskaičiuoti iš difrakcinių gardelių aibės sudaryto piešinio spalvas [6] bei parengta jo realizacija programėlėje „HoloApp“ skirtoje išmaniajam įrenginiui [7].

Reikšminiai žodžiai: difrakcinė gardelė, nanokompozitinės dangos, holografinė litografija, apsaugos nuo padirbinėjimo ženklai, lazerio pluošto dalikliai.

Literatūra

[1] T. Tamulevičius, I. Gražulevičiūtė, A. Jurkevičiūtė, S. Tamulevičius, *Optics and Lasers in Engineering* **51** (10), 1185 (2013).
[2] T. Tamulevičius, M. Juodėnas, T. Klinavičius, A. Paulauskas, K. Jankauskas, A. Ostreika, Armantas, A. Žutautas, S. Tamulevičius, *Scientific Reports* **8**, 14245 (2018).
[3] S. Tamulevičius, Š. Meškinis, T. Tamulevičius, H.-G. Rubahn, *Reports on Progress in Physics* **81** (2) 024501 (2018).
[4] L. Stankevičius, T. Tamulevičius, A. Žutautas, M. Juodėnas, K. Juškevičius, R. Drazdys, S. Tamulevičius, *Optics and Laser Technology* **126**, 106071 (2020).
[5] T. Tamulevičius, I. Gražulevičiūtė, D. Urbonas, M. Gabalis, R. Petruškevičius, S. Tamulevičius, *Optics Express* **22** (22) 27462-27475 (2014).
[6] A. Jurkevičiūtė, G. Klimaitė, T. Tamulevičius, J. Fiutowski, H.–G. Rubahn, S. Tamulevičius, *Advanced Engineering Materials* **22** (3) 1900951 (2020)
[7] https://play.google.com/store/apps/details?id=edu.ktu.holoapp&hl=lt&gl=US

Daugiafonė litografija biomedicinos reikmėms

Multiphoton Lithography for Biomedical Applications

Aleksandr Ovsianikov[1]
[1]Institute of Materials Science and Technology, TU Wien (Technische Universität Wien), Getreidemarkt 9/308, 1060 Vienna, Austria
Aleksandr.Ovsianikov@tuwien.ac.at

Prof. Aleksandr Ovsianikov is a head of the research group 3D Printing and Biofabrication at the TU Wien (Vienna, Austria). He is a member of the Austrian Cluster for Tissue Regeneration and the board of directors of the international society of biofabrication. His research is dealing with the use of additive manufacturing technologies and bioprinting for tissue engineering and regeneration.

Main research interests:

- Lithography-based Additive Manufacturing Technologies
- Microfabrication, laser induced photochemistry
- Bio-compatible / degradable photopolymers
- Scaffold based tissue engineering
- Bioprinting / Biofabrication

Dr. Ovsianikov has background in laser physics and material processing with femtosecond lasers. A particular focus of his current research is the development of multiphoton lithography technologies for engineering of biomimetic 3D cell culture matrices, realization of novel tissue engineering scaffolds and microfluidic applications. He was awarded a prestigious Starting Grant in 2012 and a Consolidator Grant in 2017 from the European Research Council (ERC) for projects aimed at these topics.

Since 2004 Dr. Ovsianikov delivered multiple invited and keynote lectures, and has contributed to almost 100 publications. Together with Prof. Mironov and Prof. Yoo he is an editor of a living book project “3D Printing and Biofabrication” published by Springer in cooperation with Tissue Engineering and Regenerative Medicine International Society (TERMIS).

Dr. Ovsianikov is also a co-founder and a head of research of a TU Wien spin-off UpNano GbmH, aimed a commercialization of high-resolution 3D printing and Bioprinting, which received multiple awards, including the Austrian Startup of the year 2019.

Terahercinė vaizdinimo sistema, pagrįsta spinduliuotės pluoštelio formavimo metodais

Terahertz imaging systems based on beam engineering methods

Linas Minkevičius[1]
[1]Center for Physical Sciences and Technology, Department of Optoelectronics, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania.
linas.minkevicius@ftmc.lt

Miniaturization of terahertz (THz) imaging systems is a key-factor for increasing applicability in mobile unattended package inspection systems in airports or public places [1]. Practical potential of THz imaging systems for non-destructive testing encourages a search for a compact and practically convenient solutions. One of the important issues is assumed to the development of compact diffractive optics for the THz frequency range in order to boost an evaluation of practical hand-held terahertz imaging systems applications in real time. However, real objects under test, usually, are very different and can exhibit either strong or weak absorption. It raises excessive requirements for both sensing and measurement arrangements aiming to record qualitative image. The solution should be complex by combining components miniaturization effect with selective imaging methods.

In a given communication, the innovative THz beam forming, spatial filtering and terahertz digital holography techniques are discussed. The compact diffractive optics solutions for THz beam formation starting from high efficiency compact multilevel silicon phase Fresnel lenses [2], graphite based flexible lenses [3], Fibonacci [4] or Bessel diffractive elements for thick object inspection [5] are applied. Moreover, approach of advanced Airy beam-based phase elements for imaging objects under the obstacle are presented. Focusing performance of these elements are investigated both, theoretically and experimentally. Particular attention is directed to low absorbing objects imaging due to a poor signal-to-noise ratio and small contrast. To tackle these problems, routes of using spatial filtering methods like phase contrast or dark field spatial filtering can induce additional useful information to discriminate transparent objects. The principal experimental scheme of the THz imaging setup is presented in Fig. 1. The proposed methods exhibit enhancement in images contrast up to 30 dB and an order of magnitude increased signal-to-noise ratio [6].

Finally, advantages of the digital holographic technique will be presented by comparing the results with data of weak absorbing objects obtained via point-to-point, plane-to-plane (4 *f* setup) and the dark-field THz imaging approaches. Presented imaging techniques will impact wider THz implementation in practical applications, where weak absorbance of THz radiation in many cases is inherent feature of objects under test.

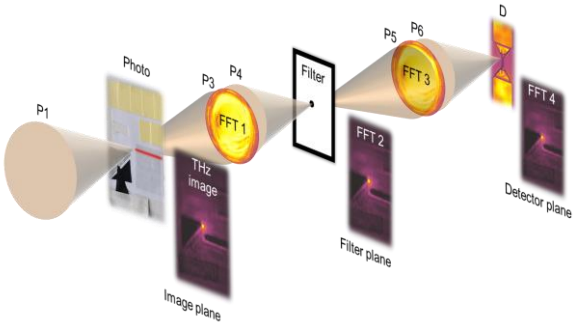


Fig. 1. An innovative terahertz imaging system based on compact diffractive optics and special filtering methods, where P - corresponds to focusing element.

Keywords: THz beam forming, spatial filtering, digital holography, Fibonacci, Bessel, diffractive element.

Literatūra

[1] Valzania L, Zolliker P, Hack E, Optica **6**(4), 518–23, (2019)
[2] L. Minkevičius, S. Indrišiūnas, R. Šniaukas, B. Voisiat, V. Janonis, V. Tamošiūnas, I. Kašalynas, G. Račiukaitis, and G. Valušis, Opt. Lett., **42**(10), 1875–1878 (2017).
[3] R. Ivaškevičiūtė-Povilauskienė, L. Minkevičius, D. Jokubauskis, A. Urbanowicz, S. Indrišiūnas, and G. Valušis, Opt. Mater. Express, **9**(11), 4438 (2019).
[4] D. Jokubauskis, L. Minkevičius, M. Karaliūnas, S. Indrišiūnas, I. Kašalynas, G. Račiukaitis, and G. Valušis, Opt. Lett., **43**(12), 2795, (2018).
[5] L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, and G. Valušis, Opt. Express, **27**(25), 36358 (2019)
[6] A. Siemion, L. Minkevičius, L. Qi, and G. Valušis, Opt. Lasers Eng., **139**, 106476 (2021).

Measuring detailed properties of stars and exoplanets

Hans Kjeldsen[1,2]
[1]Stellar Astrophysics Centre, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Ny Munkegade 120, 8000 Aarhus C, Denmark
[2] Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lithuania
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 most 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 exceedingly 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 determination of 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.

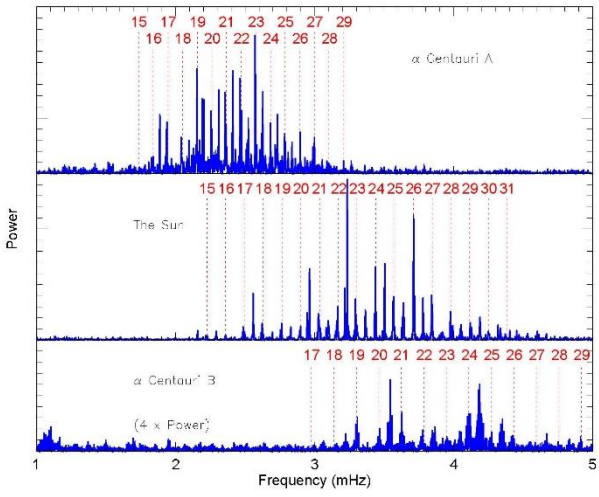


Figure 1. The power spectrum of oscillations in the the stars α Cen A, The Sun and α Cen B. The fiure shows the details of the p-mode structure, and we indicate the so-called large frequency separations for each star, which contain information on the basic properties (density).

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.

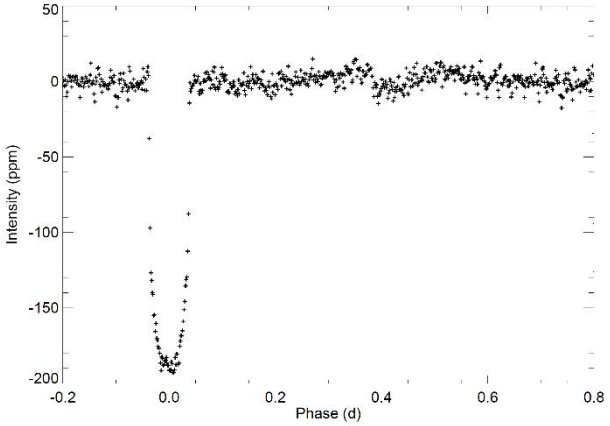


Figure 2. An example of an exoplanet transit in the star Kepler-10. The relative depth of the transit can be used to determine the relative size of the exoplanet (R(planet)/R(star) = 0.01254 ± 0.00013).

If we combine asteroseismology with planetary transit measurements one is able to obtain very acurate absolute values for the properties of both the host star as well as the exoplanet in orbit around a given star. Those meaurements 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 seires data from space combined with ground-based spectroscopy. I will also discuss and deminstrate why and how interational reserach collaborations are essential for the success of those reserach activities.

Key words: stars, exoplanets, space missions, asteroseismology

Fizikai Kaune tik šimtas?

Is Physics in Kaunas only One Hundred Years Old?

Judita Puišo
Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
puiso@ktu.lt

Fizikos mokslas Lietuvoje turi senas ir garbingas, daugiau nei 400 metų tradicijas. Fizika arba gamtos filosofija buvo dėstyta nuo 1579 metų Jėzaus draugijos (*Societas Jesu*) (jėzuitų) įkurtoje Vilniaus akademijoje (*Academia et universitas Vilnensis*) [1-2].

1773 metais, panaikinus jėzuitų ordiną ir akademiją pertvarkius į Vilniaus universitetą Fizikos paskaitos buvo skaitomos ir eksperimentai atliekami iki pat 1842 metų, t. y, kai buvo likviduota Medicinos chirurgijos akademija [1-2]. Todėl Fizikos buvo mokoma tik apskrities, vidurinėse ir vienuolynų mokyklose bei gimnazijose. Po 1863 m. sukilimo, uždarius Kėdainių, Panevėžio, Švenčionių, Telšių ir Vilniaus vidurines mokyklas, Vilniaus gubernijoje liko tik 3 gimnazijos, 1 realinė ir 1 aukštesnioji mergaičių mokykla, o Kauno gubernijoje 4 gimnazijos ir 1 realinė mokykla [1-2].

1918 m. vasario 16 d. Lietuvos Tarybai paskelbus Nepriklausomybę Lietuvos inteligentijai gimė mintis atkurti universitetą Lietuvoje.

1918 m. lapkričio 15 d. ministerių kabineto įsteigtas Švietimo ministerijos Aukštųjų mokyklų skyrius, kurio vedėju buvo Mykolas Biržiška, o vėliau Vincentas Čepinskis pateikė Valstybei Tarybai svarstyti atgaivinamo Vilniaus universiteto - 1832 m. uždarytojo universiteto teisių paveldėtojo, statutas.

1918 m. gruodžio 14 d. spaudoje paskelbus, kad iki 1919 m. sausio 1 d. bus priimami pareiškimai į Vilniaus universitetą, kuris pradės veiklą 1919 m. sausio 15 d. perimtuose iš vokiečių okupacinės valdžios pastatuose [1-5].

1919 m. sausio 5 d. Vilnių okupavus Sovietų Rusijos Raudonajai Armijai Vilniaus universitetas nebuvo atgaivintas [1-2].

1919 m. rugsėjo 5 d. buvęs Komercinės mokyklos direktorius Zigmas Žemaitis ėmėsi iniciatyvos ir parašė memorandumą, kuriame įrodinėjo, kad būtina steigti universitetą Kaune [1-2].

1919 m. spalio 6 -7 d. laikraštyje „Lietuva“ Zigmas Žemaitis, organizacinės grupės vardu paskelbė sumanymą steigti Aukštuosius kursus. Norintieji studijuoti buvo kviečiami pranešti organizatoriams bei pasirinkti specialybes. Aukštųjų kursų organizatoriai sulaukė 600 pareiškimų. Net ¾ ketvirtadaliai pareiškėjų pageidavo studijuoti matematikos, gamtos, technikos ir medicinos mokslus [1-2, 5].

Aukštieji kursai su šešiais skyriais, tarp jų ir Fizikos - matematikos skyrių, buvo įsteigti visuomenės iniciatyva. Aukštiesiems kursams išlaikyti buvo sudaryta visuomeninė organizacija - Aukštųjų mokslų draugija.

Aukštieji kursai Kaune buvo iškilmingai atidaryti 1920 m. sausio 27 d. vyrų gimnazijos salėje. Nors į pirmąjį Fizikos – matematikos skyrių pradžioje tik 5 klausytojai, Fizikos kursas buvo pradėtas dėstyti 1920 metais „Aušros“ gimnazijoje Fizikos kabinete. Fizikos, o ne chemijos paskaitas, greičiausiai netikėtai sau pačiam, pradėjo skaityti V. Čepinskis. Jis 1896 m. Ciuriche buvo išklausė garsaus fiziko H. Vėberio (*Heinrich Friedrich Weber* (*1843 -1912*) paskaitų kursą ir turėjo nemažą mokslinę biblioteką [1-2, 6]. 1921 m. Fizikos – matematikos skyrius persikėlė į buvusius Komercinės mokyklos rūmus, kur buvo įsteigtas Fizikos kabinetas ir auditorija ir Fizikos praktikos darbų laboratorija [1 - 4].

1922 m. vasario 16 d. iškilmingai atidarytame Lietuvos universitete Matematikos – gamtos fakultetas – tapo fizikos mokslo židiniu. Pagal statutą Matematikos ir gamtos fakultetui buvo numatyti uždaviniai: organizuoti gamtos ir matematikos mokslų dėstymą ir mokslinį darbą, rengti Lietuvos gimnazijos ir matematikos, fizikos, chemijos, biologijos mokytojus bei kitus šių sričių specialistus [1].

Matematikos – gamtos fakultete buvo įsteigtos net dvi Eksperimentinės ir Teorinės fizikos katedros. Eksperimentinis Fizikos katedrai iki 1926 m. rugsėjo 1 d. vadovavo prof. V. Čepinskis. Teorinės fizikos katedra iki pat 1930 m. neturėjo vedėjo. Fizikos katedros aptarnavo tris fakultetus: Matematikos – gamtos, Medicinos ir Technikos [1–4]. 1930 m. abi katedros pagal naująjį Vytauto Didžiojo universiteto statutą buvo sujungtos į vieną Fizikos katedrą [1–4].

„<...> *Aš turiu pripažinti, kad Aukštieji kursai turi savo silpnumą ir ydų bet tai reiškiasi ne tiek iš žmonių, kiek iš tų aplinkybių, kuriomis tenka dirbti, nes tos aplinkybės yra tokios sunkios, kad man per visą savo gyvenimą nė vienam universitete neteko tokio sunkaus darbo matyti. Man neteko net vidurinės mokyklos matyti, kur taip sunkiai vesti darbas*“ (V. Čepinskis, 1921 m. gruodžio 7 d.) [7].

Reikšminiai žodžiai: Aukštieji kursai, Fizikos katedra, Lietuvos universitetas, Vincentas Čepinskis

Literatūra

[1] I. Šenavičienė. Fizikos raida Lietuvoje 1920 – 1940. Vilnius 1982
[2] Fizikos istorija D. 1 1579 -1940, Vilnius „Mokslas“ 1988, 211 p.
[3] Lietuvos universitetas 1922.II.16 – 1927.II.16 Pirmųjų penkerių veikimo metų apyskaita. Kaunas, 1927, p. 216 - 251
[4] Lietuvos universiteto – Kauno Technologijos universiteto Fizikos katedra – 90, Kaunas, 2012, 3 - 55 p.
[5] Jonas Kubilius. Matematika Lietuvos aukštosiose mokyklose 1921 -1944 metais. Vilniaus universitetas, 2015, 9 – 22 p.
[6] Z. Mačionis, J. Čepinskis. Profesorius Vincas Čepinskis. Vilnius 1992, p.115 – 136
[7] Steigiamojo seimo darbai 1921 m. 31 sąsiuvinis, 147 posėdis, p.4.

Struktūriniai faziniai virsmai ir dinaminiai efektai hibridinėse medžiagose

Structural phase transitions and dynamic effects in hybrid materials

Mantas Šimėnas[1], Sergejus Balčiūnas[1], Šarūnas Svirskas[1], Martynas Kinka[1], Vidmantas Kalendra[1], Anna Gągor[2], Adam Sieradzki[3], Robertas Grigalaitis[1], Andreas Pöppl[4], Gunnar Jeschke[5], Aron Walsh[6], Miroslaw Mączka[2], Jūras Banys[1]
[1]Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania
[2]Polish Academy of Sciences, Institute of Low Temperature and Structure Research, PL-50-950 Wroclaw 2, Poland
[3]Wroclaw University of Science and Technology, Wybrzeze Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, Poland
[4]Leipzig University, Felix Bloch Institute for Solid State Physics, Linnestrasse 5, D-04103 Leipzig, Germany
[5]ETH-Zürich, Department of Chemistry and Applied Biosciences, Vladimir-Prelog-Weg 2, 8093 Zürich, Switzerland
[6]Imperial College London, Thomas Young Centre and Department of Materials, SW72AZ London, UK
mantas.simenas@ff.vu.lt

Recently, hybrid organic-inorganic materials attracted exceptional attention due to their remarkable gas sorption, optoelectronic, multiferroic, barocaloric and other functional properties originating from a tight interplay between the organic and inorganic motifs.

A highly promising class of such materials is AMX_3 hybrid perovskites, where A is an organic molecular cation, M is a metal ion, and X represents an organic or inorganic anionic linker. Among hybrid perovskites, metal formate frameworks $[A][M(HCOO)_3]$ and lead halides $APbX_3$ (X = Cl, Br, I) (see Fig. 1) are the most promising families due to their multiferroic and photovoltaic properties, respectively. The majority of these compounds exhibit structural phase transitions followed by the molecular cation ordering and framework deformation [1].

Another class of interesting hybrid materials is metal-organic frameworks (MOFs), which exhibit remarkable porosity utilizable for gas absorption, catalysis and chemical sensing. The organic linkers in MOFs are embedded in a porous crystalline lattice providing a handle to tune their dynamic behaviour, which in turn can affect the chemical and physical properties of these compounds [1].

Here, we use a multitechnique experimental and theoretical approach to study the aforementioned phenomena in hybrid perovskites and MOFs. The EPR and dielectric spectroscopies are used to elucidate the cation dynamics, phase transition mechanism, lattice distortion and possible ferroelectric nature of metal formate frameworks. In addition, we show that EPR spectroscopy can be used to excite and read the methyl group tunnel coherence in this class of compounds [2]. We also use the broadband dielectric, ultrasonic and vibrational spectroscopies to probe frustration of electric dipoles and determine phase diagrams of mixed-cation lead halide perovskites revealing signatures of a peculiar dipolar glass phase [3,4]. Finally, we also show how dielectric spectroscopy can help to elucidate emergence of the coupled rotor dynamics upon tuning of the steric linker interactions in MIL-53 MOF [5].

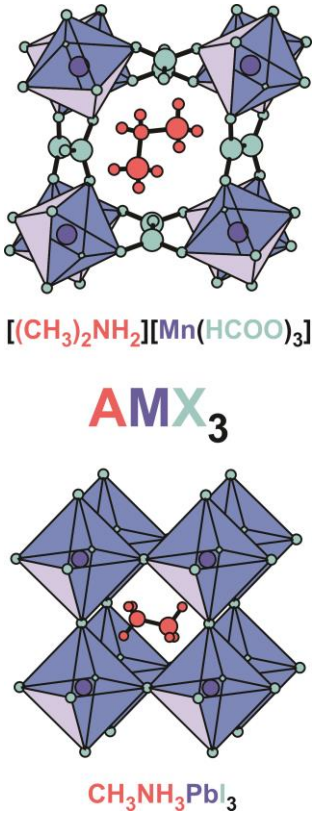


Fig. 1. Representatives of formate (top) and lead halide (bottom) hybrid perovskites investigated in this work.

Keywords: hybrid material, MOF, phase transition, dynamics, EPR, dielectric spectroscopy

Literature

[1] M. Ptak, A. Sieradzki, M. Šimėnas, M. Maczka. Coord. Chem. Rev. (2021).
[2] M. Šimėnas, D. Klose, M. Ptak, K. Aidas, M. Mączka, J. Banys, A. Pöppl, G. Jeschke. Sci. Adv. **6**, eaba1517 (2020).
[3] M. Šimėnas, S. Balčiūnas, S. Svirskas, M. Kinka, M. Ptak, V. Kalendra, A. Gągor, D. Szewczyk, A. Sieradzki, R. Grigalaitis, A. Walsh, M. Mączka, J. Banys. Chem. Mater. **33**, 5926 (2021).
[4] M. Šimėnas, S. Balčiūnas, J. N. Wilson, S. Svirskas, M. Kinka, A. Garbaras, V. Kalendra, A. Gagor, A. Szewczyk, A. Sieradzki, M. Maczka, V. Samulionis, A. Walsh, R. Grigalaitis, J. Banys. Nat. Comm. **11**, 5103 (2020).
[5] A. Gonzalez-Nelson, S. Mula, M. Šimėnas, S. Balčiūnas, A. R. Altenhof, C. S. Vojvodin, S. Canossa, J. Banys, R. W. Schurko, F.-X. Coudert, M. A. van der Veen. JACS **143**, 12053 (2021).

Dvimatės tauriųjų metalų nanostruktūros optiniams taikymams

2-D nanostructures of noble metal nanoparticles for optical applications

Sigitas Tamulevičius[1,2],
[1]Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko g. 59, LT-51432 Kaunas
[2]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
Sigitas.Tamulevicius@ktu.lt.lt

Pranešime pristatoma Lietuvos mokslo premija apdovanoto darbo "Mikro/nanostruktūros ir nanomedžiagos jutikliams, fotonikai ir energijos generavimui (2004-2018) (autoriai dr. Rimantas Gudaitis, dr. Šarūnas Meškinis, habil. dr. Sigitas Tamulevičius, dr. Tomas Tamulevičius) viena iš nagrinėtų temų, susijusi dvimačių nanostruktūrų formavimu, jų optinėmis savybėmis ir taikymais fotonikoje [1-5].

Yra žinoma, kad šviesa gali rezonansiškai sąveikauti su tauriųjų metalų nanodalelėmis, kuriose sužadinami kolektyviniai laidumo elektronų virpesiai. Šis reiškinys stebimas, kai nanodalelių matmenys yra mažesni už šviesos bangos ilgį ir yra vadinamas lokalizuotu paviršiaus plazmonų rezonansu (*angl.* Localized Surface Plasmon Resonance - LSPR). LSPR smailės intensyvumas ir plotis atspindi energijos praradimo greitį rezonansinėje sistemoje, lemiantiems šio reiškinio panaudojimą įvairioms biojutiklių, fotokatalizės, nanolazerių ir kt. taikymams. Kaip taisyklė, dėl procesų, susijusių su spinduliuotės slopinimu ir depoliarizacija, pavienėms nanodalelėms būdingos plačios LSPR smailės. Antra vertus, nanodalelių rezonanso kokybės faktorių galima žymiai padidinti, jas dėliojant į tvarkingus dvimačius masyvus. Tokiu atveju plazmoninių nanodalelių išsklaidyta šviesa difrakcijos dėka gali sąveikauti su gretimomis nanodalelėmis. Tokios tvarkingos nandalelių dvimatės nanostruktūros gali būti naudojamos įvairioms fotonikos reikmėms.

Pranešime pristatoma dvimačių tauriųjų metalų (sidabro, aukso) nanodalelių struktūrų formavimo būdai tam naudojant koloidinius nanodalelių tirpalus bei įvairius padėklus. Parodyta, kad dvimatės nanodalelių struktūros, išdėliotos porėtajame aliuminio oksido padėkle gali efektyviai stiprinti Ramano sklaidos signalą, ir gali būti naudojamos kaip efektyvūs paviršiaus sustiprinto Ramano sklaidos padėklai.

Darbe aptariamas kapiliarinių jėgų indukuotas nanodalelių išdėstymo (*angl.* Cappilary Assisted Particle Assembly) būdas tvarkingose dvimatėse struktūrose bei tam procesui reikalingų kaukių gamybos etapai. Buvo ištirtas skirtingų tirpiklių vaidmuo, aplinkos drėgmės bei padėklo temperatūros įtaka, kuriant tvarkingas 2-D nanometrines struktūras. Parodyta, kad naudojant elektroninę litografiją, giluįjį joninį ėsdinimą bei dvimatės nanometrinės struktūros replikavimą polimerinėje (PDMS) matricoje galima formuoti didelio ploto (kvadratinių centimetrų) aukštos užpildymo kokybės dvimates sidabro nanodalelių (nanokubų, nanosferų) struktūras, kuriose stebėta tolimojo elektromagnetinio lauko ir atskirų nanodalelių indukuoto elektrinio dipolio sąveika, užtikrinanti tokių struktūrų rezonansinį atsaką – paviršiaus gardelės rezonansą (*angl.* Surface Lattice Resonance). Rezonansui buvo būdinga aukšta rezonanso kokybės faktoriaus (Q) vertė, siekianti 80. Taip pat parodėme, kad sukurti dvimačiai masyvai yra stabilūs natūralioje aplinkoje taip pat demonstruoja paviršiaus gardelės rezonanso reiškinį įvairiose aplinkose, taip sukurdami prielaidas nanodalelių funkcionalizavimui (biojutiklių reikmėms) ar užpildant tūrį optiškai aktyviomis medžiagomis (nanolazerių kūrimui). Verta paminėti, kad metodas neapsiriboja vien naudotomis Ag nanodalelėmis-savaiminis nanodalelių surinkimas gali būti naudojamas įvairių medžiagų ir nanodalelių formų dvimačių piešinių sukūrimui.

Pristatyme taip pat nagrinėjamos tauriųjų metalų nanodalelių bei jų tvarkingų masyvų kolektyvinio optinio atsako laikinės priklausomybės, iliustruojančios energijos perdavimo ir relaksacijos mechanizmus.

Reikšminiai žodžiai: tauriųjų metalų nanodalelės, lokalizuotas paviršiaus plazmonų rezonansas, paviršiaus gardelės rezonansas, dvimatės nanostruktūros

Literatūra

[1] M. Juodėnas, D. Peckus, T.Tamulevičius, Y. Yamauchi, Tamulevičius, Sigitas; J. Henzie, ACS Photonics., **7** (11), 3130-3140, (2020).
[2] M. Juodėnas, T.Tamulevičius, J. Henzie, D. Erts, S. Tamulevičius, ACS Nano, **13** (8), 9038-9047, (2019).
[3] D. Virganavičius, M. Juodėnas, T. Tamulevičius, H. Schift, S. Tamulevičius, Applied Surface Science, **406**, 136-143 (2017).
[4] D.Peckus, H. Rong, L. Stankevičius, M. Juodėnas, S.Tamulevičius, T. Tamulevičius, J. Henzie, Journal of Physical Chemistry C., **121** (43), 24159-24167, (2017).
[5] U. Malinovskis, R. Poplausks, D. Erts, K. Ramser, S.Tamulevičius, A. Tamulevičienė, Y. Gu, J. Prikulis, Nanomaterials, **9**, (4), 1-10, (2019).

Organiniai fotopuslaidininkiai naujos kartos saulės elementams: nuo idėjos link komercializavimo

Organic photoconductors for next-generation solar cells: from idea to commercialization

Vytautas Getautis
Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, LT 50254 Kaunas
vytautas.getautis@ktu.lt

Dėl stipriai padidėjusios CO_2 koncentracijos šylant žemės klimatui ES įsipareigojo iki 2030 m. pasiekti, kad 25% suvartojamos elektros energijos būtų gauta iš atsinaujinančių šaltinių. Saulės energija yra pats galingiausias atsinaujinančios energijos šaltinis. Žemės paviršius per valandą gauna apie 178 TWh Saulės energijos, tuo tarpu metinis pasaulio poreikis tėra 111 TWh. Tinkamai ištobulinus saulės elementus (SE), galima visiškai patenkinti visuomenės energijos poreikį. Šiuo metu daugiausia (apie 90 proc.) yra naudojami polikristalinio silicio SE, tačiau juos gaminti brangu ir sudėtinga. Pastarąjį dešimtmetį saulės energetikoje sparčiai kelią skinasi organiniai bei hibridiniai SE. Tarp pastarųjų proveržiu išsiskiria perovskitiniai saulės elementai (PSE), kurie efektyvumu jau prilygsta komerciniams. Per pastaruosius penkerius metus, kuriant naujos kartos SE, didelio susidomėjimo objektu tapo hibridiniai SE, veikiantys perovskitų bei TiO_2 pagrindu. Jų efektyvumas jau viršijo 25% [1]. Šie elementai lyginant su komerciniais silicio SE pasižymi konstrukcijos paprastumu bei pigiomis žaliavomis [2]. Tad visiškai realu, kad šių SE komercializacija, startavusi 2021 m., įgaus didžiulį pagreitį.

Šioje srityje intensyviai darbuojasi kelios dešimtys žinomų kompanijų, kurios konstruoja bei optimizuoja perovskitinius SE. Prognozuojama, kad ši technologija ateityje labai išplis, o 2028 m. PSE efektyvumas sieks net 30%. Kitas labai svarbus šios technologijos aspektas – ji gerai dera su dabartiniais rinkoje išplitusiais silicio SE. Pastarieji ir PSE kartu gali sudaryti tandeminius SE, kurių našumas yra didesnis negu šių atskirų SE. Tokiu būdu dabar Lietuvoje egzistuojanti saulės elementų pramonės infrastruktūra gali būti sėkmingai pritaikyta bei efektyviai išnaudojama naujos kartos SE kūrimui.

Įprastą PSE sudaro švino halogenido perovskito sluoksnis, įterptas tarp elektronus transportuojančio TiO_2 bei organinio skyles transportuojančio sluoksnių, patalpintų tarp elektrodų. Būtent *p*-tipo organinis puslaidininkis daro didžiausią įtaką PSE efektyvumui bei nulemia prietaiso ekonomiškumą.

Nepaisant didelių pastangų, skirtų naujoms skylių transportavimo medžiagoms kurti, šioje srityje vis dar dominuoja 2,2`,7,7`-tetrakis(*N*,*N*-di-*p*-metoksifenilamino)-9,9-spirobifluorenas (Spiro-OMeTAD). Deja, jis yra brangus dėl sudėtingos sintezės, be priedų pasižymi nedideliu laidumu (10^{-5} S cm^{-1}), o krūvininkų judris tesiekia $10^{-4} cm^2V^{-1}s^{-1}$ [3]. Dėl šios priežasties joniniai ar *p*-tipo priedai, kaip ličio bis(trifluorometilsulfonil)imidas (LiTFSI), yra pridedami Spiro-OMeTAD laidumui bei krūvininkų judriui padidinti. Šių priedų kiekio optimizavimas reikalauja papildomų darbo bei laiko sąnaudų, jie yra brangūs, todėl jų naudojimas ne tik mažina prietaiso stabilumą, bet ir didina galutinę kainą.

Šiame pranešime bus pristatyti KTU Organinės chemijos katedros Organinių puslaidininkių sintezės mokslinėje grupėje atliekamų skyles transportuojančių mažų molekulių, skirtų perovskitiniams saulės elementams, tyrimų molekulinės inžinerijos srityje rezultatai. Mūsų grupei pavyko sukurti naujas teigiamus krūvininkus pernešančių junginių klases, kurios prilygsta ar yra net geresnės už Spiro-OMeTAD. Nauji *p*-tipo organiniai puslaidininkiai, pasižymintys puikia krūvininkų pernaša, buvo susintetinti vienu ar dviem etapais iš komerciškai prieinamų ir palyginti nebrangių pradinių medžiagų, todėl galutinė tikslinių produktų kaina, lyginant su „Spiro-OMeTAD“, sumažėjo kelis kartus. Dėl gero tirpumo įprastuose organiniuose tirpikliuose ir puikių elektrinių savybių šios molekulės yra labai patrauklios komerciniams fotovoltiniams prietaisams. Nauji organiniai puslaidininkiai užpatentuoti JAV, Europoje, Japonijoje, P. Korėjoje bei Kinijoje. Dviejų patentų licencijas įsigijo Tokyo Chemical Industry Co., Ltd. bei Švedijos kompanija „Dyenamo“.

Reikšminiai žodžiai: organiniai fotopuslaidininkiai, krūvininkų judris, perovskitiniai saulės elementai

Literatūra

[1] Best Research-Cell Efficiency Chart. Photovoltaic Research. NREL (2021): https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html
[2] Y. Rong, Y. Hu, A. Mei, H. Tan, M.I. Saidaminov, S.S. Il, M.D. McGehee, E.H. Sargent, H. Han. Science **361**, eaat8235 (2018).
[3] T. Leijtens, I-K. Ding, T. Giovenzana, J.T. Bloking, M.D. McGehee, A. Sellinger. ACS Nano **6**, 1455 (2012).

ŽODINIAI PRANEŠIMAI

1 dalis

Biofizika ir medicinos fizika **O1-O3**

Cheminė fizika ir technologiniai taikymai **O4**

Lazerių fizika ir technologijos **O5**

Teorinė, statistinė ir skaičiuojamoji fizika **O6-O8**

Nanomokslas ir nanotechnologijos **O9-O13**

Fizikos pedagogika ir edukologija, istorija, terminija ir mokslo politika **O14-O17**

Kitos su fizika susijusios temos **O18**

$TPPS_4$ molekulinių nanostruktūrų saviorganizacija į didelius „jūros ežių“ tipo agregatus

Self-assembly of $TPPS_4$ molecular nanostructes into the giant “sea urchin” type aggregates

Marijus Plečkaitis[1,2,3], Fayez Habach[4], Lukas Kontenis[2,5], Gábor Steinbach[6,7,8], Greta Jarockytė[1,2,3], Agnė Kalnaitytė[2], Ildikó Domonkos[9], Parveen Akhtar[9], Mehdi Alizadeh[2], Saulius Bagdonas[2], Vitalijus Karabanovas[1,2,10], Győző Garab[8,9,11], Ričardas Rotomskis[1,2], Virginijus Barzda[2,4,12]

[1]Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3B, LT-08406, Vilnius
[2]Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223, Vilnius
[3]Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[4]Cheminių ir fizinių mokslų fakultetas, Toronto Misisogos universitetas, Misisogos kl. 3359, Misisoga, L5L IC6, Kanada
[5]„Light Conversion“, Keramikų g. 2B, LT-10233, Vilnius
[6]Ląstelių vaizdinimo laboratorija, Biologinių tyrimų centras, Eötvös Loránd tyrimų tinklas, Temesvári g. 62, 6726 Segedas, Vengrija
[7]Biofizikos institutas, Biologinių tyrimų centras, Eötvös Loránd tyrimų tinklas, Temesvári g. 62, 6726 Segedas, Vengrija
[8]Biofotonika Research and Development Ltd., Dózsa g. 7, Segedas 6720, Vengrija
[9]Augalų biologijos institutas, Biologinių tyrimų centras, Eötvös Loránd tyrimų tinklas, Temesvári g. 62, 6726 Segedas, Vengrija
[10]Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
[11]Fizikos departamentas, Mokslų fakultetas, Ostravos universitetas, Chittussiho 10, CZ-710 00 Ostrava, Čekija
[12]Fizikos fakultetas, Toronto universitetas, Šv. Jurgio g. 60, Torontas, M5S 1A7, Kanada
marijus.pleckaitis@nvi.lt

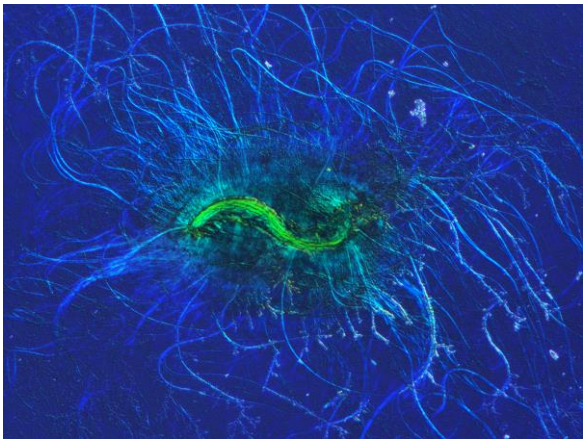
Spontaninė molekulinė saviorganizacija lemia tvarkių agregatų formavimąsi. Ji atlieka esminę rolę abiogenezėje. Tai natūralus procesas, kuriam vykstant iš paprastų organinių junginių ėmė formuotis gyvybė [1].

Mezo-tetra(4-sulfonatofenil)porfinas ($TPPS_4$) plačiai tiriamas dėl gebėjimo formuoti nekovalentines supramolekulines struktūras [2,3]. Visgi $TPPS_4$ molekulių saviorganizacijos principai į kompleksiškas, hierarchines mikrostruktūras nėra aiškiai suprantami, tad ir tapo mūsų tyrimo tikslu.

Išskirtiniai, kelių šimtų mikrometrų dydžio, jūros ežį primenantys $TPPS_4$ agregatai (GSU, *angl.* „giant sea urchin“) suformuoja centrinę, vamzdinę šerdį, kuri pasidengia radialiai besikerojančiais filamentais (1 pav.). Pastarieji, šerdies paviršiaus atžvilgiu, yra orientuoti įvairiais kampais, ir nors patys nesišakoja, gali pintis tarpusavyje bei formuoti filamentų pluoštus.

Pasitelkdami fluorescencinę spektrinės skyros mikroskopiją parodėme, jog tiek GSU centrinė šerdis, tiek filamentai pasižymi $TPPS_4$ J- ir H-agregatams būdingomis spektrinėmis juostomis (nors šerdies fluorescencija (FL) buvo gesinama, filamentai demonstravo didelio intensyvumo FL). Kita vertus, pastebėjome, jog išdžiovinus agregatą, filamentų FL intensyvumas ima mažėti, o šerdis savo ruožtu paveikiama mažiau ir išlaiko santykinai intensyvesnę fluorescenciją. Fluorescencija detektuoto linijinio dichroizmo (FDLD) mikroskopija atskleidė, jog J-agregatų sugerties dipoliai yra orientuoti išilgai filamentų ašiai. Lygindami FDLD ir skenuojančios elektroninės mikroskopijos rezultatus nustatėme, jog centrinė šerdis sudaryta iš daugiasluoksnių kaspinų, kurie besisukdami aplink centrinę ašį, formuoja vamzdį.

Poliarimetrine antros-harmonikos generacijos (SHG) ir trečios-harmonikos generacijos (THG) mikroskopija užfiksuoti intensyvūs signalai filamentuose ir nustatyta, kad netiesiniai dipoliai yra orientuoti lygiagrečiai filamentų ašiai. Tačiau dėl panašios į centrosimetrinę struktūros, centrinė šerdis turėjo labai silpną SHG signalą. Itin didelis chiralinis netiesinis jautrumas (*angl.* „chiral nonlinear susceptibility“) indikuoja tai, jog filamentai formuojasi spirale. Tyrimų metu parodėme, jog $TPPS_4$ molekulės suformuoja skirtingo tipo agregatus – nanovamzdelius ir nanogranulinius agregatus. Šiems besijungiant tarpusavyje, išauga GSU tipo agregatai – sudėtingų biologinių struktūrų prototipai – kurios galima pritaikyti netiesinėje mikroskopijoje.



1 pav. $TPPS_4$ GSU agregatas, gautas DIC mikroskopija

Reikšminiai žodžiai: Mezo-tetra(4-sulfonatofenil) porfinų ($TPPS_4$) agregatai, saviorganizacija, nanostruktūros, harmonoforai, poliarimetrinė antros harmonikos generacijos mikroskopija, trečios harmonikos generacijos mikroskopija.

Literatūra

[1] S. Tirard, in *Encyclopedia of Astrobiology* (Eds.: R. Amils, M. Gargaud, J. Cernicharo Quintanilla, H.J. Cleaves, W.M. Irvine, D. Pinti, M. Viso), Springer, Berlin, Heidelberg, **2014**, pp. 1–1.
[2] O. Ohno, Y. Kaizu, H. Kobayashi, *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 4128–4139.
[3] N. C. Maiti, S. Mazumdar, N. Periasamy, *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 1528–1538.

Šviesos sukelti Cd kvantinių taškų poveikiai vienaląsčių dumblių autofluorescencijai

Light-mediated effects of Cd quantum dots on the autofluorescence of unicellular microalgae

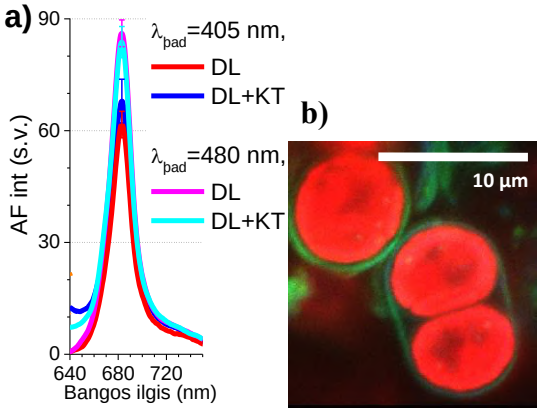
Agnė Kalnaitytė, Saulius Bagdonas
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
agne.kalnaityte@ff.vu.lt

Kvantinių taškų (KT) fotoliuminescencijos (FL) gesimas švitinant juos nuolatine spinduliuote ir naudojant kaip žymeklius vis dar išlieka problema. Kadangi KT fizikochemines savybes gali paveikiti apšvietimo sąlygos [1], KT FL pokyčiai tampa itin svarbiais, įvertinant nanodalelių (ND) likimą biologinėje aplinkoje. Pirmiausia KT FL stabilumą vaizdinant paveikia kintanti paviršiaus dangalo struktūra, o vėliau, yrant susikaupusiems organizme KT, galimas apsinuodijimas sunkiaisiais metalais, pvz., kadmiu. Dėl tiesioginio kontakto su aplinka vienaląsčiai dumbliai yra parankūs modeliniai organizmai tiriant ekotoksinius veiksnius. Dumblių ląstelių (DL) autofluorescencija (AF) taikoma spektroskopiniais metodais vertinant fotosintezės procesuose dalyvaujančių pigmentų pokyčius, taip atskleidžiant ir toksinius ląstelėms veiksnius. Įvertinus Cd KT fotostabilumą terpėje su vienaląsčių gėlavandenių *Scenedesmus sp*. ir *Chlorella sp*. DL, spektroskopiniais ir mikroskopiniais metodais tirti KT sukelti dumblių AF pokyčiai bei stebėtas ND poveikis DL fotoadaptaciniam atsakui [2].

Nustatyta, kad joninės terpės sukeltas bei švitinimo paskatintas CdTe-MSA KT FL intensyvumas mažėja lėčiau DL aplinkoje, sumažėjus terpės jonų sąveikai su KT paviršiumi dėl jų kontaktų su dumblių ląstelėmis bei ekstraląsteliniais produktais,o KT lieka ankstyvesnėje fotomodifikacijos stadijoje.

DL AF spektrą su būdinga intensyvia juosta ties 683 nm ir šlaitu ties 740 nm labiausiai lemia chlorofilai (1 pav. a). Kontroliniai matavimai atskleidė, kad DL AF intensyvumas eksperimento dienomis didėjo, bet ne bandiniuose su KT. DL bandinių AF registruota periodinio dirbtinio apšvietimo sąlygomis (I grupė) ir natūralioje netiesioginėje saulės šviesoje (II grupė). Pakeistus švitinimo sąlygas, II grupės DL bandinių normuotuose AF spektruose intensyvumas santykinai padidėjo ilgabangėje šlaito srityje dėl spektrinio heterogeniškumo ir atspindi skirtingus santykinius fotosistemų I ir II fluorescencijos signalų įnašus, kurie priklauso nuo šviesos sąlygų augalo augimo metu. Dumblių spektriniai pokyčiai bandiniuose su KT atskleidė, kad DL adaptacinis atsakas buvo silpnesnis.

Nors DL AF intensyvumo mažėjimas jau buvo užregistruotas antrą inkubacijos su CdTe KT dieną, vertinant spektrinius KT duomenis, ND degradacija nėra tikėtina pradinio dumblių atsako priežastis. Net po savaitės inkubacijos vis dar buvo stebėta KT FL, o vaizdinimas mikroskopu neatskleidė ląstelių tankio pokyčių, būdingų tiesioginei DL inaktyvacijai. Fazinio kontrasto vaizduse nenustatytas akivaizdus žaliojo chlorofilo kiekio sumažėjimas, tačiau AF vaizduose pastebėti KT FL skirtumai ir tarp skirtingų ląstelių, ir tarp dumblių rūšių. Be to, nors *Chlorella sp*. dumblių AF intensyvumas nesumažėjo, vaizduose, gautuose konfokaliniu fluorescenciniu mikroskopu, matyti, kad kai kurios DL turi apvalkalą, apgaubiantį kelias ląsteles (1 pav. b). Šio membraninio apvalkalo fluorescencija pateko į žalią kanalą (500-590 nm), kuriame detektuojama ir KT FL, todėl tikėtina, kad KT susikaupė būtent šioje membranoje ir nepateko į ląstelių vidų. Kadangi membranos aplink kelias ląsteles susidaro tik atitinkamu. dumblių gyvavimo laikotarpiu (dalijimosi metu, ar nepalankiomis aplinkos sąlygomis), tad KT sąveika su DL priklauso ne tik nuo paveiktų ląstelių rūšies, bet ir būsenos.



1 pav. a) Vienaląsčių dumblių AF spektrai (I grupė), užregistruoti be KT ir po 1 val. inkubacijos su CdTe-MSA (25 µg/ml); žadinta ties 405 nm ir 480 nm. b) Vienaląsčių DL fluorescencijos vaizdai po paros inkubacijos su KT (100 µg/ml) užregistruoti konfokaliniu fluorescenciniu mikroskopu. Žadinta diodiniu lazeriu $\lambda_{žad}$ = 405 nm.

Gauti rezultatai aktualūs aiškinant šviesos poveikio prigimtį hidrofiliniams KT ir jo mechanizmus, ieškant sprendimų, pagerinti KT fotostabilumą biologinėse aplinkose, ir skatinant naujas puslaidininkinių ND panaudojimo galimybių.

Reikšminiai žodžiai: kvantiniai taškai, fotostabilumas, autofluorescencija.

Literatūra

[1] A. Kalnaitytė, S. Bagdonas, R. Rotomskis. The dose-dependent photobleaching of CdTe quantum dots in aqueous media. J Lumin, 201, 434–44, (2018).

[2] A. Kalnaitytė, S. Bagdonas, Light-mediated effects of CdTe-MSA quantum dots on the autofluorescence of freshwater green microalgae: Spectroscopic studies, J Photoch Photobio B, 199, 111629, (2019).

Elektrofiziologiniai ir optiniai metodai augalų fiziologijos mįslėms įminti

Electrophysiological and optical methods to solve riddles of plant physiology

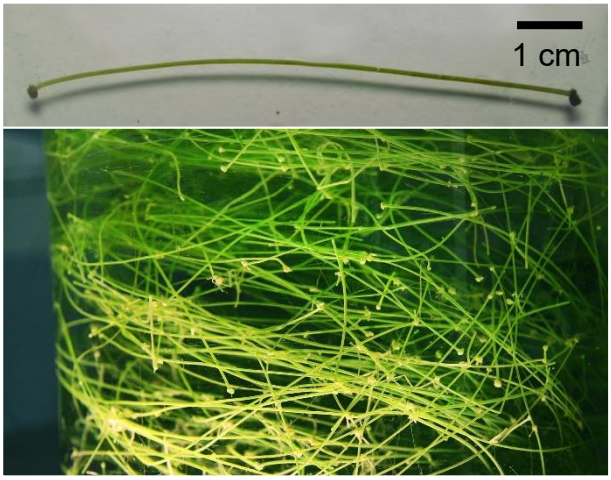
Vilmantas Pupkis[1], Aušrinė Navickaitė[1], Indrė Lapeikaitė[1], Vilma Kisnierienė[1], Saulius Bagdonas[2]
[1]Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
vilmantas.pupkis@gmc.vu.lt

Augant pasaulio gyventojų skaičiui, vis aktualesnės tampa agrokultūrinės kokybės gerinimo, derliaus gausinimo ir ilgalaikio jo išlaikymo problemos. Neinvaziniai augalų fiziologinės būsenos stebėjimo realiu laiku metodai ir jų tobulinimas tampa būtinybe.

Stresinis stimulas (elektrinis, mechaninis, cheminis, terminis, šviesos intensyvumo pokyčio) augaluose gali inicijuoti elektrinių signalų generavimą. Augalu sklindantys membranos potencialo pokyčiai – veikimo potencialas, variabilus potencialas ir sisteminis potencialas – yra pagrindiniai elektrinių signalų tipai augaluose. Juos sąlygoja pasyvių ir aktyvių jonų pernašos sistemų (kanalų ir pompų) aktyvumo kitimas laike [1, 2].

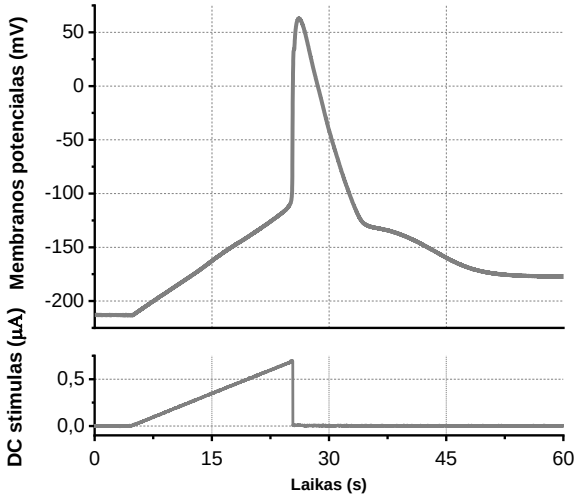
Žinoma, kad elektriniai signalai augaluose gali sukelti įvairių fiziologinių atsakų – genų raiškos pokyčių, inicijuojama streso hormonų sintezė, intensyvėja ląstelinis kvėpavimas, moduliuojamas fotosintetinis aktyvumas. Šie procesai tiesiogiai atspindi augalo fiziologinės būklės kitimą [2].

Elektriniai signalai įprastai registruojami viduląsteliniais arba užląsteliniais elektrodais, stebint per membranas tekančių jonų sukeltas elektros sroves. Vienalaikiams fotosintezės aktyvumo parametrams registruoti galima pasitelkti nuostoviosios ir kinetinės spektroskopijos metodus. Ypač dažnai taikoma moduliuojamos amplitudės impulsų (PAM) fluorimetrija, teikianti daug informacijos apie sužadinimo energijos paskirstymą fotosintetiniams ir kitiems procesams.



1 pav. Tarpubamblinė *Nitellopsis obtusa* ląstelė (viršuje) ir akvariume laikomi makrodumbliai (apačioje)

Gėlavandenių Characeae šeimos makrodumblių *Nitellopsis obtusa* ląstelės (1 pav.), dažnai naudojamos elektrinių signalų tyrimuose (2 pav.), yra parankios registruoti ir chlorofilo fluorescenciją, taip gaunant informacijos apie fotosintezės aktyvumo dinamiką [3]. Naudodamiesi šia paprasta, patogia ir pigia ląstelės lygmens modeline sistema, siekiame ieškoti naujų, paprastai registruojamų optinių parametrų, apibūdinančių ląstelės fiziologinę būseną.



2 pav. *Nitellopsis obtusa* ląstelės veikimo potencialas

Nors augalinės ląstelės jautriai reaguoja į aplinkos pokyčius, nėra vienareikšmiškai atsakyta, kaip skirtingo intensyvumo ir modalumo stresiniai stimulai veikia ląstelinius procesus įvairiomis laiko skalėmis. Nežinoma, kokios įtakos fotosintezei gali turėti elektrinių signalų, ypač veikimo potencialo, parametrų moduliavimas. Trūksta žinių apie pavienių chloroplastų ir kitų ląstelės elementų sąveiką. Suderintas įvairių fizikinių metodų pritaikymas atveria naujas galimybes spręsti aktualias augalų fiziologijos problemas, kurti bioindikatorius aplinkotyros ir ekologijos tyrimams.

Reikšminiai žodžiai: augalų elektrofiziologija, spektroskopija, fotosintezė, elektriniai signalai.

Literatūra

[1] Fromm, J. ir Lautner, S. Plant Cell Environ., **30**(3), 249-257 (2007).
[2] Sukhov, V., Sukhova, E., Vodeneev, V. Prog. Biophys. Mol. Biol., **146**, 63-84 (2019).
[3] Krupenina, N. A., Bulychev, A. A., Roelfsema, M. R. G., Schreiber, U. Photochem. Photobiol. Sci. **7**(6), 681-688 (2008).

Fotosintetinio FCP komplekso chlorofilų tarpusavio sąveikos modeliavimas

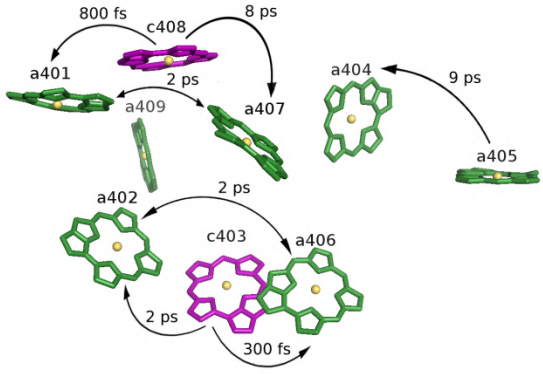
Modeling of Inter-Chlorophyll Couplings in the Photosynthetic FCP Complex

Austėja Mikalčiūtė[1,2], Andrius Gelžinis[1,2], Jevgenij Chmeliov[1,2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius
austeja.mikalciute@ff.stud.vu.lt

Fotosintezė – vienas svarbiausių gyvybę Žemėje užtikrinančių procesų: dėl šio reiškinio gali egzistuoti ne tik tūkstančiai įvairių bakterijų, dumblių ar augalų, bet ir gausybė nuo jų priklausomų gyvūnijos karalystės atstovų. Fotosintezės procesai daugmaž vienodai intensyviai vyksta sausumoje ir vandenyje, o fotosintetinantys organizmai yra sugebėję prisitaikyti išlikti netgi tokiose nepalankiose klimatinėse sąlygose kaip dykumos ar 80 metrų gylis po vandeniu [1]. Vieni svarbiausių, bet ne itin plačiai aptariamų fotosintetinančių organizmų yra titnagdumbliai, kurie atlieka netgi 20% pasaulinės anglies dioksido fiksacijos [2]. Šie dumbliai pasižymi išskirtiniu šviesorankos kompleksu – fukoksantinus ir chlorofilus rišančiu baltymu (angl. *fucoxanthin-chlorophyll binding protein* (FCP)). Šis FCP kompleksas nemažai struktūriškai skiriasi nuo aukštesniesiems augalams būdingo šviesorankos komplekso LHCII, nes FCP yra randami tokie pigmentai kaip chlorofilas *c* ar fukoksantinas, kurie geba sugerti žalios-mėlynos spinduliuotės šviesą, kuri yra prieinama vandenyje gyvenantiems organizmams. Nors fukoksantino-chlorofilo kompleksas jau kurį laiką yra sudominęs mokslininkų bendruomenę, pirmoji jo kristalografinė struktūra buvo nustatyta tik 2019 m. [3], kas suteikė galimybę bandyti detaliau išnagrinėti šviesorankos reiškinius titnagdumbliuose iš teorinės pusės.

Šiame darbe buvo nagrinėtos pirmosios sužadintos FCP komplekso chlorofilų (Chl) būsenos ir iš gautų rezultatų buvo apskaičiuotos jų tarpusavio sąveikos. Tyrimo metu buvo naudota Baltymų duomenų bazėje prieinama FCP struktūra iš *Phaeodactylum tricornutum* titnagdumblio [3]. Pirmoji sužadinta pasirinktų Chl *a* ir *c* pigmentų būsena buvo modeliuota pasitelkiant nuo laiko priklausančią tankio funkcionalo teoriją (TD-DFT), taikant skirtingus funkcionalus ir bazinių funkcijų rinkinius. Palyginus rezultatus, kaip priimtiniausias rezultatų ir skaičiavimo laiko kaštų atžvilgiu, buvo pasirinktas CAM-B3LYP funkcionalas su 6-31G(d) bazinių funkcijų rinkiniu. Chlorofilų fitilo grandinės atliekant tolesnį modeliavimą buvo apkarpytos, nes fitilo uodega neturėjo didelės įtakos vertinant pigmento šuolio dipolinio momento absoliučią vertę ir kryptį, kuriuos buvo siekta išnagrinėti šio tyrimo metu. Toliau buvo atlikti TD-DFT skaičiavimai CAM-B3LYP/6-31G(d) metodika visiems FCP komplekse esantiems chlorofilams ir įvertinti jų šuolio dipoliniai momentai. Tuomet, pasitelkiant šiuos duomenis ir struktūrinę informaciją apie pigmentų išsidėstymą baltyme, buvo pritaikytas taškinių dipolių artinys apskaičiuoti pigmentų tarpusavio sąveikoms.

Gauti skaičiavimai nurodo, kad stipriausios vyraujančios sąveikos yra tarp kristalografiškai išskiriamų Chl klasterių, tarp kurių pigmentų yra maži tarpmolekuliniai atstumai: visada tokiame klasteryje vyrauja stipri sąveika tarp Chl *c* bei *a* ir taip pat tarp Chl *a* poros. Modeliuojant Förster energijos pernašą FCP komplekse, buvo gauta, kad energijos pernašos tarp pigmentų trukmė tame pačiame klasteryje gali vyrauti nuo 300 fs iki kelių ps dėl vyraujančių stiprių sąveikų tarp pigmentų. Taip pat gauti rezultatai rodo greitą energijos pernašą nuo Chl *c* į *a*, kuri yra stebima ir eksperimentiniuose tyrimuose su kitais titnagdumbliais.



1 pav. Chlorofilų išsidėstymas *Phaeodactylum tricornutum* FCP komplekse [3]. Rodyklės nurodo greičiausius energijos pernašos kanalus 300 K temperatūroje.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, titnagdumbliai, fukoksantino-chlorofilo kompleksas, tankio funkcionalo teorija, pigmentų tarpusavio sąveika.

Literatūra

[1] J. Overmann, H. Cypionka, and N. Pfennig, An extremely low-light adapted phototrophic sulfur bacterium from the Black Sea, Limnol. Oceanogr., 1992, 37, 150–155.
[2] S. Malviya, E. Scalco, S. Audic et al., Insights into global diatom distribution and diversity in the world's ocean, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2016, 113, 1516–1525.
[3] W. Wang, L.-J. Yu, C. Xu et al., Structural basis for blue-green light harvesting and energy dissipation in diatoms, Science, 2019, 363, 1–8.

Ultrahigh-precision Rydberg atomic localization using standing waves and optical vortices

Teodora Kirova[1], Ning Jia[2], Hamid Reza Hamedi[3], Seyyed Hossein Asadpour[4], Jing Qian[5], and Gediminas Juzeliūnas[3]

[1] *Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Riga, LV-1004, Latvia*
[2] *The Public Experimental Center, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China*
[3] *Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Vilnius, LT-10257, Lithuania*
[4] *Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran 13114-16846, Iran*
[5] *Quantum Institute for Light and Atoms, East China Normal University, Shanghai 200062, China*
teo@lu.lv

Atom localization has been of continuous interest in quantum mechanics, with many practical applications in nanolithography, laser cooling and trapping, and other areas of atomic physics. Rydberg atoms are hard to localize due to the difficulty of confining them in a small region with high density. On the other hand, their enhanced nonlinear properties open new opportunities for quantum optics and information [1], making the experimental realization of precise Rydberg localization important.

In out work we propose theoretical schemes for such strongly confined localization using interacting Rydberg atoms in a ladder configuration, where a standing-wave or an optical vortex is used in the second step of the ladder. Depending on the degree of compensation of the Rydberg level energy shift (induced by the van der Waals interaction) by the coupling field detuning, two antiblockade regimes, i.e., a partial (PA) and a full antiblockade (FA) are distinguished. When a standing wave is used as a coupling field, a periodic pattern of tightly localized regions can be achieved for both regimes. However, the PA allows for much faster convergence of spatial confinement, yielding a high resolution Rydberg state-selective super localization to a sub-nanometer scale [2]. Applying a doughnut-shaped optical vortex in the second step of the ladder [3] results in ultraprecise two-dimensional localization solely in the zero-intensity center down to the nanometer scale. Auxiliary modulation to the two-photon detuning allows for a three-dimensional confinement of the Rydberg atoms. Our results pave one-step closer to the development of new subwavelength localization techniques to the nanometer scales, representing feasible experimental applications.

This work is partly supported by the COST action CA16221 “Quantum Technologies with Ultracold Atoms” (AtomQT).

References:

1. M. Saffman et al. *Rev. Mod. Phys.* **82** p.2313-2361 (2010).
2. T. Kirova et al. Opt. Lett. **45(19)** p.5440-5443 (2020).
3. N. Jia, et al.Opt. Exp. **28(24)** p.36936-36952 (2020).

Elektroninių ir virpesinių savybių modeliavimas karotinoidams

Electronic and Vibrational properties modeling for carotenoids

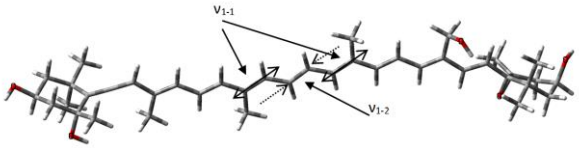
Mindaugas Macernis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Karotinoidai yra konjūguotos, teisios molekulės su pasikartojančiais terpeno jungtimis, kurios dalyvauja atliekant daugelį biologinių funkcijų. Šios molekulės suteikia spalvą vaisiams, gėlėms ir gyvūnams, o tai galima priskirti prie sudėtingų signalų perdavimų procesų. Karotinoidai taip pat dalyvauja ir fotosintetiniuose procesuose, kur tiek padeda surinkti šviesos energiją chlorofilams, tiek dalyvauja fotosintetinių organizmų fotoapsaugoje. Gamtoje yra priskaičiuojama didelė karotinoidų įvairovė, kurių yra virš 1100 [1]. Pagrindinė siejanti karotinoidų molekulių savybė yra polieninė grandinėlė, kuri pasižymi C_{2h} molekuline simetrija. Ši simetrija paaiškina karotinoiduose egzistuojančią leistinė S2 šuolį ir draustinį S1, kuris optiškai nepasiekiamas dėl simetrijos savybių. Tačiau karotinoidai nėra pilnai simetrinės molekulės ir dažniausiai tarpusavyje skiriasi galuose esančiais junginiais, o tai perturbuoja pačią struktūrą, kuri stebima tiek Ramano spektruose, tiek optinėje sugertyje.

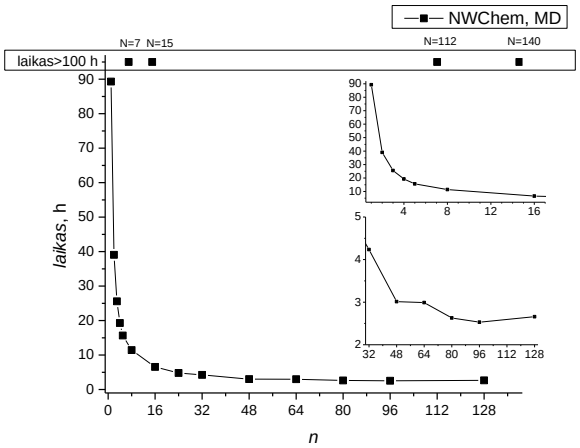
Kaip ir polieninės grandinėlės, taip ir karotinoidai gali būti klasifikuojami pagal konjūguotos grandinėles ilgį. Dėl struktūrinių savybių karotinoidai patikslinami efektyviu konjūgacijos ilgiu, kuris aiškiai gali būti stebimas Ramano spektruose identifikuojant spektrinis linijas kaip v1, v2 ir v3 [2]. Visgi toks aprašymas neįvertina papildomų procesų, kurie vyksta karotinoiduose. Pastarieji procesai yra nulemti tiek baltyminės, tiek tirpalo aplinkų [3], ar tiek susidariusių įvairių kompleksų su karotinoidais. Viena iš tokių karotinoidų klasė apima aleno grupę turinčias struktūras kaip Vauksheriaksantinas (1 pav.), Fukoksantinas, 19-,Butanoyloxyfukoksantinas. Jos pasižymi papildoma vidinio krūvio pernašos būsena (ICT), krūvio pernašos būsena (CT) su chlorofilais, netipine efektyviniam kojūgacijos ilgiui S2 būsena bei Ramano spektru.

Šio darbo tikslas išnagrinėti kvantinės molukių dinamikos skaičiavimo galimybes. Suskaičiuoti ir išanalizuoti sužadintas būsenas bei Ramono spektrus skirtingų ilgio karotinoidams. Buvo adaptuotas NwChem paketas superkompiuteriui (2 pav.), atlikti modeliavimo darbai. Spektrai suskaičiuoti naudojant tankio funkcionalų teorijas bei Gaussian 16 paketą.

Superkompiuterio skaičiavimo našumas stipriai priklauso nuo pasirinkto skaičiavimo subklasterio bei jo parametrų. Nagrinėjant pasirinktus karotinoidus nustatytas Ramano v1 spektrinės linijos skilimas (1 pav.) bei gauta, kad efektyvinis konjūgacinis ilgis nesutampa nagrinėjant sugerties (3 pav.) ir Ramano spektrus.



1 pav. Vaukserantino struktūra: rodyklės nurodo ties Ramano v1 dviejų virpesių pagrindines viepėjimo modas.



2 pav. Kvantinės molekulių dinamikos skaičiavimai, keičiant skaičiavimo mazgų skaičių.



3 pav. Aleno grupė Vaukserantino polieninę grandinėlę pailgina iki N=9.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.

Reikšminiai žodžiai: tankio funkcionalas, karotinoidai, sužadintos būsenos.

Literatūra

[1] J. Yabuzaki,, *Carotenoids Database: structures, chemical fingerprints and distribution among organisms*. Database (Oxford) , **1**, (2017).
[2] S. Streckaite, M. Macernis, F. Li et al., J. Phys. Chem. A, **124**, 2792-2801, (2020).
[3] M. Macernis, A. Bockuviene, R. Gruskiene et. al., J. Mol. Str., **1226**, 129362, (2021).

Ab-initio algebrinis modelis šešių nukleonų sistemoms

Ab-initio algebraic approach to six nucleon systems

Augustinas Stepšys[1], Saulius Mickevičius[1], Darius Germanas[2], Ramutis Kazys Kalinauskas[1]
[1]Vytauto Didžiojo universitetas, K. Donelaičio 58, LT-44248, Kaunas, Lithuania
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
augustinas.stepsys@vdu.lt

Pastaruoju metu atomo branduoliams tirti yra sėkmingai taikomas bešerdis ab-initio sluoksnių modelis[1]. Ši daugelio kūnų problemos sprendimo metodika yra kaip niekad aktuali branduolio fizikoje, nes dėl augant kompiuterinio skaičiavimo galiai, auga ir sistemų, kurioms ši metodika tinka, dydis. Pažanga teoriniuose bešerdžiuose modeliuose leistų mums tirti skaitmeniškai didesnes sistemas, efektyviau skaičiuoti branduolinių sistemų parametrus.

Vidinių Jacobi koordinačių panaudojimas harmoninio osciliatoriaus (HO) bazėje yra pakankamai populiarus metodas tirti s- sluoksnio branduoliams [2]. Norit skaičiuoti branduolinių sistemų parametrus reikia sukonstruoti antisimetriškus ir transliaciškai invariantinius būsenos vektorius. Siekiant užtikrinti transliacinį invariantiškumą būtina pašalinti masės centro judėjimo koordinatę. Jacobi koordinatės leidžia atlikti šį veiksmą tiesiog pereinant iš viendalelinių prie vidinių sistemos koordinačių.

P-sluoksnio branduoliams tradicinis Sleiterio determinantų metodas viendalelėse koordinatėse yra populiaresnis nei Jacobi koordinačių. Taip yra todėl, kad šiose koordinatėse antisimetrizacijos procedūra tampa labai sudėtinga dėl didelės simetrinės grupės algebros ir reikalauja didelio kiekio pakankamai sudėtingų matricinių elementų skaičiavimo. Todėl būtų naudinga metodika vienu metu leidžianti panaudoti vidines koordinates ir pakankamai patogiai pasigaminti antisimetrinius būsenos vektorius.

Šešių nukleonų sistemų tyrimuose mes naudojame kilminius koeficientus antisimetrinių būsenos vektorių konstravimui. Pirma kilminiai koeficientai konstruojami trijų dalelių poklasteriams. Toliau seka kilminių koeficientų konstravimas visai sistemai, pagal simetrinės grupės grandinėle:

$$S_6 \supset S_3 \times S_3. \qquad (1)$$

Antisimetriniai būsenos vektoriai randami panaudojant vadinamuosius Λ operatorius, kurie yra sudaryti iš dvidalelinių simetrinės grupės perstatymo operatorių [3]. Šie operatoriai leidžia išskirti neredukuotinius poerdvius, charakterizuojamus taip vadinamomis Jungo schemomis. Tokiu būdų yra galima surasti antisimetrinį būsenos vektorių poerdvį, charakterizuojamą Jungo schema $[1^6]$.

Šešių nukleonų sistemos modelis yra aprašomas panaudojant dvinarių klasterių formalizmą. Būsenos vektoriai yra konstruojami taip vadinamoje J schemoje, geru kvantiniu skaičiumi laikant pilnutinį judesio kiekio momentą. Dirbant J schemoje reikalingų transformacijų atvaizdai tampa žymiai kompaktiškesni, nei populiaresnėje M schemoje, kurioje geras kvantinis skaičius yra judesio kiekio momento projekcija. Darbas J schemoje reikalauja pakankamai kruopštaus judesio kiekio momento algebros panaudojimo, darbo su judesio kiekio momento perrišimo koeficientais, išreiškiamais panaudojant 6j ir 9j koeficientus.

Siekiant supaprastinti antisimetrizacijos procedūrą, algebriniame modelyje naudojamas izosukinio formalizmas, laikant protoną ir neutroną tapatingomis dalelėmis.

Λ operatorių atvaizdų konstravimui panaudojant Jakobi koordinates HO bazėje reikia pakankamai sudėtingų Jakobi koordinačių transformacijų, kas iš dalies lemia šio metodo nepopuliarumą. Siekiant išspręsti šią problemą, mes pristatome algebrinį modelį šešių nukleonų surištos sistemos parametrų radimui.

Dalis skaičiavimų atlikti naudojant Lietuvos nacionalinio fizinių ir technologijos mokslų centro aukšto našumo superkompiuterį Vilniaus universitete Fizikos fakultete („HPC Saulėtekis").

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)

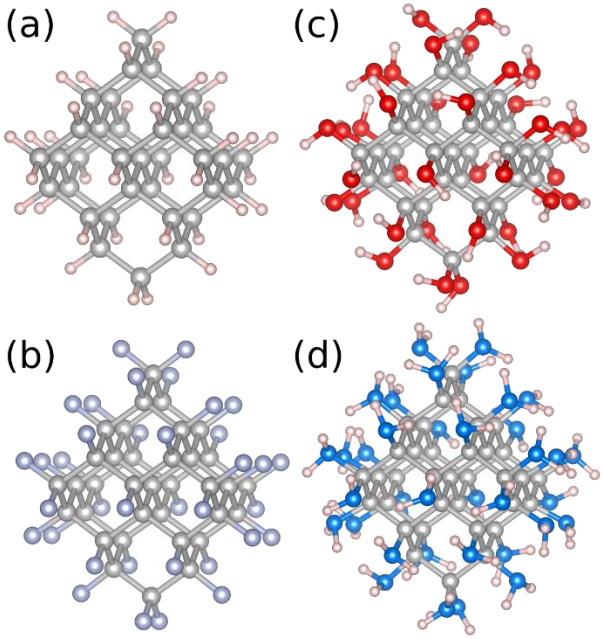
Nekompensuotųjų ryšių modeliavimas funkcionalizuotuose nanodeimantuose

Modeling of dangling bonds in functionalized nanodiamonds

Šarūnas Masys[1], Valdas Jonauskas[1], Žilvinas Rinkevičius[2,3]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas
[3]Karališkasis technologijos institutas, Chemijos, biotechnologijos ir sveikatos inžinerijos mokslų mokykla, Malvinos kel. 10, SE-10691, Stokholmas
sarunas.masys@tfai.vu.lt

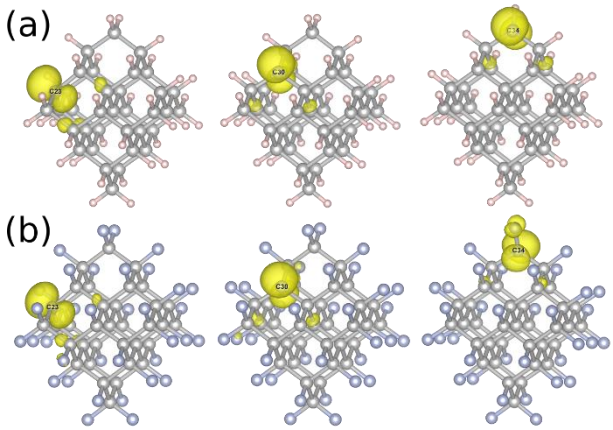
Nekompensuotieji ryšiai yra vieni iš dažniausiai nanodeimantuose aptinkamų paramagnetinių defektų [1]. Kadangi nanodeimantus, arba deimanto nanodaleles, tikimasi panaudoti biomedicinos srityje pritaikant magnetinio rezonanso atvaizdavimo technologiją [2,3], dideliam jų efektyvumui užtikrinti svarbu gerai išmanyti nekompensuotųjų ryšių susidarymo ypatumus. Todėl savo darbe mes tankio funkcionalo teorijos rėmuose atliekame šių paramagnetinių defektų modeliavimą.

Tyrimams pasirinktos eksperimentiškai realizuotos arba netgi komerciškai prieinamos paviršiaus funkcinės grupės [4,5]: H, F, OH ir NH_2. Oktaedrinė – viena iš įprasčiausių nanodeimantų formų [6], tad tokio pavidalo nanodeimantai, padengti minėtomis funkcinėmis grupėmis, pavaizduoti 1 pav.



1 pav. Oktaedrinės formos C_{35} dydžio nanodeimantai, padengti (a) H, (b) F, (c) OH ir (d) NH_2 funkcinėmis grupėmis.

Nekompensuotųjų ryšių modeliavimas funkcinėmis grupėmis padengtuose nanodeimantuose buvo atliktas ORCA kvantinės chemijos paketu [7,8] panaudojant PBEh-3c metodą [9]. Atsižvelgus į oktaedrinės formos simetriją, H ir F funkcionalizacijos atvejais pilną analizę pavyko atlikti apsiribojus 6 modeliais, pavaizduotais 2 pav., kai OH ir NH_2 atvejais iš viso prireikė 72 modelių.



2 pav. Elektronų sukinių tankio pasiskirstymas (geltona) kuomet nekompensuotieji ryšiai suformuojami (a) H ir (b) F funkcinėmis grupėmis padengtuose nanodeimantuose.

Atliktas modeliavimas rodo, kad H ir F funkcinės grupės, nors ir sudarydamos geometriškai identiškas nanodeimantų sistemas, energetiniu požiūriu elgiasi skirtingai, nes, pavyzdžiui, žemiausios energijos nekompensuotųjų ryšių padėtys nesutampa. Iš kitos pusės, OH ir NH_2 funkcinėmis grupėmis padengtų nanodeimantų žemiausios energijos nekompensuotųjų ryšių padėtys sutampa, bet skiriasi nuo tų, kurios nustatytos H ir F funkcionalizacijoms. Verta paminėjimo ir tai, jog OH ir NH_2 atvejais stebimas itin didelis energijos skirtumas tarp įvairiose geometrinėse pozicijose lokalizuotų nekompensuotųjų ryšių. Bendrai paėmus, gauti rezultatai yra ypač svarbūs vertinant tokių sistemų paramagnetinio elektronų rezonanso parametrus, pavyzdžiui, elektroninį *g*-tenzorių.

Reikšminiai žodžiai: nanodeimantai, tankio funkcionalo teorija, modeliavimas, nekompensuotieji ryšiai.

Literatūra

[1] A. I. Shames, A. M. Panich, *Nanodiamonds: Advanced material analysis, properties and applications* (Elsevier, Amsterdam, 2017).
[2] D. E. J. Waddington *et al.*, Nat. Commun. **8**, 15118 (2017).
[3] D. E. J. Waddington *et al.*, Sci. Rep. **9**, 5950 (2019).
[4] A. Krueger, D. Lang, Adv. Funct. Mater. **22**, 890 (2012).
[5] M. Chipaux *et al.*, Small **14**, 1704263 (2018).
[6] A. S. Barnard, Nanotechnology **24**, 085703 (2013).
[7] F. Neese, WIREs Comput. Mol. Sci. **2**, 73 (2012).
[8] F. Neese, WIREs Comput. Mol. Sci. **8**, e1327 (2018).
[9] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys. **143**, 054107 (2015).

Tiesioginė grafeno/Si(100) heterodarinių sintezė, tyrimas ir taikymas saulės elementams

Direct synthesis of the graphene/Si(100) heterojunctions: study and application for solar cells

Šarūnas Meškinis, Rimantas Gudaitis, Andrius Vasiliauskas, Šarūnas Jankauskas, Asta Tamulevičienė
Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, Baršausko 59, Kaunas
sarunas.meskinis@ktu.lt

Žymiausia 2D nanomedžiaga, grafenas, pasižymi milžiniškais elektronų ir skylių judriais (iki 350 000 cm^2 V^{-1} s^{-1}), krūvininkų dauginimu, topologinės energijos juostų inžinerijos ir kvantinės interferencijos galimybe, lankstumu, skaidrumu, cheminiu inertiškumu [1]. Tarp gausybės galimų taikymų grafenas bandomas naudoti ir įvairių itin sparčių elektroninių prietaisų [1] bei saulės elementų [2] gamybai.

Paprastai grafenas auginamas cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu ant katalizinės (Cu ar Ni) folijos arba ekstrafolijuojamas [3]. Toliau vykdomas ilgas grafeno pernešimo ant puslaidininkio ar dielektriko paviršiaus procesas [3]. Tuo metu grafenas gali būti užterštas įvairiais adsorbatais, jame atsiranda raukšlės [4]. Kitaip tariant, tai komplikuota technologija, gerokai apsunkinant grafeno/puslaidininkio (dielektriko) tarpinio kontakto savybių kontrolę ir galimybę pagaminti reikiamų darbinių charakteristikų puslaidininkinį prietaisa. 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 [5-7]. Tačiau kol kas šios technologijos yra užuomazgoje.

Šiame darbe grafeno sluoksniai buvo tiesiogiai sintezuoti dviem būdais ant Si(100) pagrindų, nenaudojant jokių katalizinių medžiagų. Pirmasis naudotas būdas buvo mikrobange plazma aktyvuotas cheminis nusodinimo iš garų fazės būdu ant monokristalinio. Antrasis auginimo būdas buvo fizinio nusodinimo iš garų fazės tipo – grafenas sintezuotas indukcinės plazmos (ICP) pluoštelio šaltiniu COPRA.

Grafeno struktūra tirta vieno bangos ilgio (532 nm) Raman‘o sklaidos spekroskopijos būdu. Grafeno morfologija tirta atominių jėgų mikroskopijos būdu ir skenuojančiu elektroniu mikroskopu. Buvo pagaminto tiesiogiai sintezuoto grafeno bei Si(100) Šotkio diodai. Ištirtos šių diodų elektrinės ir fotovoltinės savybės.

Buvo nagrinėjama auginimo salygų (metano ir vandenilio srautų santykio, slėgio, plazmos galios ir sintezės proceso trukmės) įtaka grafeno struktūrai. Nustatyta, kad keičiant šiuos technologinius paramnetrus galima valdyti grafeno sluoksnių skaičių ir defektų kiekį grafene. Parodyta, kad naudojant aukštesnę sintezės temperatūrą ir plazmos galią auga vertikalus grafenas, o žemesnė sintezės temperatūra bei galia skatina planarinio grafeno auginimą. Vertikalaus grafeno augimas susietas su terminių įtempių relaksacija.

ICP plazmos pluoštelio šaltiniu, naudojant auginimą pro kaukę, grafenas tiesiogiai sintezuotas ant parinktų Si pagrindo vietų. Keičiant auginimo sąlygas buvo sintezuotas tiek hidrogenizuotas tiek ir „paprastas“ grafenas.

Ištyrus grafeno/Si(100) Šotkio diodų voltamperines charakteristikas pastebėta, kad, priklausomai nuo grafeno sintezės salygų, gali būti suformuoti tiek kvaziominiai kontaktai, tiek Šotkio kontaktai. Nustatyta, kad grafeno ir Si(100) Šotkio diodų fotovoltinės savybės nepriklauso nuo grafeno struktūros. Tačiau pastebėta Si(100) pagrindo pradinio paruošimo ir grafeno morfologijos įtaka.

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: tiesioginė grafeno sintezė, mikrobange plazma aktyvuotas cheminis nusodinimas iš garų fazės, grafeno/silicio diodai, Raman‘o sklaidos spektrosokopija, fotovoltinės savybės.

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] T. Mahmoudi, Yousheng Wang, Yoon-Bong Hahn. Graphene and its derivatives for solar cells application. Nano Energy 47, 2018, 51-65.
[3] Yi Zhang et. al. Review of Chemical Vapor Deposition of Graphene and Related Applications, Acc. Chem. Res., 2013, 46 (10), pp 2329–2339.
[4] 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.
[5] A. Khan et al. Direct CVD Growth of Graphene on Technologically Important Dielectric and Semiconducting Substrates. Advanced Science 5 (2018) Art. No 1800050.
[6] R. Gudaitis, A. Lazauskas, Š. Jankauskas, Š. Meškinis. Catalyst-less and transfer-less synthesis of graphene on Si(100) using direct microwave plasma enhanced chemical vapor deposition and protective enclosures. Materials 13 (2020) 1996-1944.
[7] Š. Meškinis, R. Gudaitis, A. Vasiliauskas, S. Tamulevičius, G. Niaura. Multiwavelength Raman scattering spectroscopy study of graphene synthesized on Si(100) and SiO_2 by microwave plasma-enhanced chemical vapor deposition. Physica status solidi - rapid research letters: Special issue: Two-dimensional semiconductors 14 (2020), art. no.1900462, p. 1-5.

Impulsinio tolydaus lydalo sudėties keitimo būdu užaugintų parabolinių kvantinių duobių fotoliuminescencijos tyrimas pasitelkus trumpeninio matumo erdvės modelį

Investigation of parabolic quantum wells grown using pulsed analog alloy grading technique by means of photoluminescence in combination with fractional-dimensional space approache

Mindaugas Karaliūnas[1], Evelina Dudutienė[1], Aurimas Čerškus[1,2], Dominykas Dumbrė[1], Simona Pūkienė[1], Andres Udal[3], Renata Butkutė[1], Gintaras Valušis[1]

[1]Optoelektronikos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva

[2]Mechatronikos, robotikos ir skaitmeninės gamybos katedra, Mechanikos fakultetas, Vilnius Tech, Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius, Lietuva

[3]*Department of Software Science*, Talino Technikos Universitetas, *Ehitajate* g. 5, 19086 Talinas, Estija

mindaugas.karaliunas@ftmc.lt

Šiuolaikiniams optoelektronikos prietaisams, tokiems kaip infraraudonosios (IR) ir terahercų (THz) dažnių elektromagnetinių bangų spektro srities koherentiniams ir nekoherentiniams mažų matmenų šaltiniams bei detektoriams, reikalingi nauji sprendimai, kurie leistų padidinti prietaisų našumą ir patikimumą. Parabolinės kvantinės duobės (PKD) dėl savo unikalių savybių yra vienos iš patraukliausių dizaino kandidačių, taikytinų aktyviojoje prietaiso terpėje. Apibendrinta Kohno teorema [1], kuri yra eksperimentiškai paliudyta [2], numato, kad PKD osciliuoja ties savuoju dažniu $\omega_0 = \sqrt{8V_b/(l_w^2 m^*)}$, kuris priklauso tik nuo PKD barjerų aukščio V_b, pločio l_w ir krūvininkų efektinės masės m^*, tačiau nepriklauso nuo elektronų tarpusavio sąveikos energijos, krūvininkų skaičiaus duobėje ar PKD potencialo pokyčių dėl krūvininkų tankio kitimo. Šiame darbe buvo sumodeliuota, pagaminta ir ištyrinėta 52 nm pločio GaAs/AlGaAs PKD su 30% Al barjeruose ir impulsiniu tolydaus Al kiekio kitimu PKD šlaituose iki 0% PKD centre.

Panaudojus skaitmeninį stacionarios vienmatės Šriodingerio lygties sprendimo metodą, buvo sumodeliuotas PKD dizainas [3]. Sprendinys leido nustatyti energijos juostų struktūrą tiek elektronams laidumo juostoje, tiek sunkioms ir lengvoms skylutėms valentinėje juostoje. Iš kvantmechaninio sprendinio buvo suskaičiuoti tikėtini fotoliuminescencijos (FL) spektrai, įvertinant tarpjuostinių šuolių tikimybes, būsenų tankį ir krūvininkų statistinį pasiskirstymą. PKD buvo užauginta molekulinių pluoštelių epitaksijos būdu pritaikant tolydaus Al kiekio x keitimą epitaksinio sluoksnių auginimo kryptimi z nuo 30% AlGaAs barjere iki 0% gryno GaAs duobės centre ir vėl iki 30% AlGaAs barjere pagal parabolinį dėsnį $x(z) = x_b\left((2(z-z_0)/l_w)^2 + c_q\,(2(z-z_0)/l_w)^4\right)$ su ketvirto laipsnio nario pataisa, atsveriančia aukštesnės eilės krūvininkų efektinės masės priklausomybę nuo Al kiekio pokyčio [4]. Preciziškai epitaksijai buvo pasirinktos ženkliai mažesnės auginimo spartos, o, nustatant auginimo laiką, atsižvelgta į auginimo spartos pokytį. Al šaltinio temperatūros stabilizacijai ir III grupės atomų difuzijai užtikrinti, buvo daromos pauzės. Užaugintos PKD kokybė buvo įvertinta peršviečiamuoju skenuojančiuoju elektronų mikroskopu ir FL spektroskopija, pasitelkus trumpeninio matumo erdvės modelį [4].

Tyrimas atskleidė, kad tikslus parabolinis potencialas duobėje buvo įgyvendintas dėl III grupės atomų difuzijos kristalinėje gardelėje ir dėl atominių sluoksnių visiškos užpildos pauzių metu, eksponuojant bandinį As srauto. FL rezultatų analizė trumpeninio matumo erdvės modeliu leido nustatyti juostų prigimtį bei įvertinti dimensiškumą, kurio vertė didėja nuo 2,46 iki 2,87 šuoliams tarp aukštesnių PKD sužadintų būsenų. Pildant PKD būsenas fotogeneruotais krūvininkais, FL spektruose buvo stebimos net 5 vienodais tarpais išsidėsčiusios PKD energijų pajuostės tiek laidumo, tiek valentinėje juostose. FL juostos iš paskirų sužadintų PKD būsenų buvo išskiriamos net iki 240 K temperatūros. Tyrimai atskleidė puikią sumodeliuoto dizaino ir išauginto darinio spindulinių savybių dermę. Gauti rezultatai leidžia suponuoti, kad pasiūlytas auginimo būdas yra daug žadantis taikant PKD naujose kompleksinėse kvantinėse sistemose naujiems optoelektronikos prietaisams, išnaudojant tiek tarpjuostinius šuolius IR spektro srityje [5], tiek ir tarppajuostinius šuolius THz spektro srityje [6].

Padėka: Dominyko Dumbrės indėlis finansuotas bendrai Europos socialinio fondo lėšomis (projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-25-0224) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Reikšminiai žodžiai: parabolinės kvantinės duobės, impulsinis tolydus lydalo sudėties keitimo būdas, trumpeninio matumo erdvės modelis, fotoliuminescencija, kvantiniai dariniai, nanotechnologija

Literatūra

[1] W. Kohn, Phys. Rev. **123**, 1242 (1961). https://doi.org/10.1103/PhysRev.123.1242

[2] L. Brey, N. F. Johnson, B. I. Halperin, Phys. Rev. B **40**, 10647(R) (1989). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.10647

[3] M. Karaliūnas, A. Udal, G. Valušis, Lith. J. Phys. **60**(2), 113 (2020). https://doi.org/10.3952/physics.v60i2.4226

[4] M. Karaliūnas, E. Dudutienė, A. Čerškus, J. Pagalys, S. Pūkienė, A. Udal, R. Butkutė, G. Valušis, J. Lumin. **239**, 118321 (2021). https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118321

[5] S. Pūkienė, M. Karaliūnas, A. Jasinskas, E. Dudutienė, B. Čechavičius, J. Devenson, R. Butkutė, A. Udal, G. Valušis, Nanotechnology **30**, 455001 (2019). https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab36f3

[6] M. Karaliūnas, J. Pagalys, V. Jakštas, R. Norkus, A. Urbanowicz, J. Devenson, R. Butkutė, A. Udal, G. Valušis, Proc. SPIE **11124**, *Terahertz Emitters, Receivers, and Applications X*, 1112409 (2019). https://doi.org/10.1117/12.2528428

Įvairių formų aukso nanodalelių dinaminių plazmoninių savybių tyrimas skirtuminės sugerties spektroskopijos metodu

The investigation of dynamic plasmonic properties of various shape gold nanoparticles employing transient absorption spectroscopy

Domantas Peckus[1], Karine Mougin[2], Arnaud Spangenberg[2], Loic Vidal[2], Quentin Bauerlin[2], Marc Keller[2], Joel Henzie[3], Tomas Tamulevičius[1], Sigitas Tamulevičius[1]
[1]Institute of Materials Science of Kaunas University of Technology, K. Baršausko st. 59, LT-51423, Kaunas, Lithuania

[2]Institut de Science des Matériaux de Mulhouse IS2M UMR 7361, 15 rue Jean Starcky, F 68100 Mulhouse, France

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

The plasmonic metal nanoparticles due to their localized surface plasmon resonance (LSPR) properties have shown great promises in various electro-optical applications like sensors, solar cells, photocatalysis, medicine, etc. [1]. The practical use of these nanoparticles depends on the metal, their shape, size, and their homogeneity. At the moment, gold nanoparticles show the best promises for practical applications, due to their great stability and well-developed synthesis procedures. The advanced synthesis methods of gold nanoparticles allow preparing high-quality nanoparticles of various shapes like spheres, nanorods, bipyramids, decahedra, etc. [1].

In our research, we have demonstrated the transient absorption spectroscopy (TAS) method as a perspective tool for the analysis of plasmonic and optomechanical properties of various size/shape gold nanoparticles. In addition to the TAS measurements, we have used steady-state UV-VIS absorption, and transmission electron microscopy (TEM). We have analyzed gold nanoparticles of different shapes like nanorods, decahedra, and spheres (Fig. 1 a, d, c) prepared by methods of wet chemical synthesis and demonstrating different absorption spectra due to localized surface plasmon resonance (Fig. 1 b, e, h).

According to the TAS measurements for the gold nanoparticles, there are two absorption peaks in the case of Au nanorods (515 and 720 nm) (Fig. 1 b) and two negative peaks in TAS spectra (520 and 710 nm) (Fig. 1 c), similarly to the LSPR absorption spectrum. One can see as well that decahedra have one negative TAS peak at 572 nm and one steady-state absorption peak at 572 nm (Fig. 1 e, f). While nanospheres have two peaks in TAS spectra (530 and 700 nm) and only one peak in a steady-state absorption spectrum (525 nm) (Fig. 1 h, i). One could expect that Au nanospheres should produce only one negative TAS peak at around steady-state absorption spectra peak [2]. On the other hand, in Fig. 1 g one can see that besides Au nanospheres some nano rod-like nanoparticles are present. We suggest that these nano rod-like structures (Fig. 1 g) are responsible for the recorded negative TAS signal at around 700 nm in Fig. 1 i. According to the TAS measurement data, this method is much more sensitive to the shape of Au nanorods in comparison to the steady-state absorption (Fig. 1 h) which shows no peak of absorption at 700 nm. All in all, the TAS was found to be an efficient technique for the detection of small amounts of Au nanorods in the sample where Au nanospheres dominate.

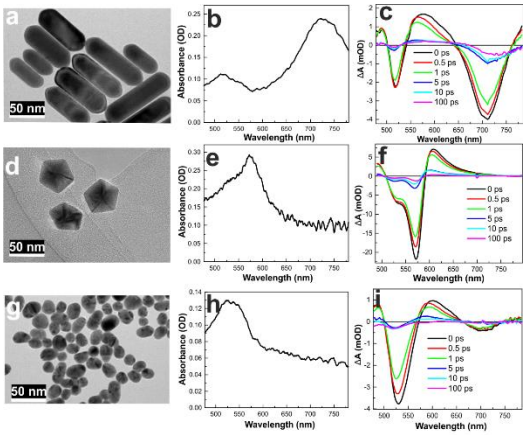


Fig. 1. TEM, UV-VIS absorption and TAS spectra measured under excitation at 350 nm of Au nanorods (**a**, **b**, **c**,), Au high-quality decahedra's (**d**, **e**, **f**,) and our Au nanospheres (**g**, **h**, **i**).

This research has shown that TAS can be an effective tool for shape analysis and control of spherical Au nanoparticles.

Funding from the Research Council of Lithuania, Agreement No.P-LZ-21-1 is appreciated.

Keywords: Au nanospheres, Au nanorods, transient absorption spectroscopy, localized surface plasmon resonance, optomechanical oscillations.

References

[1] G.V. Hartland, Chem. Rev. **111**, 3858-3887 (2011).
[2] X. Zhang, C. Huang, M. Wang, P. Huang, X. He and Z. Wei, Sci. Rep. **8**, 10499 (2018).

Teoriniai titano dioksido nanodalelių geometrinės struktūros evoliucijos tyrimai

Theoretical investigation of geometrical structure evolution of titanium dioxide nanoparticles

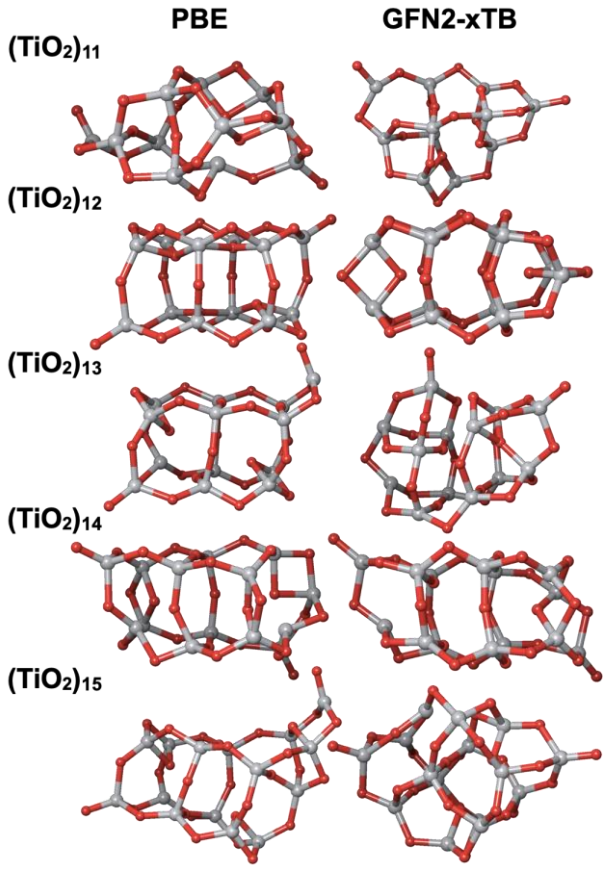
Žilvinas Rinkevičius[1,2], Marius Kaminskas[1], Paulius Palevicius[1], Minvydas Ragulskis[1], Kristina Bočkutė[1], Mantas Sriubas[1], Giedrius Laukaitis[1]
[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[2]Karališkasis technologijos institutas, Inžinierinių chemijos, biotechnologijos ir sveikatos mokslų mokykla, Malvinas väg. 10, SE-10691, Stokholmas
zilvinas.rinkevicius @ktu.lt

Mažos titano dioksido nanodalelės, $(TiO_2)_n$ n=1-60, pasižymi kompleksiniais potencinės energijos paviršiais su daugybe lokalių minimumų, ir esant normalioms sąlygoms kiekviena nanodalelė turi keletą statistiškai reikšmingų konformerų. Šių konformerų identifikavimas yra sudėtinga problema, kuri reikalauja skaitmeniškai brangių skaičiavimų naudojant elektroninės struktūros metodus suporuotus su efektyviu potencinės energijos paviršių analizės algoritmu. Iki šiol, dėl didelių skaičiavimų kaštų buvo atlikta tik $(TiO_2)_n$ n=1-15 nanodalelių mažiausios energijos konformerų paieška naudojant tankio funkcionalo teorijos (DFT) metodus. Šiame pranešime pristatysime mažiausios energijos konformerų paieškos rezultatus gautus $(TiO_2)_n$ n=1-60 nanodalelėms. Šis tyrimas buvo atliktas panaudojant autorių sukurtą mažiausios energijos konformerų identifikavimo (TG-OPT) metodą, kuriame nanodalelės elektroninė struktūra aprašoma pusiau empiriniu GFN2-xTB metodu [1] ir potencinės energijos paviršius analizuojamas genetiniu medžio augimo algoritmu su panašumo indekso kontrolės funkcija.

TG-OPT metodo tikslumas bei efektyvumas buvo įvertintas palyginant šiuo bei DFT metodais gautas konformerų geometrines struktūras $(TiO_2)_n$ n=1-15 nanodalelėms. Mažiausioms $(TiO_2)_n$ n=1-5 nanodalelėms TG-OPT metodas leidžia pasiekti geometrinių parametrų tikslumą panašų arba geresnį už įvairius DFT metodus. Didesnėms $(TiO_2)_n$ n=6-15 nanodalelėms TG-OPT metodu nustatytos žemiausios energijos konformerų geometrinės struktūros skiriasi nuo konformerų struktūrų gautų DFT metodais (žr. pav. 1) bei Jakarto panašumo indeksai tarp šių struktūrų svyruoja nuo 0.2 iki 0.7. Detalesnė geometrinių skirtumų analizė tarp konformerų struktūrų gautų TG-OPT bei DFT metodais rodo, kad TG-OPT metodas nustato Ti-O cheminių ryšių ilgius 0.05-0.27 Å trumpesnius už nustatytus DFT metodais, bei nustato kampus tarp dviejų Ti-O cheminių ryšių 5.1-10.8º didesnius už nustatytus DFT metodais.

TG-OPT metodu nustatytų žemiausios energijos unikalių konformerų kiekis laipsniškai didėja didejant TiO_2 nanodalelės matmenims bei $(TiO_2)_{60}$ naodalelės atveju pasiekia 513 statistiškai svarbius konformerus. Detali konformerų geometrinės struktūros analizė rodo, kad pradedant nuo $(TiO_2)_{40}$ visos nanodalelės turi branduolį su tipine rutilo kristaline gardele. Šio branduolio geometriniai parametrai (Ti-O cheminių ryšių ilgai, bei kampai tarp Ti-O cheminių ryšių) pradeda sutapti su rutilo gardelės geometriniais parametrais kietame kūne pradedant nuo $(TiO_2)_{56}$ nanodalelės.

Visi $(TiO_2)_n$ n=1-60 nanodalelių tyrimai TG-OPT metodu buvo atlikti naudojant VeloxChem programą [2].



1 pav. TiO_2 nanodalelių žemiausios energijos konformerai gauti TG-OPT ir DFT metodais.

Reikšminiai žodžiai: TiO_2 nanodalelės, potencinės energijos paviršių tyrimai, nanodalelų konformerai

Literatūra

[1] C. Bannwarth, E. Caldeweyher, S. Ehlert, A. Hansen, P. Pracht, J. Seibert, S. Spicher, S. Grimme, Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci., **11**, e1493S (2021).
[2] Z. Rinkevicius, X. Li, O. Vahtras, K. Ahmadzadeh, M. Brand, M. Ringholm, N. H. List, M. Scheurer, M. Scott, A. Dreuw, et. al., Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. **10**, e1457 (2020).

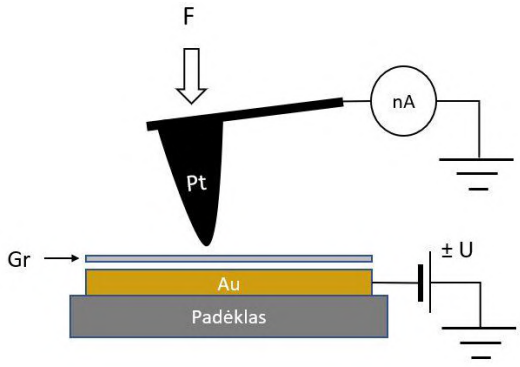
Tikslingu mechaniniu poveikiu keičiama krūvininkų pernaša vertikaliuose dariniuose su dvimačiu grafeno lakštu imobilizuotu ant metalo

Intentional mechanical force produced changes of electric charge transport in vertically stacked constructions with two-dimensional graphene sheet on metal

Tomas Daugalas[1], Algimantas Lukša[1], Virginijus Bukauskas[1], Arūnas Šetkus[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
tomas.daugalas@ftmc.lt

Vertikalios sandaros, van der Waals (vdW) jėgomis susieti dariniai yra laikomi naujos kartos elektronikos prietaisų pagrindu. Šio tipo elementus kombinuojant su funkcinėmis nanometrinių matmenų medžiagomis (grafenas, pereinamųjų metalų dichalkogenidai (TMD's)) galima kurti naujo tipo jutiklius, kaip, pvz., drėgmės [1], dujų [2]. Dažniausiai tam panaudojami savybių ypatumai dvimatės medžiagos plokštumoje. Preliminariuose tyrimuose esame pademonstravę naujas galimybes panaudoti dvimačių medžiagų savybes, kai formuojami vertikalios konstrukcijos dariniai [3]. Tokių vertikalaus išdėstymo darinių tyrimus šiame darbe pademonstravome pritaikę skenuojančio zondo mikroskopija (SPM) paremtus metodus.

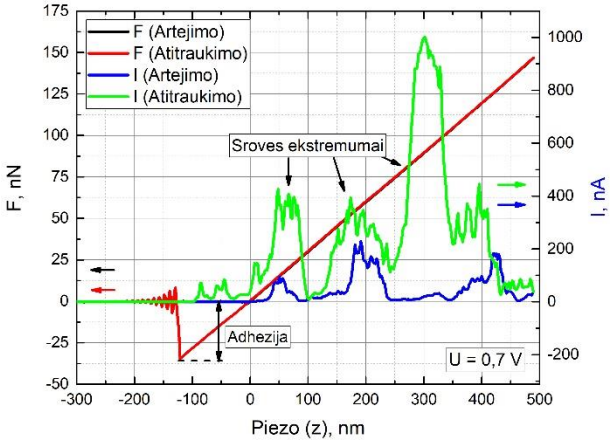
Šiame darbe pristatoma kombinuota SPM metodika – jėgos-srovių spektroskopija. Naudojant CVD monosluoksninį grafeną ant aukštos kokybės suformuoto Au kontakto kaip modelinį darinį, atominių jėgų mikroskopo (AFM) zondu buvo sukuriamos elastinės mechaninės deformacijos esant prijungtai nuostoviai įtampai vertikaliai struktūros (1 pav.).



1 pav. Jėgos-srovių spektroskopijos vdW dariniuose su grafenu eksperimentų schema.

Eksperimentiniai rezultatai, gauti tiriant specialios konstrukcijos bandiniu, rodo būdingą sąryšį tarp zondo prispaudimo jėgos F ir srovės vertės I sistemoje, kuris pasižymi srovių ekstremumais ties tam tikromis prispaudimo jėgomis (2 pav.). Taip pat, keičiant išoriškai pridedamo elektrinio lauko įtampos vertę, buvo stebimas sistemingas srovės spektro pozicijos kitimas nuo struktūrą veikiančios jėgos, bei zondo adhezijos jėgos kitimas.

Remiantis šiais rezultatais ir kitų autorių literatūroje pateikiamų DFT skaičiavimų išvadomis [4], pasiūlėme specialų vertikalaus darinio metalas-grafenas-metalas modelį, kuris tinka paaiškinti dariniuose eksperimentiškai matuojamas krūvio pernašos priklausomybes, susiejančias elektrines sroves su mechaniniu poveikiu. Modelyje analizuojama energetinių lygmenų schema, jos fizinė prigimtis bei pokyčiai, sukuriami pridedant išorinį elektrinį lauką ir statmeną paviršiui mechaninę jėgą.



2 pav. Srovės-jėgos sąryšis: jėgos ir tunelinių srovių priklausomybės nuo zondo poslinkio paviršiaus atžvilgiu, išmatuotos vdW dariniuose su grafenu.

Reikšminiai žodžiai: grafenas, van der Waals nulemtas darinys, tunelinių srovių spektroskopija, jėgos spektroskopija..

Literatūra

[1] H. Lang, Y. Peng, X. Cao, K. Zou, Atomic-Scale Friction Characteristics of Graphene under Conductive AFM with Applied Voltages, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2020** *12* (22), 25503-25511.
[2] Q. Li, et al., Gas adsorption characteristics of graphene/metal structures, *Applied Surface Science* **514** (2020), 145823.
[3] M. Kamarauskas, V. Agafonov, T. Daugalas, S. Balakauskas, A. Mironas, R. Nedzinskas, G. Niaura, M. Treideris, A. Šetkus, "Photovoltaic effect-driven IR response of heterojunctions obtained by direct CVD synthesis of MoS2 nanolayers on crystalline silicon", Nanotechnology 31 (2020), 425603.
[4] Cheng Gong, Geunsik Lee, Bin Shan, Eric M. Vogel, Robert M. Wallace, *and* Kyeongjae Cho, "First-principles study of metal–graphene interfaces", Journal of Applied Physics 108, 123711 (2010).

STEAM vaidmuo fizikos dalyko įsisavinimui Lietuvos vidurinėse mokyklose

The Role of STEAM in Mastering the Subject of Physics in Secondary Schools of Lithuania

Artūras Jukna[1], Aušra Kynienė[2], Lina Bagdžiūnaitė-Litvinaitienė[3,4], Ernesta Smalinskė[4], Romualda Lazauskaitė[5], Dalia Leckaitė[6]

[1]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fundamentinių mokslų fakultetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[3]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Aplinkos inžinerijos fakultetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
[4]Vilniaus Gedimino technikos universiteto inžinerijos licėjus, Antakalnio g. 120, LT-10200 Vilnius
[5]Vytauto Didžiojo universitetas, Švietimo akademija, T. Ševčenkos g. 31, LT-03111 Vilnius
[6]Nacionalinė švietimo agentūra, Bendrųjų reikalų departamentas, K. Kalinausko g. 7, 03107 Vilnius
arturas.jukna@vilniustech.lt

Mokslas apie gamtą atsako į daugelį labai svarbių klausimų apie mus supantį pasaulį, pateikdamas žmonijai stebėjimais ir tyrimais grįstą pasaulio modelį. Gamtamokslinis ugdymas Lietuvos mokyklose grindžiamas gamtinių reiškinių bei procesų holistine interpretacija ir orientuotas į jų pažinimą lokaliame ir globaliame kontekste, atskleidžiant mokiniams gamtos mokslų žinias ir technologijų progresą. Gamtamoksliniu ugdymu siekiama sudominti mokinius reiškiniais, vykstančiais gamtoje, didinti jų gamtamokslinį raštingumą ir tyrinėtojo kompetencijas. Gamtos mokslų integralų dalyką „Gamtos pažinimas“ pradedama mokyti nuo pradinių klasių, vėliau 5-6 klasėse mokiniai mokomi integralaus „Gamta ir žmogus“ dalyko, o 7-12-ose klasėse pradeda mokytis fizikos. Siekiant gerinti Lietuvos mokyklų aprūpinimą mokymo priemonėmis ir įranga, jau nuo 2019 m. Lietuvos švietimo aprūpinimo centras (ŠAC) prie Lietuvos švietimo, mokslo ir sporto ministerijos (ŠMSM), vykdydamas ES SF projektą „*Mokyklų aprūpinimas gamtos ir technologinių mokslų priemonėmis*“ (projekto kodas Nr. 09.1.3-CPVA-V-704-02-0001), jomis aprūpino 672 mokyklas, vykdančias pradinio ugdymo programas, ir 533 mokyklas, vykdančias pagrindinio ugdymo (I pakopos) programas (iš viso 1089 mokyklų Lietuvoje skaičiaus), ir parengė 120 eksperimentinių veiklų aprašus [1]. Lietuvos oficialios statistikos portalo [2] duomenimis, Lietuvos mokyklose mokosi per 320 tūkst. mokinių. 2018 m. statistiniais duomenimis [2] 32,2 % dalis Lietuvos gyventojų turi aukšto lygio išsilavinimą, 51,8 % - vidutinio ir 16 % žemo lygio (*t. y.* be pradinio išsilavinimo).

Siekiant pagerinti fizikos žinias Lietuvos mokyklose, Vilniuje, Kaune ir Klaipėdoje kuriami metodiniai STEAM atviros prieigos centrai, o Alytuje, Marijampolėje, Panevėžyje, Šiauliuose, Tauragėje, Telšiuose ir Utenoje – 7 regioniniai STEAM atviros prieigos centrai (čia STEAM žymi Science, Technology, Engineering, Art ir Mathematics mokslų sritis). Centrai vykdys formaliojo mokinių ugdymo ir neformaliojo švietimo veiklas, tobulins mokytojų kvalifikaciją, populiarins STEAM veiklą. Regioniniuose centruose veiks standartizuotos biologijos-chemijos, fizikos-inžinerijos, robotikos-IT ir specializuotos, orientuotos į konkrečios apskrities specifiką, laboratorijos. Metodiniai centrai bus atviri mokykloms ir teiks pagalbą regioniniams centrams.

Į regioninius centrus mokiniai atvyks klasėmis arba mažesnėmis grupelėmis, jų mokytojų pasirinkimu. Atvykusieji turės galimybę eksperimentiškai ištirti gamtos reiškinius, susijusius su integraliomis biologijos-chemijos, fizikos-inžinerijos, robotikos-IT mokslų sritimis. STEAM centruose fizikos-inžinerijos srities eksperimentinių darbų tematikos glaudžiai susiję su šviesos savybių inžinerija ir jos sąveikos su medžiaga prigimtimi. Ji atskleidžiama „*Vaivorykštė delne: šviesos spalvų sandaros analizė ir praktinis taikymas*“, „*Labirintu per veidrodžių karalystę*“, „*Nespalvotų objektų spalvų prigimtis*“ darbuose. Su Žvaigždžių chemine sudėtimi supažindina „*Pažvelk atidžiau į žvaigždėtą dangų*“ darbas, su egzotiniu šviesos savybių pritaikymu praktikoje - „*Optinis liežuvis*“, o su šilumos valdymu/inžinerija - „Šiltas namas“ darbai. Eksperimentiniai darbai, jiems skirtos priemonės, darbų dalykiniai bei metodiniai aprašai parengti 7-8, 9-10 ir 11-12 klasių mokiniams, mokytojams ir centro instruktoriams, kurie instruktuos mokinius ir/ar jų mokytojus eksperimentų technikos/įrangos, jų metodinės dalies ir gautų rezultatų pateikimo/apipavidalinimo klausimais. Centre pradėtą veiklą mokiniai tęs mokykloje, analizuodami gautus atliktų tyrimų rezultatus ir išvadas.

STEAM centrai įgyvendins bendrųjų programų gairėse bei naujose pagrindinio ir vidurinio ugdymo programose numatytus tikslus, sudarys galimybę mokiniams eksperimentuoti, glaudžiai integruojant tarpusavyje įvairių gamtos mokslų temas. Centruose vykdyta veikla taps papildoma motyvacija mokytis gamtamokslius dalykus ir siekti aukštesnių mokymosi rezultatų, kompensuos mokymo priemonių/įrangos trūkumą Lietuvos mokyklose ir pasitarnaus toliau tobulinant ugdymo programas ir jas įdiegiant Lietuvos mokyklose.

Reikšminiai žodžiai: gamtamokslis ugdymas, STEAM, metodiniai ir regioniniai STEAM centrai, fizikos dalyko mokymas mokyklose.

Literatūra

[1] http://www.vedlys.smm.lt/medziaga_mokytojams.html.

[2] https://osp.stat.gov.lt/lietuvos-statistikos-metrastis/lsm-2019/gyventojai-ir-socialine-statistika/svietimas.

Fizikos mokymo galimybės Vilniaus regiono STEAM atviros prieigos centre

Physics teaching opportunities at the STEAM open access center in the Vilnius region

Vidita Urbonienė[1], Aušra Kynienė[2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
vidita.urboniene@ff.vu.lt

Visame pasaulyje, kaip ir Lietuvoje kelia nerimą krintantis mokinių domėjimasis gamtos mokslais, kurie jiems dažnai atrodo nuobodūs ir sunkūs. STEAM (angl. Science, Technology, Engineering, Art and Mathematics) veikla mokyklose turėtų atverti duris mokinių kūrybiškumui, skatinti mokinių pasitikėjimą ir motyvuoti juos domėtis gamtos mokslais, technologijomis, inžinerija ir matematika [1]. Lietuvos darbo rinkoje jau kurį laiką pastebimas didelis poreikis STEAM sričių specialistų, o ateityje prognozuojamas dar didesnis jų stygius, tačiau STEAM studijas renkasi tik apie 26% moksleivių [2]. Siekiant išspręsti šias problemas ir įgyvendinti pažangos strategijoje „Lietuva 2030" numatytus tikslus, Lietuvoje kuriami metodiniai ir regioniniai tarpdisciplininiai STEAM centrų tinklas mokiniams, kurie prisidės prie gamtos mokslų, technologijų, inžinerijos ir matematikos mokslų populiarinimo, įvairių sričių inovacijų išbandymo ir jaunųjų tyrėjų ugdymo. Lietuvoje steigiama 10 STEAM centrų – 3 metodiniai ir 7 regioniniai. Šiuose Centruose mokiniai galės ne tik susipažinti su gamtos, technologijų, inžinerijos, matematikos mokslų dėsniais, naujaisiais atradimais, bet ir patys atlikti eksperimentus, kurti, lavinti savo pažintinius gebėjimus, vaizduotę ir padės pasirengti būsimoms studijoms ir tolimesnei karjerai. Siekiant didinti su STEM sritimis susijusių ekonomikos sektorių dalį rinkoje ir kuriamą pridėtinę vertę, vienas iš svarbiausių STEAM centro siekinių – per kūrybiškumą ir vientisą pasaulio vaizdą skatinti moksleivius domėtis moksline tiriamąja veikla, taip prisidedant prie ateities mokslininkų rengimo ir sąlygų inovacijų kultūrai augti kūrimo. STEAM centruose bus orientuojamasi į naują mokymosi formų taikymą ir jų įvairovės didinimą, mokyklos, mokslo ir verslo partnerystes ruošiant būsimus specialistus. Tai turėtų užtikrinti mokslo ir ugdymo kokybę, skatinti mokslinį ir technologinį išsilavinimą, inovatyvų mąstymą, atvirumą naujovėms ir nestandartinių sprendimų paieškai.

Vieną iš metodinių centrų steigia Vilniaus universitetas kartu su Vilniaus miesto savivaldybe. Centre bus sukurtos 8 STEAM laboratorijos, iš kurių šešios laboratorijos (po dvi pagal vieną sritį) atitiks standartizuotų regioninių laboratorijų sritis - gyvybės mokslų, chemijos, fizikos ir astronomijos, inžinerijos, robotikos ir informacinių technologijų – ir dvi specializuotos – šviesos technologijų ir skaitmeninės gamybos - laboratorijos, atliepiančios Vilniaus apskrities teritorijos specifiką, mokslo, technologijų ir verslo tendencijas. Specializuotoje Šviesos technologijų laboratorijoje mokiniai susipažins su Vilniaus regioną ir visą Lietuvą garsinančios lazerių pramonės moksliniu pagrindu – šviesos technologijomis ir jų taikymu įvairiuose tyrimuose ir gamybiniuose procesuose. Skaitmeninės gamybos laboratorijoje mokiniai taps pačiais tikriausiais kūrėjais, realizuojančiais tam tikrus iššūkius sprendžiančius produktus. Šioje įvairią skaitmeninę pjovimo, 3D spausdinimo ir apdirbimo įrangą turinčioje erdvėje bus galima realizuoti pačias įdomiausias idėjas paverčiant skaitmeniniais maketais ir galiausiai fiziniais produktais. Fizikos ir astrofizikos laboratorijoje bus galima atlikti įvairius fizikinius tyrimus, iliustruojančius šio mokslo galimybes ir perspektyvas. Laboratorija veiks dviejose erdvėse: tiriamoje laboratorijoje ir įspūdingą kupolą turinčioje Žvaigždžių salėje.

Vilniaus STEAM centras kvies aktyviai įsitraukti ir mokytojus – sudarys sąlygas tobulinti kompetencijas STEAM srityse, dalyvauti organizuojant ugdymo procesą pasitelkiant mokslo infrastruktūrą, naudotis metodinėmis gairėmis bei medžiaga pasirengiant atvykimui į STEAM centrą bei vėliau tęsiant pradėtas jame nagrinėti temas mokykloje. Popietinis STEAM centro laikas bus skirtas įvairioms neformaliojo švietimo veikloms ir kvies įvairaus amžiaus vaikus.

STEAM centro veiklos atvers galimybes atgaivinti pedagoginius tyrimus. Gamtos mokslų atstovai, inžinieriai, IT specialistai, psichologai ir pedagogai galės bendradarbiauti kurdami efektyvias ugdymo metodikas, kurdami ar atnaujindami ugdymo programas.

Nors šio centro pagrindinė tikslinė grupė yra mokiniai, tačiau labai norėtųsi, kad jis taptų pagrindiniu pagalbos mokytojui vieta, į kurią drąsiai kreiptųsi jau aktyviai veikiantys mokytojai ir būtų drąsinami šiandieninių galimybių dar neatradę kolegos. Tokia tarpdalykinė platforma turi visas galimybes ženkliai prisidėti prie kokybiškai kitokio lygio ugdymo, kuriame mokiniai įgalinami tapti lygiaverčiais šiandienos problemų sprendėjais.

Reikšminiai žodžiai: STEAM, integralus ugdymas, 21 a. klasė.

Literatūra

[1] C. Conradty & F.X. Bogner, Smart Learn. Environ. **7**, 26 (2020).
[2] LAMA BPO, 2019 m.

Post-kognityvinio mokymo metodo taikymas fizikos pamokose KSJMC

Application of post-cognitive teaching method in physics lessons in KSJMC

Saulius Jonas Martinaitis
Kauno suaugusiųjų ir jaunimo mokymo centras, Sandėliu g. 7, LT-45223, Kaunas
s.martinaitis@ksjmc.lt

Kauno suaugusiųjų ir jaunimo mokymo centre jau kelerius metus sėkmingai taikoma post-kognityvinio mokymo(si) metodika. Šia stilistika dėstomi visi mokomi dalykai. Teorija grindžiama tinkamu informacijos apdorojimu.

Daugelis moksleivių kiekvieną dieną skaito, nagrinėja įvairius tekstus, tačiau ne visada teisingai juos supranta. Ypač daug sunkumų iškyla suvokiant teksto pagrindinę mintį. Gyvenant šiuolaikinėje visuomenėje informacijos kiekiai itin dideli, todėl labai svarbu gebėti išsigryninti reikalingus duomenis ir mokėti juos įvertinti.

Post-kognityvinės mokymo(si) teorijos pagrindinis tikslas – lavinti įgūdžius, kurie reikalingi struktūruojant tekstą ir pateikiant argumentuotas išvadas. Siekiant, kad procesas būtų sklandus, reikalingi įgūdžiai ugdomi visų dalykų pamokose.

Post-kognityvinė metodika apima penkias pagrindines dalis:

1) medžiagos struktūravimas;
2) greiti išmokimo metodai;
3) žinių pasitikrinimas dirbant porose;
4) tikslaus ir aiškaus teksto rašymas (rašymo šablonai);
5) atlikto darbo kritinis įsivertinimas.

Post-kognityvinio mokymo(si) metodas tinka įvairaus amžiaus moksleiviams. Tai skatina moksleivius mąstytis kritiškai, analizuojant ir sisteminant įgytas žinias.

Pirmame etape pateikiami pavyzdžiai, kaip struktūruojama medžiaga. Moksleiviai supratę, kaip tai daroma, naudodamiesi pateiktais struktūravimo šablonais patys struktūruoja naują tekstą.

Antrame etape – moksleiviai rašo tekstą pagal šabloną, kuris taikomas greito išmokimo metode. Pavyzdžiui: „Sukurk istoriją. Pamatyk ją“, „Pupelės auginimas“ ir t. t. Remdamiesi parengtais šablonais moksleiviai mokosi analizuoti, sisteminti medžiagą, o taip pat lavinamas jų kūrybiškumas.

Didelis dėmesys skiriamas kritiniam mąstymui. Itin svarbu mokėti dirbti komandoje, gebėti analizuoti komandinį darbą, išreikšti savo nuomonę, teikti pasiūlymus. Tad trečiame etape moksleiviai susiskirsto poromis ir tokiu būdu dalinasi savo parengtais tekstais, užduoda vieni kitiems klausimus iš nagrinėjamos medžiagos, apmąsto atsakymus.

Sekančiame etape, naudodamiesi tikslaus rašymo šablonu, moksleiviai sukonkretina įsisavinamą medžiagą, išryškina pagrindinę mintį, pabaigoje apibendrina ir padaro išvadas.

Paskutiniame etape moksleiviai kritiškai įsivertina savo atliktą darbą, apmąsto, kas pavyko, ką galima padaryti geriau ir pan.

Post-kognityviniu mokymu siekiama lavinti suvokimą, atmintį, logiką (samprotavimą), kritinį mąstymą. Toks mokymasis sumažina stresą ruošiantis egzaminams, stiprina motyvaciją mokytis toliau. Svarbu ir tai, kad negaištamas laikas ilgiems aiškinimams ir pasakojimams. Moksleiviai gali kaupti savo pasiektus rezultatus (portfelį). Pasiekimų portfelis susideda iš įvairių skyrių, pavyzdžiui, bendrosios kompetencijos, papildomos kompetencijos, akademinės kompetencijos, lyderystės kompetencijos, kūrybos kompetencijos ir t. t. Suprantant, kad moksleiviai negali suvokti to, ko nežino, pirmiausiai dėmesys skiriame išmokimui, vėliau – supratimui.

Mokymuisi naudojami išmokimo metodai, kurie padeda lengvai įsiminti mokomąją medžiagą. Įsisavinus pradines žinias, likusią pamokos dalį galima skirti analitinio, kritinio ir kūrybinio mąstymo lavinimui, taikant kitus post-kognityvinio mokymo sistemos etapus.

Post-kognityvinio mokymo sistema pagerina mokymo(si) rezultatus, o pagerėjimas išlieka ilgą laiką. Sistema ypač efektyvi mokiniams, kurie turi žemesnius ir vidutinius pasiekimo rodiklius. Ir nors pradžioje mokytojams, norintiems kitaip organizuoti veiklą pamokoje, reikia ganėtinai daug laiko skirti medžiagos sustruktūravimui, išmokimo, kūrybos metodų įsisavinimui, tačiau vėliau, taikant post-kognityvinį mokymąsi, laiko ir pastangų išeikvojama mažiau. Parengtą struktūruotą medžiagą galima nuolat tobulinti. Moksleiviai sėkmingai prisitaiko prie šios sistemos, domisi, aktyviai dirba ir patiria sėkmę pamokoje.

Reikšminiai žodžiai: informacijos apdorojimas, teksto struktūravimas, rašymo šablonai, greito išmokimo metodai.

Literatūra

[1] T. Lagūnavičius, 35 išmokimo metodai – naujoji edukologija. 76 p. (Kaunas, Technologijos, 2013).
[2] Mokykla – „Supermarketas“ arba socialinio teisingumo mokykla, 74 p. (Kaunas, Technologijos, 2014).
[3] Post-kognityvinio mokymo sistema: kaip išmokyti mokinius mąstyti ir spręsti problemas, 30 p. (Kaunas, Technologijos, 2018).
[4] Neuroedukologinio mokymo sistema: kaip mokyti atsižvelgiant į centrinės nervų sistemos veiklą, 48 p. (Kaunas, Technologijos, 2018).

Mokinių žinių apie astronominius mastelius nustatymas

Determining schoolchildren' knowledge of astronomical scales

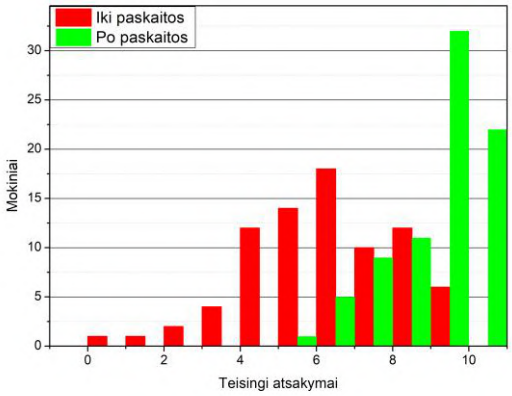
Aidas Sadauskas[1], Kastytis Zubovas[1,]
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
a.sadauskass@gmail.com

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

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

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

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



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

Reikšminiai žodžiai: masteliai astronomijoje, astronomijos edukacija, Galaktika..

Literatūra

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

Fizikos tiesos – gyvenimo kelrodžiai

The Truths of Physics Are the Guiding Forces of Life

Arturas Gavėnas
Kauno technikos kolegija, Inžinerijos mokslų fakultetas, Tvirtovės al. 35, LT-50155 Kaunas
arturas.gavenas@edu.ktk.lt

ŽODINIAI PRANEŠIMAI

Speciali sesija

SPEAR projekto įgyvendinimas

Vilniaus universitete Fizikos fakultete **O19**

Leidinio „Lietuvos fizikės 2021“ pristatymas **O20**

Mokinių tarptautinės fizikos olimpiados.

Lietuvos pasiekimai, problemos, ateitis **O21**

EPS Young Minds projektai jauniesiems tyrėjams **O22**

SPEAR projekto įgyvendinimas Vilniaus universitete Fizikos fakultete

Implementation of SPEAR project at Vilnius University Faculty of Physics

Sandra Pralgauskaitė[1], Aurelija Novelskaitė[2]
[1] Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2] Kauno fakultetas, Vilniaus universitetas, Muitinės g. 8, LT-4428 Kaunas
sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt

2019 m. Vilniaus universitete (VU) buvo pradėtas įgyvendinti Europos komisijos finansuojamas Horizon2020 Mokslas su visuomene ir visuomenei (Science with and for Society (SwafS)) programos projektas SPEAR - Supporting and Implementing Plans for Gender Equality in Academia and Research [1,2], kurio tikslas – įgyvendinti (tobulinti) lyčių lygybės planus (LLP) 9 skirtingose šalyse veikiančiuose projekto partnerių universitetuose.

VU prie projekto įgyvendinimo savanorystės pagrindu prisijungė VU biblioteka ir 9 akademiniai padaliniai: Ekonomikos ir verslo administravimo, Filosofijos, Fizikos, Istorijos, Kauno ir Komunikacijos fakultetai, Gyvybės mokslų centras, Tarptautinių santykių ir politikos mokslų institutas bei Verslo mokykla [3]. 2019-2020 m. bendro darbo rezultate, 5 VU akademinių padalinių Tarybos patvirtino LLP ir šiuo metu jie yra įgyvendinami. Bendrų diskusijų pagrindu buvo suformuluoti pagrindiniai tikslai ir identifikuotos esminės priemonės bendram VU LLP, kuris šiuo metu yra intensyviai rengiamas diskutuojant su administracija ir VU padalinių atstovėmis ir atstovais bei tarptautiniais SPEAR partneriais.

Vykdant VU Fizikos fakulteto (FF) 2018-2020 m. veiklos planą, dar 2019 m. fakultete buvo suburta darbo grupė, kurios užduotis buvo išsiaiškinti Fizikos fakultetui svarbias problemas atvirumo lygybei ir įvairovei Vilniaus universitete kūrimui. 2020 m. startavus SPEAR projektui, Fizikos fakultetas nusprendė aktyviai prisidėti prie Vilniaus universiteto Lyčių lygybės plano kūrimo ir sudarė darbo grupę, kuri parengtų FF Lyčių lygybės planą ir pasiūlytų priemones, kurias būtų tikslinga įtraukti į Vilniaus universiteto Lyčių lygybės planą. Darbo grupės sudėtis:

dr. Sandra Pralgauskaitė (grupės vadovė),
dr. Edita Stonkutė,
dr. Aurelija Vaitkuvienė,
dr. Aurelijus Rinkevičius,
dr. Jelena Tamulienė,
Evaldas Matijošaitis (VU SA FF atstovas).

Darbo grupė įvertino esamą lyčių lygybės padėtį VU FF, išanalizavo pasaulio patirtį ir parengė priemones, kurias būtų prasminga įgyvendinti Fakultete, siekiant, kad jaunos moterys būtų patenkintos studijomis bei motyvuotos dirbti VU Fizikos fakultete, labiau pasitikėtų savimi bei matytų galimybes, kaip pasiekti aukščiausius akademinės karjeros laiptelius.

Pirmas uždavinys kuriant Lyčių lygybės planą yra įvertinti esamą padėti institucijoje. VU FF dirba virš 400 darbuotojų, iš kurių 23 proc. yra moterys. Tarp akademinių darbuotojų, turinčių daktaro laipsnį, moterų yra 15 proc. Moterų procentas tarp fakulteto studentų pastaraisiais metais auga ir šiuo metų yra apie 29 proc. Toks lyčių pasiskirstymas tiek tarp Fizikos fakulteto studentų, tiek tarp darbuotojų fizinių mokslų srityje yra būdingas daugeliui pasaulio mokslo ir studijų institucijų. Nors fizikos studijas renkasi nedaug moterų, tačiau visose studijų pakopose (taip pat ir doktorantūroje) šiuo metu išsilaiko tas pats studenčių procentas. Fizikos fakulteto valdymo organuose (Taryboje, dekanate, komisijose ir komitetuose) lyčių atstovavimas šiuo metu yra iš dalies proporcingas: atitinka lyčių pasiskirstymą tarp akademinių darbuotojų.

Kaip pagrindinę spręstiną problemą Darbo grupė išskyrė tai, kad moterų akademinių darbuotojų procentas mažėja su kiekviena amžiaus grupe ar aukštesniu karjeros laipteliu: Fakultete dirbančios mokslininkės pasiekia vidurinį karjeros lygį (doc., vyresn. m. d.), tačiau, skirtingai nei vyrai, nepasiekia aukščiausiojo (prof., vyr. m. d.). Išanalizavusi Lietuvos ir pasaulio mokslo ir studijų institucijų patirtį, Darbo grupė pasiūlė priemonių, kuriomis tikimasi padidinti Fizikos fakulteto darbuotojų suvokimą apie lyčių lygybės užtikrinimo svarbą, sudaryti sąlygas siekti sėkmingos karjeros Fizikos fakultete, nepriklausomai nuo lyties, planą. Šiomis priemonėmis taip pat siekiama šviesti ir informuoti Fakulteto bendruomenę lyčių lygybės klausimais, užtikrinti proporcingą lyčių atstovavimą sprendimus priimančiuose organuose, didinti mokslininkių matomumą, sudaryti sąlygas studentėms ir studentams sėkmingai įsitraukti į mokslinę veiklą. Fizikos fakultetui aktualios priemonės numatomos įtraukti į Vilniaus universiteto Lyčių lygybės planą.

Reikšminiai žodžiai: lyčių lygybė, fizika, fiziniai mokslai, lyčių lygybės planas.

Literatūra

[1] www.gender-spear.eu (2021-09-06).
[2] www.vu.lt/apiemus/lygios-galimybes#spear-projektas-vu (2021-09-06).
[2] naujienos.vu.lt/atvirasvu-lyciu-lygybe-kaip-jos-sieksime (2021-09-06).

Leidinio „Lietuvos fizikės 2021“ pristatymas

Presentation of the publication „Lithuanian Women Physicists 2021“

Dalia Šatkovskienė[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius 10222
dalia.satkovskiene@ff.vu.lt

Šio pranešimo metu bus trumpai pristatyta Baltijos šalių mokslininkių, dirbančių tiksliuosiuose moksluose asociacija BASNET Forumas ir jos išleistas leidinys „Lietuvos fizikės 2021“.

Asociacija BASNET Forumas buvo įkurta 2008 Europos Komisijos siūlymu po sėkmingai įgyvendinto FP6 projekto „Baltijos šalių bendradarbiavimo tinklas: Moterys tiksliuosiuose moksluose ir aukštosiose technologijose“ (BASNET), kurį koordinavo Vilniaus universitetas. BASNET projektas sukūrė unikalų Baltijos šalių mokslininkių ir mokslo politikų bendradarbiavimo tinklą bei Baltijos šalių Strategiją, skirtą didinti moterų dalyvavimą moksle ir aukštųjų technologijų srityse. Jis turėjo nemažą įtaką tolesnei Europos lyčių lygybės politikos moksle raidai.

Vienas iš naujai įkurtos asociacijos tikslų buvo projekte sukurtos Strategijos įgyvendinimas Baltijos šalių regione. BASNET projekto pagrindu 2008 m. ŠMM ministrė įsakymu **patvirtino pirmąją Lietuvoje lyčių lygybės įgyvendinimo moksle Strategiją**. BASNET Forumas vadovavo ŠMM sukurtai darbo grupei, ruošusiai paraišką nacionaliniam Europos struktūrinių fondų projektui LYMOS, kuris buvo skirtas sukurti struktūrines prielaidas Strategijos įgyvendinimui Lietuvoje. Įdomu tai, kad 2011-2013 m. įgyvendintas LYMOS projektas pralenkė savo laiką ir sukūrė didelę dalį priemonių, vėliau panaudotų EK Lyčių lygybės planuose. BASNET Forumas pastangomis Baltijos Asamblėja 32- oje sesijoje priėmė Rezoliuciją, kurioje buvo pabrėžta lyčių lygybės svarba moksle Baltijos šalyse.

Asociacija organizavo eilę aukšto lygio tarptautinių ir regioninių konferencijų Vilniuje, kuriose buvo pristatomos naujausios lyčių lygybės politikos tendencijos moksle, svarstomos Baltijos šalių specifinės problemos ir poreikis į jas atsižvelgti aptariant ES mokslo politiką. Basnet Forumas dalyvauja tarptautiniuose projektuose ir Europiniuose bendradarbiavimo tinkluose. 2013 m. BASNET Forumas aktyviai dalyvavo VU koordinuojamame FP7 projekte „Struktūriniai pokyčiai skatinantys lyčių lygybę mokslo organizacijose“ SAPGERIC. Vienas iš svarbių projekto tikslų buvo aukšto lygio Lietuvos pirmininkavimui Europos Tarybai skirtos konferencijos SAPGERIC organizavimas, kurioje turėjo būti atspindėtas Europos Sąjungos lyčių lygybės politikos moksle įgyvendinimas bei suformuluotos tolesnės politikos gairės. Europos Tarybai buvo pateiktos konferencijos metu suformuluotos „VILNIAUS REKOMENDACIJOS 2013“.

Asociacija BASNET Forumas yra Europos prestižinės skėtinės mokslininkių asociacijos Europos mokslininkių platformos (EPWS) narė, aktyviai dalyvaujanti šios asociacijos darbe. Bendradarbiaudama su Europos parlamento nariais iš Lietuvos, asociacija ženkliai prisidėjo organizuojant EPWS susitikimus su EP nariais bei konferencijas Europos parlamente įvairiais Europos mokslininkėms rūpimais klausimais, inicijavo ir kuruoja rubriką „Europos mokslo politikų interviu“ EPWS internetiniame portale, dalyvauja ir pasisako tarptautinėse konferencijose visais su lyčių politika moksle susijusiais klausimais.

Vykdydama tęstinį projektą „Ant pažinimo ribos“, viešinantį fundamentalų moterų indėlį į tiksliųjų mokslų raidą, leidžia lietuvių kalba knygas apie žymiausias mokslininkes. 2016 m. išleido knygą apie kinų kilmės amerikiečių mokslininkę Wu Chien-Shiung; 2020 m. - Kiuri muziejaus medžiagos pagrindu sukurtą knygą apie M. Kiuri.

Šiame pranešime pristatysime fizikų visuomenei 2021 m. išleistą knygą-fotoalbumą „Lietuvos fizikės 2021“.

Leidiniu siekiama didinti Lietuvos mokslo institucijose mokslinį darbą dirbančių fizikių matomumą visuomenėje ir skatinti gabias tiksliesiems mokslams jaunas merginas ir moteris rinktis šią mokslo sritį savo profesija.

Fizika yra mokslas, stipriai pakeitęs žmonijos gyvenimą, todėl pažinti tuos, kurie jį kuria, yra svarbu. Leidiniu siekiama paskatinti jį paėmusį į rankas skaitytoją susimąstyti, kodėl fizikės beveik nematomos visuomenėje, o tą patį darbą dirbantys mokslininkai vyrai daugiau ar mažiau žinomi daugeliui.

Leidinyje pateikiamos fizikių – fizikos mokslų daktarių, dirbančių Vilniaus universiteto Fizikos fakultete, Fizinių ir technologijos mokslų centre, Vilniaus Gedimino universiteto ir Kauno technologijos universitetų Fizikos katedrose, mokslinių interesų sritys ir portretai, kurių autorius yra žinomas dailininkas ir fotografas Marius Abramavičius. Jo sukurtuose fizikių portretuose išryškintas ne vien moteriškumas, bet ir tokios talento bei profesionalumo dedamosios kaip smalsumas, kūrybiškumas, užsispyrimas siekti tikslo ir meistriškumo.

Mokslinių pasiekimų reikšmė per laiką kinta, todėl fizikių užimamos pozicijos mokslinėje hierarchijoje atsispindi tik knygelės gale pateiktoje statistikoje.

Malonu, kad fotoalbumo išleidimą parėmė visos Lietuvos mokslo institucijos, kuriose vystomas fizikos mokslas, ar jų padaliniai bei Lietuvos fizikų draugija.

Reikšminiai žodžiai: lyčių lygybė, fizikių matomumas visuomenėje



Mokinių tarptautinės fizikos olimpiados. Lietuvos pasiekimai, problemos, ateitis

International Physics Olympiads for High School Students. Lithuanian accomplishment, problems, future

Edmundas Kuokštis
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
edmundas.kuokstis@ff.vu.lt

Peržvelgiamos mokinių tarptautinių fizikos olimpiadų (International Physics Olympiads - IPhO) raida ir turinys, pagrindinį dėmesį sutelkiant palyginimui su Lietuvos aktualijomis, jos programomis ir mokymo vidurinėje mokykloje raida. Pagal mokinių pasiekimus galima iš dalies spręsti (bet tikrai ne absoliučiai) apie šalies(ių) mokinių gamtamokslinį raštingumą, palyginti tarpusavyje. Tarptautinių olimpiadų turinį, reikalavimus ir rezultatus galima sugretinti su gamtamokslinio profilio tarptautiniais patikrinimais (pvz., PISA, TIMS).

Tarptautinių olimpiadų pagrindinis siekis – patikrinti vidurinių mokyklų mokinių paties aukščiausio lygio fizikos žinias, kritinį gamtamokslinį mąstymą. Šiuo metu tai vienas didžiausių šio tipo renginių pasaulyje [1].

Paskutinioji 51-oji tarptautinė IPhO fizikos olimpiada turėjo įvykti 2020 metais Lietuvoje, ir buvo įdėta daug mūsų kaip organizatorių pastangų ją rengiant tradiciniu būdu. IPhO paprastai dalyvauja apie 90 šalių (tai išties pasaulinis renginys). Dalyvių – daugiau kaip 400. Renginys trunka apie 8 dienas. Varžosi vidurinių mokyklų moksleiviai, bet ne vyresni kaip 20 m. Visiems užduotys vienodos. 1 diena – eksperimentinės užduotys, kita – teoriniai uždaviniai. Tai tradicinis olimpiadų formatas.

Jei kiek prisiminti istorijos, tai Tarptautinė fizikos olimpiada pirmą kartą įvyko Lenkijoje 1967 m. dalyvaujant Vengrijos, Čekoslovakijos, Lenkijos, Bulgarijos ir Rumunijos komandoms. 1989 m. Varšuvoje (Lenkija) vykusioje tarptautinėje fizikos olimpiadoje Lietuvos komanda buvo pakviesta svečio teisėmis, o nuo 1992 m. olimpiadoje kasmet vyksta kaip oficiali komanda. Lietuva turi gana gilias respublikinių olimpiadų (taip pat ir fizikos) rengimo tradicijas. Pvz., šiemet Lietuvoje turėjome jau 67-ąją fizikos olimpiadą. Beje, per tą laiką Lietuvos moksleiviai IPhO iškovojo 2 aukso, 13 sidabro ir 41 bronzos medalius bei 45 pagyrimo raštus.

51-osios IPhO visą eigą, deja, sumaišė ir komplikavo pandemija. Taigi, Tarptautinis Olimpiados komitetas nutarė nukelti IPhO2020 nukelti į 2021 m., tačiau pandemijai užsitęsus šiemet nutarta pakeisti olimpiadą iš kontaktinės į nuotolinę, taigi, daug kas kardinaliai keitėsi. Tai tikrai buvo rimtas iššūkis tiek mums, tiek mokiniams ir kitiems olimpiadų dalyviams bei organizatoriams. Apibendrinant galima pasidžiaugti, kad 51-oji IPhO2021 pavyko, dar daugiau, atsirado jos organizavimo visiškai naujų formų, pasinaudojant nuotolinių konferencijų organizavimo galimybėmis. Tai turėtų praversti ateities renginių organizatoriams.

Aptariamos kai kurių užduočių specifinės ypatybės (pvz., visiems paliko itin stiprų įspūdį modernus fizikinis eksperimentas panaudojant šiuolaikines technologijas).

Pranešime aptariamos IPhO turinio ypatybės, jų tendencijos, ryšys su Lietuvos vidurinių mokyklų fizikos programomis, užduočių formavimo principais. Sutelkiamas dėmesys įvairioms mokinių fizikos programoms, kurių Lietuvoje net kelios. Beje, tai dabar Lietuvoje aktualu, nes programos keičiamos kaip dalis švietimo reformos konteksto. Programų analizė apima tiek IPhO programą ir jos kitimą [1], tiek palyginimą su Lietuvos vidurinių mokyklų programomis (bendrosiomis [2] ir brandos egzamino [3]), o taip pat Lietuvos moksleivių fizikos olimpiados programa [4]. Būtina atkreipti dėmesį į minėtų programų skirtingą paskirtį ir tikslus.

IPhO programa gana stipriai skiriasi nuo minėtų mūsų nacionalinių. Nors joje ir naudojamas tradicinis fizikos dalyko turinys, temos, tačiau gylis smarkiai skiriasi. Iš esmės ši programa – tai aukšto lygio universiteto fizikos fakulteto bendrosios fizikos bakalauro programa – nėra temos ar klausimo, kuris nebūtų paliestas IPhO programoje. Pažymėtina, kad IPhO sėkmingam mokinių pasirodymui būtinas ir matematikos universiteto lygio žinojimas. Ypač šios rūšies užduotis mėgsta pietryčių Azijos atstovai, beje, paprastai užimantys aukščiausias vietas. Pvz., reikalaujama, kad mokiniai laisvai diferencijuotų, integruotų, net gebėtų sudaryti ir spręsti paprastesnes diferencines lygtis, manipuliuoti vektoriais (pvz., skaliarine ir vektorine jų sandauga), naudotis kompleksiniais skaičiais ir kt. Mūsų vidurinės mokyklos mokiniai be specialaus pasiruošimo šito atlikti negali. Dar daugiau, pažymėtina, kad Lietuvos bendrojo lavinimo mokyklų fizikos programa vykdant seriją reformos žingsnių buvo dažnai susiaurinta ir ėmė nebeatitikti gerokai platesnių tarptautinių fizikos edukologijos tendencijų, o taip pat tarptautinių olimpiadų programų.

Aptariama, kaip šie iššūkiai sprendžiami Lietuvoje (pvz., ypatingai gabių mokinių mokykla „Fizikos olimpas“ veikla).

Reikšminiai žodžiai: olimpiados, fizikos programos, mokinių pasiekimai.

Literatūra

[1] http://ipho.org
[2] https://www.smm.lt/uploads/documents/svietimas/ugdymo-programos/5_Gamtamokslinis-ugdymas.pdf
[3] https://www.nec.lt/failai/7183_Priedas_nr_3-fiz.pdf
[4] https://www.lmnsc.lt/uplfiles2/Olimpia[5]dos/fizikos_olimpiados_dalykine_programa_2018.pdf

International networking, young researchers involvement with the scientific community, promotion of science among local communities.

These should be goals of every young researcher in Europe. Of course, these highly-rewarding activities are time-consuming and hence the focus of most young minds is on getting their research task done, be it in the lab or in front of a computer. A strong institutional support is therefore deeply needed. And this is the kind of support is now available in the framework of the EPS Young Minds Project.

About us

Young scientists — from undergraduates to postdoctoral researchers — are encouraged to organize EPS Young Minds Sections that collaborate to develop scientific, networking and outreach activities. These Sections are composed of at least four members: a president, a vice-president, a secretary and a treasurer. A local senior scientist acts as advisor to the local Section, providing advice and assistance. These Sections offer many benefits to their members and the local communities:

– seminars and colloquia can help broaden the knowledge of the members outside their special field of interest
– visits to local industries and research labs can boost the integration between industry and research, while providing an outlook on the possible employment possibilities for recent graduates
– educational outreach programs to local schools and communities can provide a stimulus for new generations of scientists and increase the awareness for the importance of scientific research amongst the widest public.

EPS and the affiliated national societies will provide financial support for such activities though a specific granting scheme.

Local Sections are strongly encouraged to interact amongst them and build an international network. This can be organized at various levels: one-to-one exchanges between local Sections; European-level student conferences; and interaction with the student organizations of other organizations, e.g. OSA Student Chapters or SPIE Student Chapters. In particular, the established student network IONS, is a great way to connect to other leading scientists from all over Europe — and EPS will provide financial support though specific grants.

Boosting the creativity of young minds, setting up a bright, brave, creative, determined, passionate and focused initiative — this is the essence of the EPS Young Minds Project. As this project is open to all enthusiastic young researchers in Europe, be sure to be part of the next generation of leaders in science.

Get this stimulus and join the EPS Young Minds Project today!

LIETUVOS FIZIKŲ DRAUGIJOS VEIKLŲ APŽVALGA



http://lnfk.ftmc.lt

Lietuvos fizikų draugijos veiklų apžvalga

Lietuvos fizikų draugijos valdyba: J. V. Vaitkus, G. Tautvaišienė, P. Balkevičius, G. Valušis, J. Šulskus, J. Tamulienė, A. Juodagalvis, J. Banys, M. Mackoit-Sinkevičienė, G. Laukaitis, Ž. Rutkūnienė, M. Sriubas, O. Rancova, V. Remeikis, R. Skorulskienė
juozas.vaitkus@ff.vu.lt

Lietuvos fizikų draugijos (LFD) istorija yra simboliška Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijos (LNFK) atžvilgiu. Prieš 58-erius metus, 5-osios LNFK metu, akademikas Adolfas Jucys kalbėjo apie šios draugijos įkūrimo būtinybę. Oficiali LFD įkūrimo data yra kovo 29 d. 1963-tieji metai. LFD buvo priimta į Europos fizikų draugiją (EPS) 1992 m., ir šiuo metu LFD ten yra kartu su dar 42 šalių fizikų draugijomis. Netrukus po to, 2002 m. tapome ir Tarptautinės grynosios ir taikomosios fizikos sąjungos (IUPAP) nariais.

LFD apjungia Lietuvos mokslo įstaigas, mokslo centrus, institutus ir asociacijas, kuriuose yra fizikų į vieną didelę fizikų bendruomenę. Vienas iš LFD tikslų ir siekių yra populiarinti gamtos mokslus visuomenėje, ypatingai jaunimo tarpe, kad jauni žmonės rinktųsi fizikos studijas. Taip pat LFD padeda organizuoti nacionalines ir tarptautines konferencijas, remia mokslininkų išvykas ar leidinių leidybą, skatina mokslo populiarinimo renginius - visos iniciatyvos gauna LFD paramą ir jos narių pagalbą.

Šiuo metu LFD priklauso 164 fizikai, į kurių tarpą įeina mokytojai, studentai, doktorantai, dirbantys fizikai ir fizikai emeritai. Tai yra gražus skaičius, kurį ateityje siekiame didinti. Iš 164 narių kas keletą metų einamajai kadencijai yra atrenkama LFD valdyba - aktyviausi draugijos nariai, siūlantys tolimesnes veiklos kryptis, ateities vizijas, pokyčius. 2018-2021 m. išrinktos valdybos gretose yra FTMC, VU FF, KTU Fizikos katedros vadovai ir LMA prezidentas.

2021 m. įvyko trys virtualūs LFD valdybos posėdžiai organizaciniais LNFK klausimais, buvo sudarytas programos komitetas. BASNET forumo inicijuotam leidiniui „*Lietuvos fizikės 2021*“ buvo paskirtas tikslinis įnašas. Valdyba paruošė metinę ataskaitą ir aptarė artėjančios Asamblėjos - naujųjų valdybos narių ir pirmininko rinkimo klausimus. Vienas iš darbų buvo LFD nario elektroninės kortelės sukūrimas.

Verta paminėti, kad LFD kreipėsi į Europos fizikų draugiją dėl VU kaip istorinės vietos fizikai įtraukimo. Prof. Henrikas Niewodniczanski, gimęs Vilniuje ir baigęs Vilniaus Stefano Batoro universitetą (apsigynęs čia fizikos mokslų daktaro laipsnį), būtent Vilniuje atrado magnetinę dipolinę spinduliuotę.

LFD aktyviai atstovauja Lietuvos fizikus užsienyje minint kitų draugijų sukaktis. LFD prezidentas J. V. Vaitkus šiais metais parengė sveikinimą Lenkijos fizikų mokslinei draugijai, kurį šventė savo šimtmetį. Taip pat jis padarė pranešimą apie mūsų draugiją Lenkijos fizikų suvažiavime Bydgoščije.

LFD nariai skaitė paskaitas mokytojams apie naujienas fizikoje bei prisideda prie kasmetinio mokslo populiarinimo leidinio „*Lietuvos dangus*“ leidybos. LFD valdybos nariai prisidėjo prie įvairių konferencijų organizavimo būdami programos ir organizacinio komiteto nariais, jų tarpe: tarptautinė Lietuvos ir Lenkijos mokslininkų konferencija „*Apropos17*“, virtuali vasaros mokykla „*Asteroid photometry*“, tarptautinė jaunųjų mokslininkų konferencija energetikos ir gamtos mokslų srityje „*CYSENI*“, taip pat prie studentų konferencijos „*Open Readings*“. Reikėtų paminėti apie draugijos darbą rengiant fizikos mokymo vidurinėse mokyklose atnaujinimą, žr. mokykla.2030.lt.

Šių metų vasaros pabaigoje įvyko Vokietijos Švietimo ir mokslo ministerijos organizuojamas *Quantum Future Academy* virtualus dalyvių susibūrimas, kuriame bendradarbiauti susitiko apie 60 rinktinių Europos Sąjungos studentų, besidominčių ateities kvantinėmis technologijomis. LFD numatė paramą dviem VU FF studentams nuvykti į *Quantum Future Academy 2020* renginį (Edvinui Gvozdiovui ir Edgarui Romanauskui). Juos atrinko speciali komisija.

Taip pat norėtume ypatingai paminėti 1-ąją Europos Kvantinės savaitės edukacinę sesiją, kuri įvyko Lietuvoje. Šiame renginyje dalyvavo virš 1400 moksleivių ir virš 80 mokyklų. Europos fizikos bendruomenės žurnalas „*Europhysics News*“ paprašė LFD apžvalginio straipsnio apie šį renginį.

2021 m. LFD viceprezidentė G. Tautvaišienė tapo Tarptautinės astronomų sąjungos komisijos Lokalioji Visata prezidente, kuriai priklauso virš 12 tūkst. pasaulio astronomų ir astrofizikų.

2021 m. LFD viceprezidentas G. Valušis tapo naujuoju RTO LT valdymo tarybos Prezidentu.

Prie LFD veikia EPS Young Minds Vilnius skyrius, kuriam nuo 2016 m. vadovauja LFD valdybos narė M. Mackoit-Sinkevičienė. Šioje organizacijoje aktyviai veikia studentai, doktorantai ir jaunieji mokslininkai.

Be galo malonu, kad Lietuvos lazerių asociacija kaip fizikų bendruomenės dalis, prie fizikos viešinimo prisidėjo ir ateityje planuoja prisidėti moksleivių tarpe. Šių metų pagrindinis renginys buvo virtualus Šviesos dienos paminėjimas. Šviesos dienos proga buvo surengtas fotonuotraukų konkursas.

LFD prisideda prie fizikų bendradarbiavimo stiprinant fiziką Lietuvoje ir būsimą mūsų šalies klestėjimą. Sekite LFD naujienas www.lietuvos-fizikai.lt.

DISKUSIJA

Ši konferencija, skirtingai nuo ankstesnių, turėjo ir diskusijų segmentą.

Jos tema „**Fizika ir aukštųjų technologijų pramonė – iššūkiai, galimybės, politika**“ sulaukė dėmesio tiek „gyvai“ salėje, tiek stebinčių transliaciją internetu.

Joje dalyvavo didžiausius atlyginimus šalyje mokančių ir daugiausia į mokslinius tyrimus ir eksperimentinę plėtrą investuojančių įmonių atstovai:

„Light Conversion" gen. direktorius **Martynas Barkauskas,**

„Teltonika IOT Group" steigėjas ir prezidentas **Arvydas Paukštys**

bei viceprezidentas inovacijoms **Ernestas Zdaniauskis**,

o taip pat

Švietimo, mokslo ir sporto viceministras **Gintautas Jakštas**,

verslo konsultantas ir signataras **Aleksandras Abišala**,

finansų analitikas, investuotojas ir signataras **Valdemaras Katkus**,

VU profesorius akad. **Audrius Dubietis**;

diskusiją moderavo FTMC direktorius Gintaras Valušis.

Pagrindinė pokalbio tema – ką galima suvienijus visų – politikų, mokslininkų ir verslininkų – pastangas padaryti, kad aukštos pridedamosios vertės segmentas šalies industrijoje būtų ženkliai didesnis, ir kad mokslo ir inovacijų ekosistema pradėtų efektyviai veikti?



KONCERTAS



http://lnfk.ftmc.lt

Konferencija išsiskyrė ir meniniu akcentu – konferencijos metu, po diskusijos apie aukštųjų technologijų pramonę, buvo surengtas koncertas – atlikta speciali programa „**ElectroBrass**", savyje jungianti pučiamųjų orkestro skambesį ir šiuolaikinės elektronikos muzikos sintezę.

Dėkojame „Sekmadieniniam vario dūdų orkestrui" (angl. *Sunday Brass Band*).



ŽODINIAI PRANEŠIMAI

2 dalis

Lazerių fizika ir technologijos **O23-O26**

Astrofizika, astronomija ir kosmologija **O27-O30**

Šviesos technologijos ir kvantinė optika **O31**

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O32**

Šviesos technologijos ir kvantinė optika **O33**

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O34-O36**

Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara **O37-O40**

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O41**

Elektronika ir optoelektronika **O42-O44**

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika **O45**

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O46**

Aplinkos ir energetikos fizika bei technologijos **O47-O49**

Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara **O50**

Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika **O51-O55**

Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O56**

Lazerių fizika ir technologijos **O57-O60**

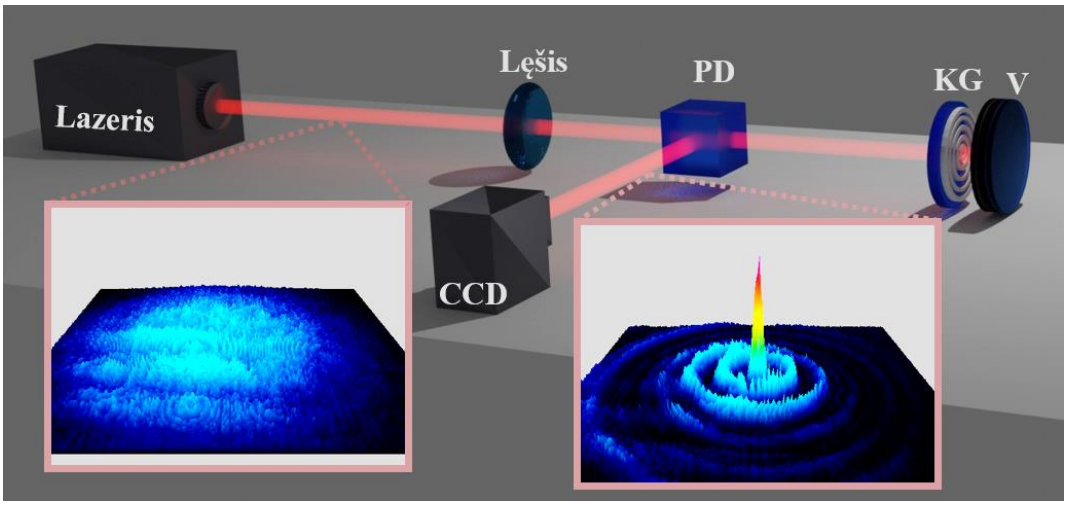
Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **O61**

Superkolimacija panaudojant ašisimetrinę fotoniką

Supecollimation with axisymmetric photonics

Darius Gailevičius[1], Indrė Meškėlaitė[1], Edvinas Aleksandravičius[1], Martynas Peckus[1], Lina Grinevičiūtė[2], Ruslan Lymarenko[3], Victor Taranenko[3], Kęstutis Staliūnas[4,5]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[3]International center "Institute of Applied Optics" NAS of Ukraine, Kudryavskaya Str. 10G, Kyiv, 04053, Ukraine
[4]ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain
[5]UPC, Dep. de Fisica, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona) Spain

darius.gailevcius@ff.vu.lt



1 pav. Sistemos, kurioje eksperimentiškai galima stebėti superkolimacijos reiškinį koncentrinės gardelės (KG)-veidrodžio (V) konfigūracijoje, pavyzdys.

Lazerinių pluoštų formavimas ir valdymas yra aktuali problema informacijos perdavime, detektavime ir medžiagų apdirbime. Daugelis taikymų yra orientuoti į pluoštų intensyvumo ir fazės valdymą vadinamajame artimajame lauke, tačiau tolimojo lauko reiškiniai mikrosistemose turėtų būti ne mažiau įdomu. Vienas naujas būdas valdyti tolimojo lauko skirstinius yra pritaikant superkolimaciją [1].

Ją galima stebėti sistemose sudarytose iš periodiškai išdėstytų fazinių gardelių, sudarytų iš koncentrinių žiedų, kurios atsikartoja išilgai optinės ašies. Superkolimaciją apibrėžia plataus kampinio intensyvumo spektro pluošto transformacija į labai gerai apibrėžtą aukšto smailinio intensyvumo ir mažos skėsties pluoštą. Toks pluoštas gali būti palyginamas su Beselio pluoštu, tačiau aštri smailė atsiranda ne artimajame lauke, bet priešingai – tolimajame.

Intuityvaus būdo suvokti, kaip formuojasi superkolimuotas pluoštas, nėra, nes 1D arba 2D periodinėse sistemose jis nesusidaro. Kas aišku, kad tai yra pakopinis procesas, kuriam reikalinga daugiariopa difrakcija. Ji susijusi su netrivialiu būdu, kaip rezonanse su periodiniu dariniu esančioms plokščioms bangoms, sklaidomoms iš 0-eilės į aukštesnes difrakcines eiles, difrakcijos kampai yra nelygūs priešingam procesui, dėl kurio spinduliuotė gali persiskirstyti pluošto kampiniame spektre.

Taigi šio pranešimo tikslas yra atskleisti, kaip toks reiškinys gali susidaryti sukimo (ašinę) simetriją turinčiose periodinėse sistemose, pavyzdžiui, fotoniniuose kristaluose [1,2] ir rezonatoriuose su koncentrinėmis gardelėmis [3, 4]. Galiausiai aptarsiu, kaip „sulaužytą" ašisimetrinių fotoninių kristalų simetriją panaudoti interpretuojant šiuos reiškinius praktiniuose kontekstuose [5].

Reikšminiai žodžiai: pluoštų formavimas, fotoniniai kristalai, mikrofotonika.

Literatūra

[1] V. Purlys, L. Maigyte, D. Gailevičius, M. Peckus, R. Gadonas, and K. Staliunas, Appl. Phys. Lett. **104**(22), 221108 (2014)..
[2] V. Purlys, L. Maigyte, D. Gailevičius, M. Peckus, M. Malinauskas, R. Gadonas, and K. Staliunas, Opt. Lett. **39**(4), 929 (2014).
[3] D. Gailevicius, V. Koliadenko, V. Purlys, M. Peckus, V. Taranenko, and K. Staliunas, Sci. Rep. **6**(1), 34173 (2016)..
[4] R. A. Lymarenko, D. Gailevicius, I. Meskelaite, L. Grineviciute, M. Peckus, K. Staliunas, and V. B. Taranenko, Opt. Lett. **46**(16), 3845 (2021).
[5] D. Gailevicius, E. Aleksandravičius, V. Purlys, K. Staliunas, Ann. der Physik, Priimta (2021).

Kūginės trečiosios harmonikos generacija dėl didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniais lazerio impulsáis indukuotų tūrinių nanogardelių skaidriuose dielektrikuose

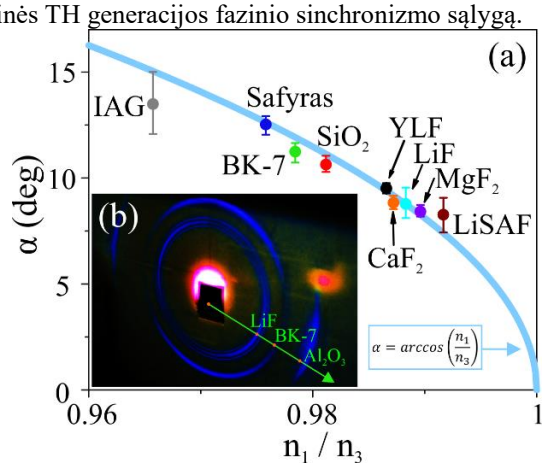
Conical third harmonic generation due to femtosecond laser induced volume nanogratings in transparent optical materials during filamentation at high repetition rates

Robertas Grigutis[1], Vytautas Jukna[1], Marius Navickas[1], Gintaras Tamošauskas[1], Kęstutis Staliūnas[1,2], Audrius Dubietis[1]
[1]Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius, Lietuva
[2] Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig de Lluís Companys, 23, 08010, Barcelona, Catalonia, Spain
robertas.grigutis@ff.vu.lt

Lazeriu indukuotos periodinės paviršinės struktūros (angl. LIPSS) gali būti formuojamos ant įvairiausių medžiagų: metalų, puslaidininkių, dielektrikų [1]. Šie dariniai randa platų pritaikymą tokiose srityse, kaip plazmonika, fotonika, mikrofluidika ir medicina. LIPSS pagal savo erdvinį periodiškumą ir gardelės orientaciją gali būti skirstomos į tris tipus: aukšto erdvinio dažnio (angl. HSFL), žemo erdvinio dažnio (angl. LSFL) bei periodines paviršines žiedines struktūras (angl. LIPASS). Taip pat, esant aštriom fokusavimo sąlygoms ultratrumpaisiais lazerio impulsais buvo stebimas periodinių nanogardelių formavimasis skaidrių dielektrinių medžiagų tūryje [2]. Šių tūrinių nanodarinių formavimosi fizikinis mechanizmas yra artimas HSFL [3]. LIPSS susidaro ir femtosekundinių šviesos gijų ir superkontinuumo (SC) generacijos metu. Neseniai atlikti tyrimai pademonstravo kūginės trečiosios harmonikos (TH) generacijos reiškinį dėl skaidrių medžiagų tūryje indukuojamos optinės pažaidos atsiradimo ir nustatyta, jog TH spinduliuotės atsiradimo laikas koreliuoja su SC spektro siaurėjimo pradžia [4].

Šiame pranešime yra pristatomi ultraspartaus lazerio impulsais indukuotų periodinių paviršinių struktūrų morfologijų ir erdvinių periodų evoliucijos tyrimų rezultatai, nagrinėjant kūginės TH generacijos reiškinį įvairiuose skaidriuose dielektrikuose: IAG, safyre, YLF, LiF, MgF_2, CaF_2, LiSAF, SiO_2 bei BK-7 stikle, vykstant femtosekundinių šviesos gijų formavimuisi. Atliekant eksperimentus iš femtosekundinio Yb:KGV lazerio (Pharos, Light Conversion) išėjusi tiesiškai poliarizuota 1035 nm centrinio bangos ilgio ir 180 fs impulso trukmės spinduliuotė, kurios maksimalus impulsų pasikartojimo dažnis 200 kHz, buvo panaudojama LIPSS formavimui, fokusuojant lazerio pluoštą į priekinį bandinių paviršių. LIPSS morfologijų nuotraukos buvo gautos naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (angl. SEM). Dvimatė Furjė transformacija (2D-FT) buvo atlikta norint įvertinti LIPSS erdvinių periodų spektrus.

Atlikus LIPSS morfologijų ir periodiškumų matavimus visose tirtose medžiagose, nustatyta, jog didinant lazerio impulsų skaičių, yra stebimas universalus perėjimas nuo HSFL iki LSFL ir galiausiai iki LIPASS struktūrų. Taip pat, buvo eksperimentiškai nustatyti TH sklidimo kampai medžiagų viduje, kurie yra pavaizduoti 1(a) pav. Rezultatai rodo, kad kūginė TH generacija vyksta kaip nekolinearus keturbangis dažnių maišymo procesas, kur TH kūgio kampą (1(b) pav.) užduoda išilginis fazinis sinchronizmas, nulemtas medžiagos dispersijos, kai tuo tarpu skersinio fazinio sinchronizmo sąlyga yra išpildoma pasitelkus atitinkamo ilgio tūrinės nanogardelės vektorių. Taigi, šiame darbe yra demonstruojama, jog formuojantis šviesos gijoms, didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniai impulsai skaidrios netiesinės medžiagos tūryje indukuoja nanogardelę, turinčią platų erdvinių periodų spektrą ir atitinkamo ilgio gardelės vektorius, reikalingus tenkinti kūginės TH generacijos fazinio sinchronizmo sąlygą.



1 pav. (a) Eksperimentiškai nustatyti kūginės TH sklidimo kampai įvairiose medžiagose. (b) Kūginė TH ir SC generacija LiF, BK-7 ir safyre.

Reikšminiai žodžiai: superkontinuumo generacija, trečiosios harmonikos generacija.

Literatūra

[1] J. Bonse, J. Krüger, S. Höhm, and A. Rosenfeld, "Femtosecond laser induced periodic surface structures", J. Laser Appl. **24**, 042006 (2012).
[2] R. Buividas, M. Mikutis, and S. Juodkazis, "Surface and bulk structuring of materials by ripples with long and short laser pulses: Recent advances", Prog. Quantum Electron. **38**, 119–156 (2014).
[3] A. Rudenko, J.-P. Colombier, S. Höhm, A. Rosenfeld, J. Krüger, J. Bonse, and T. E. Itina, "Spontaneous periodic ordering on the surface and in the bulk of dielectrics irradiated by ultrafast laser: a shared electromagnetic origin", Sci. Rep. **7**, 12306 (2017).
[4] R. Grigutis, G. Tamošauskas, V. Jukna, A. Risos, and A. Dubietis, "Supercontinuum generation and optical damage of sapphire and YAG at high repetition rates", Opt. Lett. **45**, 4507–4510 (2020).

Optinės adatos generavimas geometrinės fazės elementais esant netobulom sąlygoms

Generation of the optical needle with geometric phase elements under imperfect conditions

Sergejus Orlovas, Pavel Gotovski, Paulius Šlevas, Vytautas Jukna, Orestas Ulčinas, Antanas Urbas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Koherentinės optikos laboratorija, Sauletekio 3, LT-10257, Vilnius
sergejus.orlovas@ftmc.lt

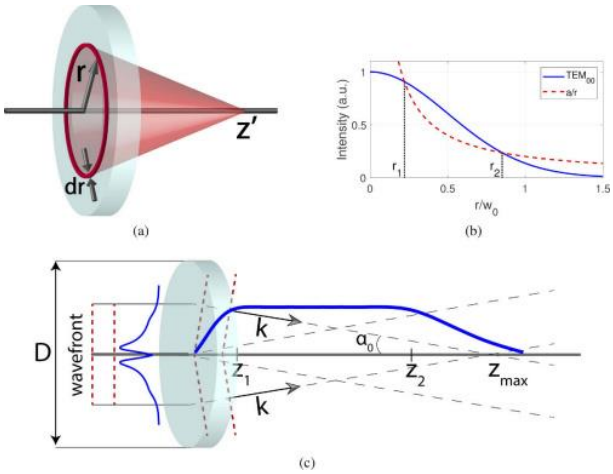
Optinės bangos, turinčios ilgas židinio linijas ir mažus židinio taškų dydžius, yra pageidaujamos įvairiose srityse ir vadinamos optinėmis adatomis, o Beselio pluoštai yra įprastas optinių adatų pavyzdys. Beselio pluoštams generuoti reguliariai naudojamos kūginės prizmės, tačiau šį metodą dažniausiai kamuoja ašinio intensyvumo svyravimai. Šiame darbe mes pristatome optinį elementą, pagrįstą erdvės Pancharatnam-Berry faze (PBP), įgalinantį sukurti didelės galios optinę adatą su glotniu ir pastoviu ašinio intensyvumo profiliu [1]. Fazė PBP elementuose atsiranda ne dėl optinio kelio skirtumų, bet atsiranda dėl geometrinės fazės, atsirandančios manipuliuojant erdvėje vektoriniu dvigubai laužiančiu subpikseliu. Mūsų eksperimente faze yra įgyvendinama su 2 tipo neskaidria stiklo medžiagos modifikacija, dėl kurios susidaro nanogardelės su lėtomis ašimis, nukreiptomis statmenai įrašančio spindulio poliarizacijai. Tiek skaitmeniškai, tiek eksperimentiniu būdu tiriame optinės adatos generacijos stabilumą netobulomis sąlygomis. Optinių schemų neatitikimų įtaka yra tiriama skaitmeniškai ir eksperimentiškai.

Visų pirma, mes pagaminome PBP elementą, generuojantį 600 bangos ilgių ilgio ir 20 bangos ilgių pločio optinę adatą. PBP elemento efektyvumas yra 50%. Šį PBP elementą sėkmingai pagamino „Altechna R&D“, o eksperimentas gerai atitinka teorinius lūkesčius.

Mes tiek skaitmeniškai, tiek eksperimentiškai ištyrėme optinės adatos generacijos stabilumą įvairiomis netobulomis sąlygomis. Pasirodo, kad į sistemą patekus platesniam Gauso spinduliui $w0+\Delta w0$ gaunama į Besselio pluošta panaši adata, kurios intensyvumas ašyje nuolat didėja. Kai spindulys yra mažesnis $w0$-$\Delta w0$, ašies intensyvumas mažėja tolstant nuo elemento. Optinė adata buvo stabili $|\Delta w0|/w0 \approx 0.05$.

Kampinis PBP elemento ir linijinio poliarizatoriaus išderinimas turi sudėtingesnį poveikį, nes poliarizatorius yra atsakingas už nepageidaujamų komponentų filtravimą ir tinkamą PBP elemento veikimą. Šiuo atveju, kai azimutinio poslinkio reikšmės $\beta = \in -40^\circ, 40^\circ$, optinė adata yra iškraipyta – ašinė intensyvumo forma tampa įgaubta arba išgaubta. Esant $\beta > 40^\circ$ reikšmėms, optinė adata ant optinės ašies susiskaldo į keletą dalių, kurių ašinis intensyvumas yra gana sudėtingai kintantis. Darome išvadą, kad optinė adata išlieka tabili, kol $|\beta| < 5^\circ$.

Galiausiai buvo ištirtas poveikis, kurį sukėlė skersinis PBP elemento poslinkis arba skersinis pluošto poslinkis. Pluošto poslinkis paprastai suteikia nuolat didėjantį ašinio intensyvumo profilį. Tačiau kadangi antroji



1 pav. Scheminis geometrinio elemento pavaizdavimas. Be galo mažas žiedo formos plotas, kurio spindulys r ir plotis dr, pavaizduotas raudonai, o iš jo sklindantys spinduliai fokusuojasi atstumu z'. b) Grafikas, kuriame matomi krentančio TEM00 pluošto (mėlyna) ir norimo intensyvumo (raudona brūkšneliu) profiliai. c) Schematinis optinės adatos generavimo vaizdas.

situacija nėra įprasta, mes nagrinėjame tik PBP elemento poslinkio rezultatus, nes, mūsų nuomone, tai yra dažnesnis eksperimente stebimas nuokrypis. Šiuo atveju ašinis intensyvumo profilis tampa išgaubtas. Optinė adata yra nejautri poslinkiams $\Delta x/w0 < 0{,}125$.

Reikšminiai žodžiai: Optinė adata, nedifraguojantys pluoštai, Geometrinė fazė, Optinių elementų charakterizavimas.

Literatūra

[1] P. Gotovski, P. Šlevas, S. Orlov, O. Ulčinas, and A. Urbas, Opt. Express **29**, 33331-33345 (2021).

Ar egzistuoja Moore‘o dėsnis optiniam atsparumui?

Does the equivalent of Moore‘s Law exist for optical resistance?

Erikas Atkočaitis[1], Marco Jupé[2], Emilija Žutautaitė[1], Linas Smalakys[1], Kevin Kiedrowski[2], Morten Steinecke[2], Lars Herrero[2], Lars Jensen[2], Urtė Kimbaraitė[1,3], Mindaugas Ščiuka[3], Arūnas Varanavičius[1], Gaudenis Jansonas[1], Andrius Melninkaitis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinis tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius, Lietuva
[2]Laser Zentrum Hannover e.V., Hollerithallee 8 30419 Hannover, Vokietija
[3]UAB Lidaris, Šv. Stepono 27c-24, LT-01315 Vilnius, Lietuva
erikas.atkocaitis@ff.vu.lt

Lazerių optinių elementų atsparumas šviesai – sąlyginis terminas, matuojamas pažaidos lazerio spinduliuote slenksčiu (PLSS), kuris priklauso nuo daugybės veiksnių, susijusių su spinduliuotės savybėmis (pvz. bangos ilgiu, impulso trukme, ekspozicijos doze ir pan.) ir optiką sudarančių medžiagų bei aplinkos savybėmis. Kritinių lazerinių elementų PLSS daugeliu atvejų yra ribojantis maksimalią generuojamą lazerių galią veiksnys, todėl visais laikais kėlė didelį lazerininkų bendruomenės susidomėjimą. Vis dėl to, absoliuti dauguma lazerinių sistemų dėl savo netiesinės prigimties gerai veikia tik gana siaurame parametrų rinkinio ruože, todėl dauguma optinio atsparumo tyrimų atliekami fiksuotomis sąlygomis, kurios nebūtinai yra prasmingos kitiems apšvietos režimams. Pvz., PLSS įvertintas nuolatinės veikos lazeriu, mažai turės bendro su pavienių fs trukmės impulsų sukeltu PLSS. Taigi, iškyla poreikis apibendrintiems dėsningumams nustatyti, kurie leistų prognozuoti PLSS vertes drastiškai keičiant apžvietos sąlygas plačiame parametrų ruože. Deja, globalūs optinio atsparumo tyrimai, kurie apimtų eilę veiksnių ar būtų didelio masto yra itin retai sutinkami literatūroje: geriausiu atveju PLSS priklausomybė nuo parametrų būna nagrinėjama vos kelių eilių intervale. Pvz., dažniausiai literatūroje galima sutikti lazerinės pažaidos priklausomybės nuo impulso trukmės tyrimus. Jau yra žinoma, jog PLSS priklausomybė nuo impulso trukmės yra

$$PLSS \sim \tau^x, \quad (1)$$

kur $x \approx 0.5$, kai τ yra tarp 10 ps ir 100 ns, o trumpesnėms trukmėms x vertė krypsta link ≈ 0.3 [1, 2]. Nors šios priklausomybės gautos dielektrikams lazerinėje technologijoje dažnai yra naudojamos ir metalinės dangos. Tačiau, metalinės dangos ilgą laiką nebuvo tyrinėjamos šiuo aspektu, kadangi jų optinis slenkstis yra gerokai žemesnis nei dielektrinių dangų.

Taigi, šiuo darbu siekėme atlikti didelio masto 8 metalinių (auksas, sidabras, volframas, tantalas, titanas, cinkas ir chromas), dviejų puslaidininkinių (silicio ir germanio) veidrodinių dangų, bei kelių dielektrinių dangų tyrimą, keičiant impulso trukmės 10 fs – 10 s ruože. Dauguma tirtų dangų buvo nusodintos ant borosilikatinio stiklo pagrindukų, panaudojant RF magnetrono technologiją. Dielektrinės dangos buvo dengiamos ant LBO kristalų panaudojant jonapluoščio dulkinimo (IBS) technologiją. Pažaidos matavimai buvo atliekami daugiausiai ties 1030 nm ir 1064 nm bangos ilgiais išlaikant fiksuotą 150 µm efektyvųjį pluošto diametrą 1/e lygmenyje. Tyrime buvo atlikti „1 į 1“ ir „S į 1“ matavimai pagal tarptautinį ISO21254 standartą [3]. Gauti matavimų rezultatai yra lyginami su prognostiniais teoriniais modeliais (pvz. terminiu modeliu arba elektronų griūties modeliu). LBO kristalų optinis atsparumas buvo tiriamas skaidrinančioms dangomis femto-, piko- ir nanosekundžių trukmių ruože ties 1064 nm bei 355 nm bangos ilgiais su 35 µm pluošto diametru $1/e^2$ lygmenyje. Atlikus eksperimentus, buvo siekiama įvertinti PLSS priklausomybę nuo impulso trukmės kiekvienam bangos ilgiui, atsižvelgiant į skirtingas pažaidos modas (spalviniam pakitimui ir katastrofinei pažaidai). Palyginus „1 į 1“ bei „100000 į 1“ PLSS vertes LBO kristalams, buvo pastebėtas itin reikšmingas nuovargio efektas: didinant ekspozicijos dozę PLSS sumažėja daugiau nei 80% UV bangos ilgių srityje, o IR srityje PLSS sumažėja 40 – 60%. Iš gautų pažaidos matavimo rezultatų bei morfologijų buvo nustatytos empirinės PLSS priklausomybės nuo impulso trukmės; sudarytas empirinis modelis tiek metalinių-puslaidininkinių, tiek dielektrinių dangų atvejams.

Reikšminiai žodžiai: PLSS, trukmė, AR, HR, metalai, pažaida, dielektrikai

Projektas bendrai finansuotas iš Europos regioninės plėtros fondo lėšų (projekto Nr. 1.2.2-LMT-K-718-03-0004) pagal dotacijos sutartį Lietuvos mokslo taryba (LMTLT). Optinio atsparumo tyrimai nuolatinės veikos režime atlikti kartu su UAB LIDARIS (bendradarbiavimo sutartis BS-120000-1018, 2015-04-30).

Literatūra

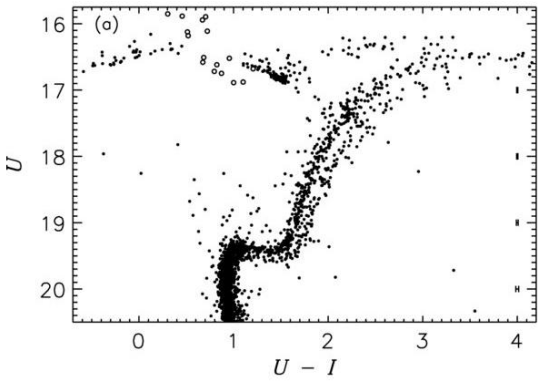
[1] B. C. Stuart, M. D. Feit, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, Laser-induced damage in dielectrics with nanosecond to subpicosecond pulses, Phys. Rev. Lett., **74**(12), 2248–2251, (1995), doi: 10.1103/PhysRevLett.74.2248.
[2] M. Mero, J. Liu, W. Rudolph, D. Ristau, and K. Starke, Scaling laws of femtosecond laser pulse induced breakdown in oxide films, Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., **71**(11), 1–7, (2005), doi: 10.1103/PhysRevB.71.115109
[3] ISO 21254-1:2011, International Standard International Standard, 2006, 13, (2011)

Kamuolinių žvaigždžių spiečių evoliucijos įvairovė

Diversity in the evolution of globular stellar clusters

Gražina Tautvaišienė[1], Arnas Drazdauskas[1], Markus Ambrosh[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT- 10257, Vilnius
grazina.tautvaisiene@tfai.vu.lt

Tradicinė samprata, kad kamuoliniuose žvaigždžių spiečiuose (KŽS) visos žvaigždės yra maždaug to paties amžiaus ir cheminės sudėties, jau tampa praeitimi. Per pastarąjį dešimtmetį buvo nustatyta, kad kamuoliniuose spiečiuose gali gimti antra žvaigždžių karta su padidintomis azoto, natrio bei sunkiųjų, lėtajame neutronų pagavimo procese gaminamų, cheminių elementų gausomis [1]. Tokiuose KŽS matosi dvi žvaigždžių milžinių evoliucijos sekos. Vėliau buvo atrasta spiečių, kuriuose evoliucijos sekos pradeda skirtis jau submilžinių stadijoje, t.y. žvaigždei vos tik pradėjus deginti vandenilį sferoje apie helio branduolį. 1 pav. pavaizduota tokio spiečiaus evoliucijos diagrama.



1 pav. Kamuolinio žvaigždžių spiečiaus NGC 1851 diagrama *U* ir *U–I* spalvų filtruose. Žvaigždžių evoliucijos sekos išsiskiria ties posūkiu iš pagrindinės sekos į submilžinių ir milžinių sekas (paimta iš [2]).

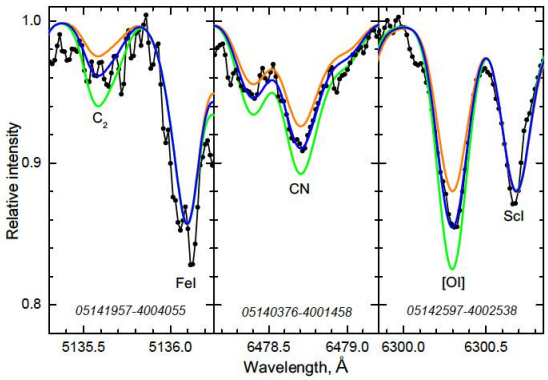
KŽS populiacijų formavimasis ir evoliucija galaktikose bei pačių spiečių kilmė yra tarp pagrindinių neišspręstų KŽS problemų.

Šio pranešimo tikslas – apžvelgti dabartinę KŽS tyrimų būklę ir pateikti naujus rezultatus apie kamuolinį NGC 1851 žvaigždžių spiečių, kuriame buvo aiškiai identifikuotos kelios žvaigždžių populiacijos submilžinių sekoje ir aptiktas metalingumų skirtumas.

Svarbią informaciją apie konkretaus spiečiaus susidarymo istoriją gali suteikti anglies, azoto ir deguonies gausų suma skirtingų populiacijų žvaigždėse. Submilžinių evoliucinės sekos išsiskyrimą gali lemti amžius ir/arba (C+N+O) gausos skirtumai.

Pagal didelės skiriamosios gebos spektrus, stebėtus panaudojant FLAMES-UVES spektrografą ir 8,2 m Europos pietinės observatorijos VLT teleskopą, buvo ištirtos 29 cheminių elementų gausos 45-iose spiečiaus NGC1851 žvaigždėse. 2 pav. vaizduoja spektrų tyrimo pavyzdį. Pagal metalingumą, azoto ir neutronų pagavimo reakcijose gaminamų elementų gausas tiriamos žvaigždės buvo suskirstytos į dvi populiacijas, o pagal vidutines (C+N+O) gausų reikšmes buvo nustatyta, kad metalingesnės žvaigždės yra maždaug 600 milijonų metų senesnės už mažiau metalingas pirmosios kartos žvaigždes. Tačiau būdamos senesnėmis, metalingesnės žvaigždės negali būti antrosios kartos žvaigždėmis ir NGC1851 matomai yra susiformavęs iš dviejų susiliejusių spiečių.

Atsižvelgus į kinematines NGC1851 charakteristikas ir palyginus detalią žvaigždžių cheminę sudėtį su Paukščių Tako ir su kaimyninių Magelano Debesų galaktikų cheminės sudėties modeliais [3, 4, 5] galima priimti išvadą, kad NGC 1851 galėjo susidaryti nykštukinėje sferinėje galaktikoje, kuri susiliejo su Paukščių Taku. Šis spiečius pagal kinematinius Gaia kosminio teleskopo duomenis gali būti neseniai identifikuotos [6] įkritusios Gaia-Enceladus galaktikos branduolys.



2 pav. Kamuolinio spiečiaus NGC 1851 žvaigždžių (juoda kreivė su taškais) ir sintetintų spektrų palyginimas ties C_2 ir CN molekulinėmis juostomis ir draustine deguonies linija (mėlyna kreivė su ±0,1 gausos pokyčius žyminčioms žalia ir raudona linijomis).

Reikšminiai žodžiai: kamuoliniai žvaigždžių spiečiai, cheminė žvaigždžių sudėtis, Paukščių Tako galaktika.

Literatūra

[1] N. Bastian, C. Lardo, Annu. Rev. Astron. Astrophys., **56**, 83 (2018).
[2] S-I. Han, Astrophysical Journal, **707**, L190 (2009).
[3] B.E.J. Pagel, G. Tautvaišienė, Mon. Not. R. Astron. Soc., **276**, 505, (1995).
[4] B.E.J. Pagel, G. Tautvaišienė, Mon. Not. R. Astron. Soc., **288**, 108, (1997).
[5] B.E.J. Pagel, G. Tautvaišienė, Mon. Not. R. Astron. Soc., **299**, 535, (1998).
[6] A. Helmi et al., Nature, **563**, 85 (2018).

Galaktikų aktyvumo istorijos atkūrimas pasitelkiant neuroninius tinklus

Recovering the activity history of galaxies using neural networks

Kastytis Zubovas[1,2], Jonas Bialopetravičius[2], Monika Kazlauskaitė[2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[2]Astronomijos observatorija, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
kastytis.zubovas@ftmc.lt

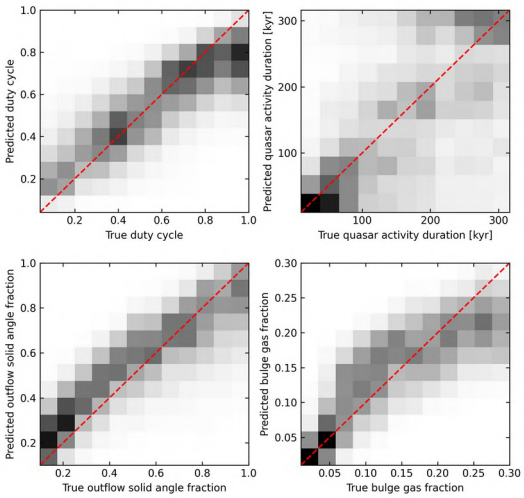
Supermasyvios juodosios skylės (SMBH) yra reikšmingi galaktikų evoliucijos komponentai. Jų aktyvumo epizodai, kurių metu SMBH aplinkoje išskiriamas šviesis nustelbia visos galaktikos žvaigždžių spinduliuotę, gali kardinaliai pakeisti dujų pasiskirstymą galaktikoje, paskatinti ar sustabdyti žvaigždėdarą. Pagrindinis poveikio galaktikai būdas yra dujų tėkmės, kurių greitis gali viršyti 1000 km/s, o masės pernašos sparta – 1000 M_{Sol}/m., kur M_{Sol} yra Saulės masė.

Geriausias modelis, paaiškinantis stebimų tėkmių savybes, yra energijos varomų tėkmių modelis [1]. Pagal jį, nuo SMBH supančio akrecinio disko pučiamas reliatyvistiniais greičiais judančių dujų srautas. Pasiekęs tarpžvaigždines dujas, srautas staigiai sulėtėja, įkaista ir ima stumti masyvų dujų burbulą. Net ir idealizuotos analitinės prognozės, gaunamos pritaikius šį modelį, gerai atitinka stebėjimų duomenis [2].

Gausėjant tėkmių stebėjimų duomenims, pastebima reikšminga jų sklaida aplink analitiškai prognozuojamas vertes [2,3]. Tą galima paaiškinti, į modelį įtraukus AGN šviesio kitimą aktyvumo epizodo metu bei tėkmės plitimą dėl inercijos, pasibaigus aktyvumo epizodui. Tėkmės savybės kinta per ~1 mln. m. dinaminę laiko skalę, tuo tarpu AGN epizodai trunka <0,1 mln. m. Taigi stebimą tėkmę beveik neabejotinai išpūtė keletas AGN epizodų. Jei šie epizodai buvo glaudžiai išsidėstę laike, matoma energinga tėkmė, tuo tarpu galaktikos, kuriose AGN švietė su ilgais pertrūkiais, turi silpnesnes tėkmes, net jei šiuo metu AGN šviesis yra didelis [4].

Mūsų tikslas yra išsiaiškinti, ar įmanoma stebimas tėkmių savybes panaudoti kaip įrankį atkurti galaktikos aktyvumo istoriją per pastaruosius ~1 mln. metų. Pasitelkėme idealizuotą skaitmeninį modelį, leidžiantį efektyviai apskaičiuoti sferiškai simetriškų tėkmių evoliuciją, žinant AGN šviesio priklausomybę nuo laiko. Sugeneravome 10^4 parametrų rinkinių, apimančių įvairias galaktikų bei SMBH mases, aktyvumo epizodų trukmes, atsikartojimo dažnumus, dujų kiekio galaktikoje bei tėkmės nesferiškumo vertes. Gautus išmatuojamus tėkmių parametrus – spindulį, greitį, masės pernašos spartą, taip pat AGN šviesį ir SMBH masę – panaudojome apmokyti neuroninį tinklą. Naudotas trijų sluoksnių neuroninis tinklas su 18,000 laisvų parametrų. Šie parametrai optimizuoti per 12 mokymo epochų naudojant Adam algoritmą.

Tinklą patikrinome naudodami dalį sugeneruotų duomenų, kurie nebuvo naudojami apmokymui. Galaktikos aktyvumo parametrų atkūrimo rezultatai pateikti 1 pav. Kaip matome, tinklas gerai atkuria aktyvumo epizodų atsikartojimo dažnumo (angl. *duty cycle*), dujų kiekio galaktikoje ir tėkmės nesferiškumo parametrus; vieno aktyvumo epizodo trukmė atkuriama kiek prasčiau.



1 pav. Neuroniniu tinklu atkuriamų galaktikos aktyvumo parametrų verčių (vertikali ašis) palyginimas su realiomis (horizontali ašis). Pirmoji diagrama – aktyvumo atsikartojimo dažnumas, antroji – vieno epizodo trukmė, trečioji – tėkmės nesferiškumas, ketvirtoji – dujų kiekis galaktikoje.

Šiuo metu tobuliname neuroninį tinklą, siekdami dar pagerinti parametrų atkūrimą. Tinklą ketiname pritaikyti kelių dešimčių realių tėkmių duomenims, taip atkursime šių galaktikų aktyvumo istorijos per pastaruosius ~1 mln. metų parametrus.

Tyrimai finansuojami LMT lėšomis, projekto nr. MIP-20-43.

Reikšminiai žodžiai: galaktikų evoliucija, juodosios skylės, aktyvios galaktikos.

Literatūra

[1] K. Zubovas ir A. King, Astrophys. J. **745**, 34 (2012).
[2] F. Fiore, C. Feruglio, F. Shankar ir kt., Astron. Astrophys. **601**, 143 (2017).
[3] A. Marasco, G. Cresci, E. Nardini, Astron. Astrophys. **644**, 15 (2020).
[4] K. Zubovas, E. Nardini, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **498**, 3633 (2020).

Neutronų pagavimo reakcijose sintetinamų elementų gausos Galaktikos evoliucijos kontekste

Abundances of neutron capture elements in revealing the evolution of the Galactic disc

Carlos Viscasillas Vázquez[1], Gražina Tautvaišienė[1], Šarūnas Mikolaitis[1], Edita Stonkutė[1], Renata Minkevičiūtė[1], Arnas Drazdauskas[1], Vilius Bagdonas[1]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio al. 10222 Vilnius, Lithuania
carlos.viscasillas@ff.vu.lt

A rich variety of chemical elements found in stellar spectra is a result of multiple chemical processes that occurred in specific conditions. The analysis of elemental abundances as well as their distribution in the Galactic components allows us to draw the Galactic chemical enrichment scenarios and trace back the cosmic events that shaped the present day Galaxy. Neutron capture elements, due to the specificity of their nucleosynthesis processes, as well as their astrophysical sites of origin, provide the privileged information on the chemical evolution of the Galaxy.

The aim of this talk is to present the high potential of neutron capture elements in the context of the structure and evolution of the Milky Way. Chemical abundances as a function of metallicity (Figure 1), and gradients as a function age, the mean galactocentric distance and maximum vertical height above the galactic midplane were investigated. A special attention was also paid to their application as cosmic clocks.

Observations were made at the Molėtai Astronomical Observatory (MAO) in several northern sky fields (CVZ-TESS, preliminary PLATO STEP02 and NPF fields) during a period between 2016 - 2019 using a 1.65 m Ritchey-Chretien telescope and a high resolution fiber-fed Vilnius University Echelle Spectrograph (VUES). High-resolution spectra were analysed for a sample of 506 FGK bright stars (V <8 mag) in the solar neighbourhood.

Abundances of 10 neutron capture elements (Sr, Y, Zr, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm and Eu) were determined through a differential line-by-line spectrum synthesis and accounting for the hyperfine structure effects. The referred elements cover *s*-processes, mixed and *r*-processes, which allows a broad study, given their different origin and timescales. Thanks to the Gaia space mission [1] and using the Gaia DR2 catalogue [2] and the *galpy* code [3], we determined a spatial distribution of stars with high accuracy. The stars were divided into thin and thick disc members according to chemical and kinematic criteria. The ages of our sample stars were estimated using the UniDAM code [4].

The age abundance gradients show that for the thin disc, the *s*-process dominated elements Sr, Y, and Ba have a strong negative abundance correlation with age. Our sample of thin-disc stars gives the noticeable [Y/Mg], [Sr/Mg], and [Y/Al] correlations with age. However, for the thick-disc stars, when taking into account also data from other studies, we found that e.g. [Y/Mg] cannot serve as an age indicator. We also found that the radial and vertical element-to-iron abundance ratio gradients in the thin disc are positive for the *r*-process dominated elements. In the thick disc, the radial element-to-iron abundance ratio slopes are negligible and the vertical ones are predominantly negative.

The complete results of the recent work [5] will be presented in this talk.

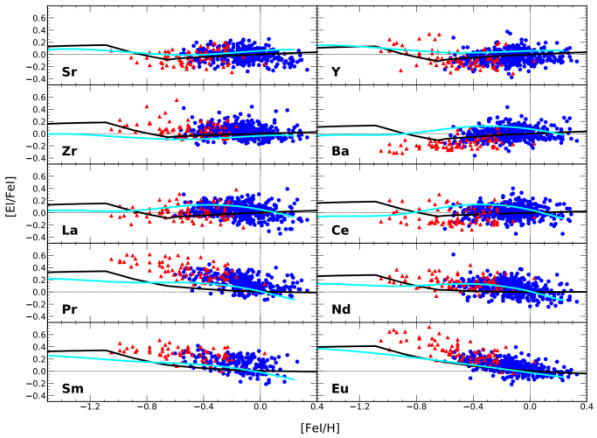


Figure 1. Abundance trends relative to [FeI/H]. The blue dots represent the thin-disc stars, and the red triangles indicate the thick-disc stars. The continuous cyan lines show the models by [6] and the black ones by [7]

Key words: Galaxy evolution, stellar chemical composition, Solar neighbourhood

References

[1] Gaia Collaboration, *Astronomy & Astrophysics*, **595**, A1 (2016b).
[2] Gaia Collaboration, *Astronomy & Astrophysics*, **616**, A1 (2018).
[3] Bovy, J., *Astrophysical Journal*, Supplement, **216**(2), 29 (2015).
[4] Mints, A. and Hekker, S., *Astronomy and Astrophysics* **604**, A108 (2017).
[5] Tautvaišienė et al., *Astronomy and Astrophysics* **649**, A126 (2021).
[6] Prantzos, N. et al., MNRAS, **476**, 3432 (2018).
[7] Pagel, B. E. J. & Tautvaisiene, G., MNRAS, **288**, 108 (1997).

Juodųjų skylių akrecijos ir grįžtamojo ryšio skaitmeninio modeliavimo tobulinimas

Improving black hole accretion and feedback in numerical simulations

Matas Tartėnas[1], Kastytis Zubovas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
matas.tartenas@gmail.com

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

Šiame darbe pristatomas sub-raiškinis akrecijos ir jos kuriamo grįžtamojo ryšio aprašymas. Kartu su SMBH sekamas standartinis plonas akrecinis diskas. Akretuojama medžiaga glotniai padalijama per diską sudarančius žiedus priklausomai nuo judesio kiekio momento bei dalelės skleidimo funkcijos. Toks akrecinio disko modelis leidžia atsikratyti laisvai parenkamo klampos laiko skalės parametro, naudojamo dirbtinai lėtinant akrecijos spartą ir leidžia detaliau sekti akrecinio disko parametrų kitimą laike ir kartu – jo kuriamą grįžtamąjį ryšį.

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

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

Gaunama pritaikius potencialą [2]:

$$\phi = \frac{-GM_\mathrm{BH}}{R_i - R_\mathrm{g}} \quad (2)$$

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

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

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

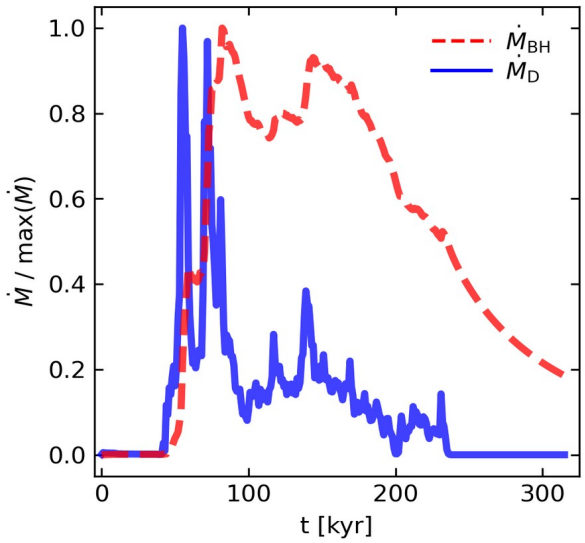
kur *D(Rᵢ)*, tai klampioji disipacija pavišiaus vienetui apskaičiuojama pagal:

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

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

Metodą testavome modeliuodami susidūrimą tarp dujų žiedo ir įkrentančiu dujų debesies į Paukščių Tako centrą panašioje aplinkoje pasitelkę Gadget-3 [4] hidrodinaminį kodą. Pradinė sistema sudaryta iš kelių dalių: 1) Centrinės SMBH (M_BH = 4x10^6 $M_\odot$); 2) Toro formos dujų žiedo ($M_ž$ = 10^5 $M_\odot$); 3) Dujų debesies (M_D = 10^5 $M_\odot$); 4) Foninių dujų (M_F = 2x10^3 $M_\odot$). Išorinis akrecinio disko kraštas nustatytas ties r_out = 0.01 pc.

Po susidūrimo pradinis toro formos žiedas išardomas; per ~200 tūkst. m. ~30% pradinės dujų masės prijungiama prie akrecinio disko. Subraiškinis akrecinis diskas maitinamas netolygiai, tačiau SMBH pasiekia daug tolygesnis dujų srautas, todėl maitinimas vyksta ilgesnį laiką. Per aktyvumo epizodą į aplinkinę ISM paskleidžiama ~10^{56} erg energijos – tai lemia karštų burbulų iškilimą statmenai naujai susiformavusio disko/žiedo plokštumai.



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

Reikšminiai žodžiai: akrecija, juodoji skylė, akrecinis diskas.

Literatūra

[1] J. E. Pringle, Ann. Rev. Astron. Astrophys. , **19**, 137–162, (1981).
[2] B. Paczynsky and P. J. Wiita, Astron. Astrophys., **500**, 203–211, (1980).
[3] N. I. Shakura and R. A. Sunyaev, Astron. Astrophys., **24**, 337–355, (1973).
[4] V. Springel, Mon. Not. R. Astron. Soc, **364**, 1105–1134, (2005).

Fotonų konversijos našumo didinimas sluoksniuose apjungiant medžiagų gryninimo bei gamybos iš lydalo metodą

Boost in solid-state photon upconversion efficiency through combined approach of melt-processing and purification

Karolis Kazlauskas[1], Steponas Raišys[1], Saulius Juršėnas[1]
[1]Vilnius University, Institute of Photonics and Nanotechnology, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius
karolis.kazlauskas@ff.vu.lt

Low-to-high photon energy conversion, also designated as photon upconversion (UC), can be achieved in smartly designed organic systems under low densities of non-coherent excitation (~mW/cm^2, e.g. irradiation by the sunlight),[1,2] which opens up a variety of fascinating applications such as targeted drug delivery, bioimaging, photocatalysis, labeling, stress sensing, solar energy harvesting, etc. The UC is accomplished via triplet-triplet annihilation (TTA) process in emitter (annihilator) species, where the energy of two triplets is combined to create one singlet excitation (Fig. 1). Since the direct triplet state absorption by an emitter is extremely low due to the spin-forbidden nature of the transition, TTA-UC is usually realized in bi-component systems consisting of a triplet sensitizer and an emitter. Upon absorption of incident light by the triplet sensitizer, its singlet excitation is converted into a triplet via intersystem crossing (ISC). Triplet excitons then undergo triplet energy transfer (TET) to the emitter, where triplets migrate until they encounter and annihilate. Triplet migration in solution/liquid or "soft" solids featuring low glass transition temperature is accomplished through molecular diffusion of emitter species, whereas in a true solid state with molecule position fixed it can only occur via exciton hopping mechanism [3].

In this report we address the long-standing issue of low TTA-UC efficiency in a solid state, even though order of magnitude higher efficiencies are routinely reported in a solution/liquid state. The issue is indeed topical and urgent as it hampers utilization of TTA-UC for practical applications.

Conversely to the previous, yet so far unsuccessful attempts, our combined approach enables to deliver record-high UC quantum yields (Φ_{UC} = 8±1%, out of maximum 50%) across a centimeter-sized area amorphous films of the widely-exploited benchmark TTA-UC system DPA/PtOEP. The boost in Φ_{UC} is almost 3-fold compared to previously reported maximal Φ_{UC} values of the analogous films based on the DPA-derived compounds.

The introduced combined approach relies on i) thorough emitter purification for reduced exciton quenching and ii) UC film fabrication via melt-processing for attaining large emitter concentrations with suppressed aggregation. Emitter purification via vacuum sublimation is shown to reduce the number of both singlet and triplet quenchers as confirmed by fluorescence and UC emission quantum yield measurements along with the respective transient measurements performed on nanosecond- and millisecond-time domains. Importantly, such high efficiency is accomplished in large-area amorphous films, the most preferred for practical applications, and featuring low UC threshold (=5 mW/cm^2) that is close to the solar irradiance.

The presented approach describes the guidelines for boosting TTA-UC performance in the solid state, and generally is applicable to any conventional TTA-UC system. This is believed to accelerate the development and applications of many solid-state TTA-UC systems created so far.

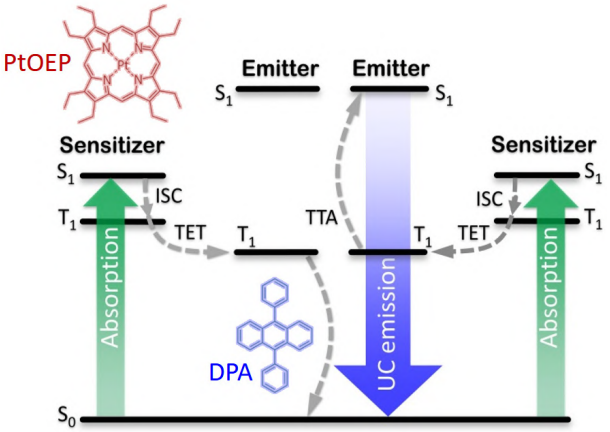


Fig. 1. TTA-UC energy scheme for the emitter/sensitizer model system DPA/PtOEP.

Keywords: photon upconversion, triplet-triplet annihilation, quantum yield, melt-processing.

References

[1] P.F. Meinardi, M. Ballabio, N. Yanai, N. Kimizuka, A. Bianchi, M. Mauri, R. Simonutti, A. Ronchi, M. Campione, A. Monguzzi, Nano Lett. **19**, 2169 (2019).
[2] T.F. Schulze, T.W. Schmidt, Energy Environ. Sci. **8**, 103 (2015).
[3] S. Raišys, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, Y. C. Simon, ACS Appl. Mater. Interfaces, **8**, 15732 (2016).

NIR fotonų konversija į matomą sritį: technologija leidžianti gauti našius rubreno sluoksnius

Technology to Produce Efficient NIR-to-Vis Photon Upconversion in Rubrene films

Edvinas Radiunas[1], Lukas Naimovičius[1], Steponas Raišys[1], Saulius Juršėnas[1], Edvinas Orentas[2], Karolis Kazlauskas[1]
[1]Vilnius University, Institute of Photonics and Nanotechnology, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilnius University, Department of Organic Chemistry, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius
edvinas.radiunas@ff.vu.lt

Increasing research interest in photon energy upconversion (UC) utilizing organic compounds that can induce triplet-triplet annihilation (TTA) is associated with promising applications in photocatalysis, bioimaging, night vision, memory devices, targeted drug delivery and many others.[1-2] TTA-UC is particularly attractive because of efficient operation under incoherent excitation and at low power densities (~ mW/cm^2) such as those provided by the sunlight. This implies novel opportunities in photovoltaics to harvest weakly absorbed near-infrared (NIR) photons via their conversion to visible light.[2]

Typical UC system consists of a triplet sensitizer and an emitter. The sensitizer is responsible for lower energy photon absorption, triplet generation and their transfer to the emitter. Meanwhile the emitter ensures generation of higher energy photon via TTA. Commonly exploited TTA emitters for NIR spectral range are tetracenes, rubrenes perylenes or diketopyrrolopyrroles. Most of these emitters are efficient in the solution/liquid phase, yet in the solid-state they become poorly emissive.The best-performing NIR-to-vis UC systems demonstrated so far, both in solution and solid-state, rely on rubrene (**Rub**) emitter.[3] However, in the solid-state emissive properties of **Rub** are heavily influenced by the film morphology.

In this work we introduce straightforward UC film fabrication technique based on thermal evaporation in an inert atmosphere. In this way obtained highly concentrated **Rub** films (see Fig 1) display one order of magnitude higher fluorescence quantum yield (Φ_{FL}) compared to the films produced by solution-processing or sophisticated thermal deposition in vacuum. Additionally, we show that in these films sensitizer and emitter are well dispersed and intermixed to result in efficient triplet energy transfer (Φ_{TET} > 60%). As a result, the UC films demonstrate record-high NIR-to-Vis UC efficiency (Φ_{UC}) of 1.2%. The attained Φ_{UC} is at least 2-fold higher compared to that of other bicomponent NIR-UC films reported in literature so far. Moreover, we evaluate **Rub** potential as TTA emitter by calculating the statistical probability (*f*) to obtain one singlet from two triplets via TTA. In this case, by determining efficiency of each energy transfer step, we evaluate *f* to be ~19.7 %. The value is found to be similar to the previously estimated one for **Rub** in a solution (15.5%)[4]. This indicates that *f* of the Rub is not significantly influenced by the environment and is a more intrinsic property.

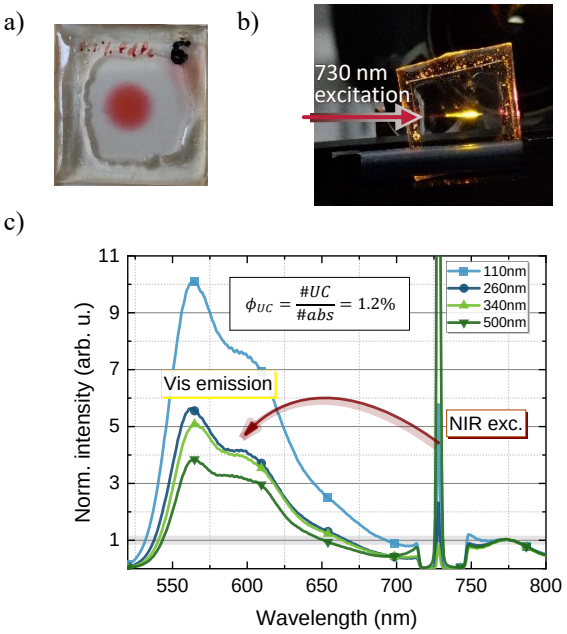


Fig 1. a – digital photo of thermally deposited UC film, b – UC film under NIR excitation, c – relative spectra of UC films with varying sensitizer thickness.

Key words: Rubrene, Triplet-triplet annihilation, TTA upconversion, NIR-vis UC.

Literature

[1]. J. Zhou, Q. Liu, W. Feng, Y. Sun and F. Li, Chem. Rev., **115**, 395–465, (2015).
[2]. B. S. Richards, D. Hudry, D. Busko, A. Turshatov and I. A. Howard, Chem. Rev., **121,** 9165-9195, (2021).
[3]. P. Bharmoria, H. Bildirir and K. Moth-Poulsen, Chem. Soc. Rev., **49**, 6529–6554, (2020).
[4]. E. Radiunas, S. Raišys, S. Juršėnas, A. Jozeliūnaitė, T. Javorskis, U. Šinkevičiūtė, E. Orentas and K. Kazlauskas, J. Mater. Chem. C, **8**, 5525–5534, 2020.

Ciano grupėmis modifikuotų rubrenų taikymas NIR fotonų konversijai į regimąją sritį

Cyano-functionalized rubrene derivatives for NIR-to-visible photon upconversion

Lukas Naimovičius[1], Edvinas Radiunas[1], Augustina Jozeliūnaitė[2], Edvinas Orentas[2], Karolis Kazlauskas[1]
[1]Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtėkio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Department of, Organic Chemistry, Vilnius University, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius
lukas.naimovicius@ff.vu.lt

NIR-to-visible photon upconversion (UC) via triplet triplet annihilation (TTA) is a rapidly advancing field of photonics with diverse potential applications. The most promising of them include photocatalysis, bio-imaging, photovoltaics, targeted drug delivery and night vision devices. [1-3] Typically, TTA-UC systems are composed of a sensitizer and an emitter. The sensitizer is responsible for absorption of low energy radiation and generation of triplet excitation via intersystem crossing, whereas the emitter accumulates those triplets and undergoes TTA leading to an upconverted emission of higher energy. The TTA-UC quantum yield (Φ_{UC}) is defined as follows:

$$\Phi_{UC} = \frac{1}{2} f \Phi_{ISC} \Phi_{TET} \Phi_{TTA} \Phi_{FL} \qquad (1)$$

where f – statistical probability to create one singlet from two triplets via TTA, Φ_{ISC} – intersystem crossing, Φ_{TET} – triplet energy transfer, Φ_{TTA} – triplet triplet annihilation, Φ_{FL} – fluorescence quantum yield.

Currently, the most widely used TTA emitter for NIR-to-visible UC is rubrene (9,10,11,12-tetraphenyltetracene). [1] Despite high fluorescence quantum yield (almost unity) in solution and proper energy level alignment suiting the TTA process (two triplets have enough energy to create one singlet), rubrene suffers from strong singlet fission (SF) in the solid-state limiting the Φ_{UC} to about 0.07%. [2] This restricts application of rubrene in the solid-state TTA-UC devices. To address this issue SF needs to be suppressed, which can be achieved via the modification of rubrene with cyano functional groups. The cyano side-moieties have been reported to lower the singlet energy level in tetracenes (thereby making SF less probable), thus indicating the similar possible effect on rubrene. [3]

In this work, four different cyano-substituted rubrene compounds (2CN-Rub, 4CN-Rub, 4CNtb-Rub, 6CN-Rub) were investigated as the emitters for NIR-to-visible UC (Fig. 1). Palladium-phthalocyanine (PdPc) served as a sensitizer in this study. DFT calculations performed prior to experiments confirmed the reduction of singlet state energy in cyano-rubrenes. Essentially, the rubrene derivatives exhibited high Φ_{FL} (70% - 94%) in the isolated form and a red shift of FL spectrum with increasing number of cyano groups. The latter was found to be in agreement with DFT calculations. Moreover, all the compounds exhibited significantly higher Φ_{FL} (6.4% - 19.1%) in the solid state compared to rubrene (1.5%) indicating suppressed SF.

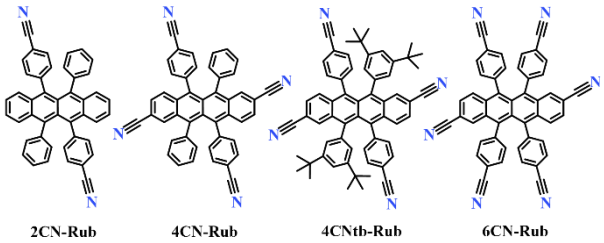


Fig. 1 Chemical structures of cyano-substituted rubrene compounds.

Preliminary data show that all the compounds except 6CN-Rub demonstrate the feasibility for TTA in a solution and solid-state. It was revealed that 6 CN groups reduce not only the singlet energy, but also the triplet energy to an extent unfavorable for TTA. The remaining compounds demonstrated efficient UC with Φ_{UC} of 2.6% (4CN-Rub), 2.4% (2CN-Rub) and 1.0% (4CNtb-Rub). (Fig. 2) The obtained efficient UC in solutions demonstrates the potential of these derivatives for TTA-UC application in the solid-state.

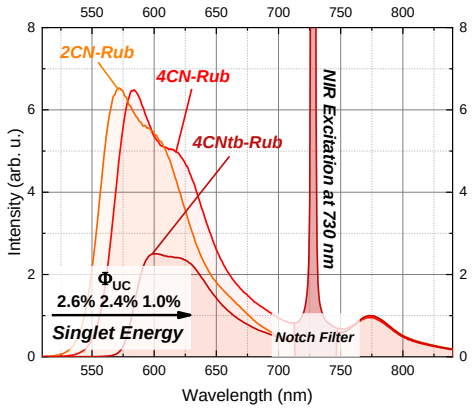


Fig. 2 NIR-to-visible UC spectra and Φ_{UC} of cyano-substituted rubrene compounds admixed with PdPc in solution.

Keywords: NIR-to-visible, upconversion, singlet fission, triplet fussion.

Literature

[1] M. Wu et al., Nat. Photonics, vol. 10, no. 1, pp. 31–34, (2016)
[2] Radiunas, E. et al., J. Mater. Chem. C 8, 5525–5534 (2020).
[3] Fallon, K. J. et al., J. Am. Chem. Soc. 142, 19917–19925 (2020).

Trečios kartos organinių šviestukų veikimo parametrų gerinimas įvedant smulkius emiterio struktūros pakeitimus

Substantial TADF OLED performance improvement by simple emitter structure modification

Dovydas Banevičius[1], Gediminas Kreiza[1], Domantas Berenis[1], Tomas Javorskis[2], Edvinas Orentas[2], Saulius Antanas Juršėnas[1], Karolis Kazlauskas[1]
[1]Vilnius University, Institute of Photonics and Nanotechnology, Saulėtekio ave. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilnius University, Department of Organic Chemistry, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius
dovydas.banevicius@ff.vu.lt

Thermally activated delayed fluorescence (TADF) compounds have received great attention for their potential to utilize both singlet and triplet excitons in OLEDs formed during charge carrier injection. [1] Rational material design has enabled TADF OLED devices with up to 100% internal quantum efficiencies mainly due to an efficient reverse intersystem crossing (RISC) that allows conversion of dark triplet excitons into emissive singlet ones. [2] While RISC is usually a slow process, TADF-OLEDs suffer from early efficiency roll-off associated with high long-lived triplet exciton population. To circumvent this issue, TADF emitters with large rISC rate facilitating triplet up-conversion are required. [3]

In this work, by introducing a subtle modification to two carbazolyls containing isophthalonitrile-based TADF emitter, we demonstrate a huge impact on its TADF properties. Explicitly, the increased dihedral angle between D and A units is found to significantly reduce ΔE_{ST}, resulting in substantial boost of RISC rate and shortening of TADF lifetime. We fabricated vacuum and solution processed TADF-OLEDs employing 7 wt% isophthalonitrile-doped emissive layer. Devices exhibited blue/sky-blue emission with external quantum efficiency (EQE) of up to 23.8% and high brightness (up to 95000 cd/m^2). Most importantly, due to the large rISC rates, TADF OLEDs demonstrated extremely low efficiency roll-off. OLEDs based on modified compound (**DMeCzIPN**) exhibited 2-fold performance improvement in terms of EQE. Figure 1 shows chemical structures of unmodified **DCzIPN** and modified **DMeCzIPN** compounds, whereas Figure 2 shows the EQE characteristics of the fabricated devices together with their electroluminescence (EL) spectra.

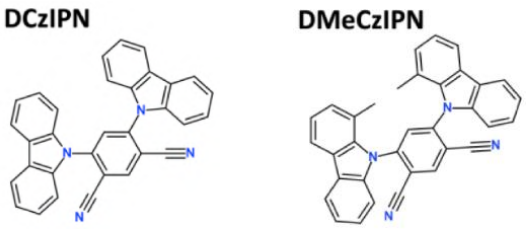


Fig. 1. Chemical structures of the isophthalonitrile-based TADF compounds

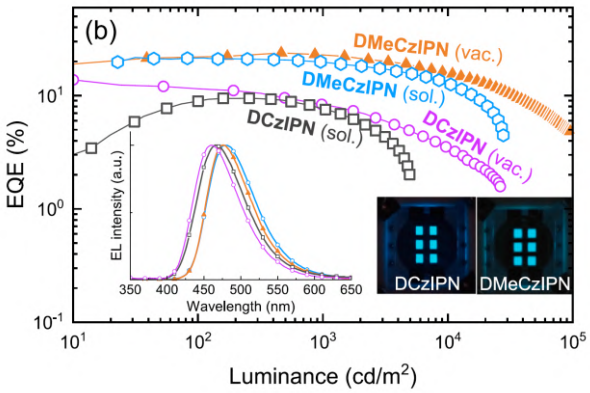


Fig. 2. EQE characteristics of the TADF-OLEDs fabricated employing isophthalonitrile-based emitters. Inset displays EL spectra along with the pictures of these devices

We were also able to fabricate stability and lifetime optimized OLED devices employing these isophthalonitrile-based emitters. Devices exhibited LT_{90} of 2 hours at high brightness of 1000 cd/m^2 which extrapolates to LT_{50} of around 200 hours at the practical brightness of 100 cd/m^2.

The obtained results demonstrate the potential of isophthalonitrile-based TADF emitters for high-brightness OLED applications.

Keywords: OLED, TADF, organiniai šviestukai, organic light-emitting diodes.

References

[1] Yang, Z. Mao, Z. Xie, Y. Zhang, S. Liu, J. Zhao, J. Xu, Z. Chi, M.P. Aldred, Recent advances in organic thermally activated delayed fluorescence materials, Chem. Soc. Rev. **46**, 915-1016 (2017).
[2] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, and C. Adachi, Highly efficient organic light-emitting diodes from delayed fluorescence, Nature **492**, 234 (2012).
[3] M. K. Etherington, J. Gibson, H. F. Higginbotham, et al., Revealing the spin–vibronic coupling mechanism of thermally activated delayed fluorescence, Nat. Commun. **7**, 13680 (2016).

Konformacinės netvarkos sąlygoti emisijos reiškiniai kietuosiuose TADF junginių sluoksniuose

Conformational disorder enabled emission phenomena in TADF compound films

Tomas Serevičius[1], Rokas Skaisgiris[1], Dalius Gudeika[2], Karolis Kazlauskas[1], Saulius Juršėnas[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
[2]Kauno technologijos unversitetas, Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Radvilėnų pl. 19, LT-50254, Kauns
tomas.serevicius@tmi.vu.lt

Thermally activated delayed fluorescence compounds offers an elegant way to retrieve triplet excited states without involving any expensive heavy atoms, following simple chemical synthesis and providing sufficient chemical stability [1]. OLED devices with TADF emitters provides excellent external quantum efficiency, exceeding 30%, pronounced lifetime and wide selection of emission color [2,3]. Recovery of triplet states in TADF compounds is enabled by minimizing singlet-triplet energy gap (ΔE_{ST}) towards the values comparable to thermal energy at room temperature. The most common design approach for lowering ΔEST is based on the separation of molecular frontier orbitals in HOMO and LUMO. This is usually achieved by constructing TADF compounds from electron-donating (D) and electron-accepting (A) units, loosely bound with nearly perpendicular orientation. Specific molecular structure of TADF compounds, when D and A units are loosely bound, makes its emission properties dependent on the D-A twisting angle. In rigid solid-surrounding, TADF compounds froms conformers with different D-A twisting angles, theredire different S_1 energies and ΔE_{ST} values. Such conformational disorder results in the undesirable effects, such as prolongation of TADF lifetime or emission energy instability [4,5].

Moreower, TADF compounds doped in solid hosts are prone to undergo solvation effects, similar to those as in solution state. Emission peak shifts and changes in emission decay rates usually follows the solid-state solvation (SSS). However, here we show that typical SSS behavior in heavily doped TADF films of **5tCzMeB** (see Fig. 1) could be of completely different origin, mistakenly attributed to SSS.

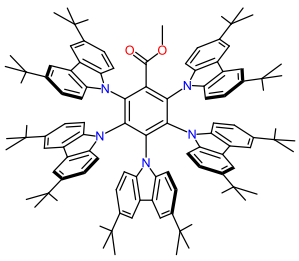


Fig. Molecular structure of **5tCzMeB**.

Typically, increasing doping load was found to redshift the emission peak wavelength and enhance rISC rate. However, the more in-depth analysis revealed that SSS actually is negligible and both phenomena are caused by the specific behavior of delayed emission. Increasing concentration of TADF compound was shown to enhance the concentration quenching of long-lived delayed fluorescence from conformer states with the largest singlet energy, eventually leading to gradual redshift of delayed emission peak wavelength (see Fig. 2). Concomitantly, the loss of long-lived delayed fluorescence entailed reverse intersystem crossing rate enhancement, though the rate-governing ^{3}CT-^{3}LE energy gap was gradually increasing. The observed phenomena are highly unwanted, burdening molecular structure and OLED performance optimization.

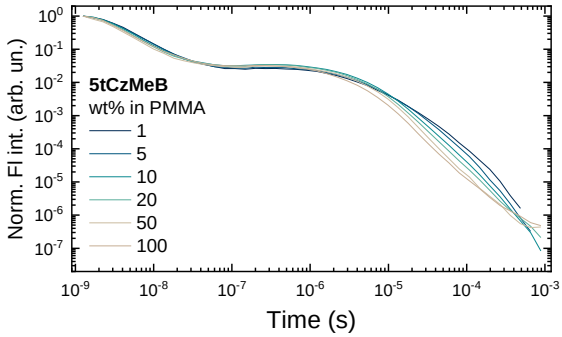


Fig. 2 Fluorescence decay transient of TADF compound **5tCzMeB** at different doping load in PMMA.

Keywords: TADF, disorder, triplet, diffusion, exciton.

References

[1] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura and C. Adachi, *Nature*, **492**, 234 (2012).
[2] L.-S. Cui, A. J. Gillett, S.-F. Zhang, H. Ye, Y. Liu, X.-K. Chen, Z.-S. Lin, E. W. Evans, W. K. Myers, T. K. Ronson, H. Nakanotani, S. Reineke, J.-L. Bredas, C. Adachi and R. H. Friend, *Nat. Photonics*, **14**, 636 (2020).
[3] T.-L. Wu, M.-J. Huang, C.-C. Lin, P.-Y. Huang, T.-Y. Chou, R.-W. Chen-Cheng, H.-W. Lin, R.-S. Liu and C.-H. Cheng, *Nat. Photonics*, **12**, 235 (2018).
[4] T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, K. Kazlauskas, S. Jursenas and S. Tumkevicius, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 265 (2020).
[5] T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, L. Jagintavičius, J. Bucevičius, K. Kazlauskas, S. Jursenas and S. Tumkevicius, *Chem. Commun.*, **55**, 1975 (2019).

Spiralinės orbitalės ir sukinio-orbitos sąveika paprastose angliavandenilio molekulėse

Helical molecular orbitals to induce spin-orbit coupling in simple hydrocarbon molecules

Paulius Baronas,[1] Regimantas Komskis,[1] Eglė Tankelevičiūtė,[1] Povilas Adomėnas,[2] Ona Adomėnienė[2], S. Juršėnas[1]
[1]Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Fine Synthesis, Ltd., Kalvarijų g. 201E, LT-08311, Vilnius, Lithuania
paulius.baronas@ff.vu.lt

Spin-orbit coupling (SOC) is a relativistic interaction between the spin and orbital motion of an electron that unlocks transitions between singlet and triplet states. [1] Strong SOC is a desirable property in organic molecules as it mediates intersystem crossing (ISC) in photosensitizers for phtotodynamic therapy and reverse ISC in emitters for organic light emitting devices (OLED). Generally, spin-flip probability depends on the magnitude of magnetic moment arising from electron's orbital motion in the electric field of a nucleus, thus SOC is proportional to Z^4, where Z is an atomic number. However, significant SOC can be achieved in molecules composed of light elements when spin-flip is induced by large enough orbital momentum created by mixing of orthogonal molecular orbitals (MOs).

Recently, SOC was suggested to appear in chiral hydrocarbon systems due to electron's motion in helical potential. Geometric SOC due to helical potential was identified in chiral structures such as DNA. While SOC interactions were only explored in chiral molecular structures, helical potential also appears on a smaller scale as helical molecular orbitals (hel-MOs) in linear carbon chains (oligoynes). The formation of helical π-system is enabled by overlap of orthogonal p orbitals in sp hybridized carbons where nodal plane rotates around the axis of chain (unlike sp2 carbons that form a planar nodal plane). The importance of evaluating spin-orbit coupling in carbon wires is significant due to recent advances in chemistry of oligoynes.

In this work, we use a combination of ultrafast spectroscopy and quantum chemical calculations to relate enhanced ISC rate to hel-MOs in oligoyne-bridged bifluorene derivative (Figure 1). We demonstrate that simple modification of the bifluorene bridge unit from alkyne to diyne, leads to emergence of distinct helical orbitals together with activation of strong ISC pathway. Transient absorption studies showed singlet-to-triplet ISC rate of up to 6 ns^{-1} resulting in 0.84 triplet yield. Density functional theory (DFT) computations suggested strong SOC between singlet and triplet states of ππ* character, which expands the use of El-Sayed rules and interpretation of spin-orbit coupling in simple hydrocarbons. These findings suggest that oligoyne bridge units could be implemented in the design of new organic photosensitizers or emitters aiming to achieve substantial spin-orbit coupling. [2]

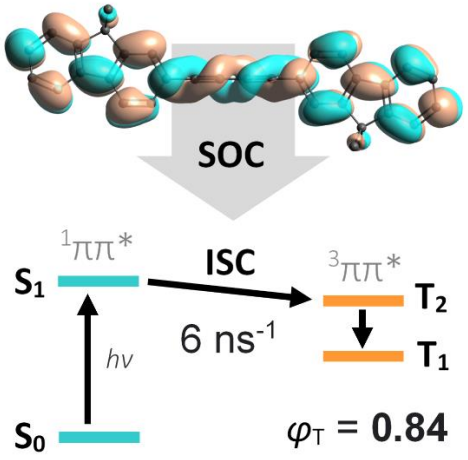


Fig. 1. Molecular orbitals of oligoyne bridged bifluorene and the corresponding energy level diagram.

Literatūra

[1] D. Sasikumar, A. T. John, J. Sunny, M. Hariharan, Access to the Triplet Excited States of Organic Chromophores. Chem. Soc. Rev. , **49**, 6122 (2020)

[2] P. Baronas, R. Komskis, E. Tankelevičiutė, P. Adomėnas, O. Adomėnienė, and S. Juršėnas, J. Phys. Chem. Lett. **12**, 6827 (2021).

Partonų sklaidos atradimas lengvųjų jonų susidūrimuose

Discovering Partonic Rescattering in Light Nucleus Collisions

Alexander Huss[1], Aleksi Kurkela[1,2], Aleksas Mazeliauskas[1], Risto Paatelainen[1], Wilke van der Schee[1], Urs Achim Wiedemann[1]

[1]Theoretical Physics Department, CERN, CH-1211 Genève 23, Switzerland

[2]Faculty of Science and Technology, University of Stavanger, 4036 Stavanger, Norway

aleksas.mazeliauskas@cern.ch

Experiments with ultrarelativistic collisions of heavy ions (AA), e.g., gold (AuAu) or lead (PbPb), at CERN Large Hadron Collider (LHC) and BNL Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) have provided ample evidence for the creation of a new state of matter—the quark-gluon plasma (QGP). The QGP is a high-temperature and density state of matter in which the fundamental partonic degrees of freedom, i.e., quarks and gluons, are manifest. Theoretical interpretation of experimental results leads to a picture of a sub-atomic size ($\sim 10^{-14}$ m) droplet of dense and strongly interacting matter, which can be successfully described by macroscopic theory of fluid dynamics.

One of important experimental signatures of QGP is the suppressed production of high-momentum hadrons (h) and jets (j), which is a result of partonic rescattering of high-momentum quarks or gluons in the QGP. The suppression is quantified by the nuclear modification factor $R_{\rm AA}^{j,h}$, with $R_{\rm AA} < 1$ indicating suppression. Much of the recent experimental effort at the LHC has gone into characterizing emergent QGP properties as a function of the size of the collision system. Peripheral AA collisions involve a smaller number of nucleons $N_{\rm part}$ and are labelled by the larger centrality percentage in Fig. 1 (top). In most peripheral AA collisions and proton-nucleus (pPb) collisions with $N_{\rm part} \sim O(10)$ the partonic rescattering is not conclusively established as shown in Fig. 1 (bottom).

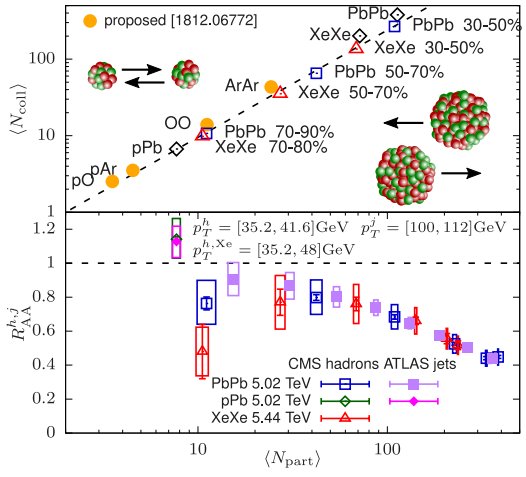


Fig. 1 (top) The number of binary nucleon-nucleon collisions as a function of participating number of nucleons in minimum bias nucleus-nucleus, proton-nucleus and centrality selected heavy-ion collisions. (bottom) Measured hadron and jet suppression relatively to pp. Fig. from [1].

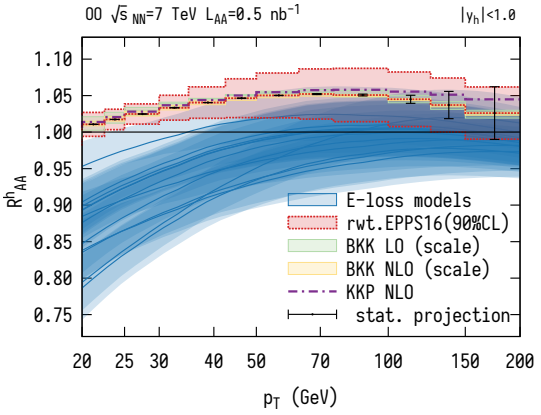


Fig. 2 Hadron spectra modification in oxygen-oxygen collisions relatively to pp with (blue) and without (red) parton rescattering in the medium. Fig. from [1]

In our Letter [1] we demonstrated that the proposed oxygen-oxygen collisions at the LHC will provide unprecedented sensitivity to parton energy loss in a system whose size is comparable to those created in very peripheral heavy-ion collisions. We performed next-to-leading order calculations in perturbative QCD and showed that $R_{\rm AA}$ baseline in the absence of partonic rescattering is known with up to 2% theoretical accuracy in inclusive oxygen-oxygen collisions (see Fig. 2). We further studied a broad range of parton energy loss models [2] and we found that the expected signal of partonic rescattering can be disentangled from the baseline by measuring charged hadron spectra in the range 20 GeV $< p_T <$ 100 GeV as shown in Fig. 2. Therefore the special run of oxygen-oxygen collisions at the LHC run 3 has high chance of discovering partonic rescattering in such small collision systems.

Reikšminiai žodžiai: LHC, sunkieji jonai, kvarkų–gluonų plazma, QCD

Literatūra

[1] A. Huss, A. Kurkela, A. Mazeliauskas, R. Paatelainen, W. van der Schee and U. A. Wiedemann, Phys. Rev. Lett. **126** (2021) no.19, 192301 doi:10.1103/PhysRevLett.126.192301 [arXiv:2007.13754 [hep-ph]].

[2] A. Huss, A. Kurkela, A. Mazeliauskas, R. Paatelainen, W. van der Schee and U. A. Wiedemann, Phys. Rev. C **103** (2021) no.5, 054903 doi:10.1103/PhysRevC.103.054903 [arXiv:2007.13758 [hep-ph]].

Lengvas svertinis neutrinas Grimus-Neufeld modelyje

Light seesaw neutrino in the Grimus-Neufeld model

Vytautas Dūdėnas, Thomas Gajdosik
Vilniaus Universitetas, fizikos fakultetas, teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius.

Standartinis modelis iki šiol yra sėkmingiausias didelių energijų dalelių fizikos modelis, beprecedentiškai tiksliai aprašantis daug experimentinių rezultatų, bei viską talpinantis į elegantišką kalibruotinių laukų simetrijų formalizmą. Nepaisant šios istorinės sėkmės, nėra abejančių, kad standartinis modelis nėra išbaigtas ir naujos dalelės ar sąveikos yra, nors ir nėra aišku kokios jos ar kokie yra jų parametrai. Šis plačiai paplitęs įsitikinimas yra paremtas solidžiu skaičiumi eksperimentinių duomenų, kurių standartinis modelis negali paaiškinti. Vienas iš tokių "fizikos už standartinio modelio" įrodymų yra neutrinų osciliacijos [1]: neutrinai keičia savo aromatą, kas taip pat reiškia, kad neutrinai nėra bemasiai. Tai negali būti įgyvendinta standartinio modelio ribose, vadinasi, viena ar daugiau dalelių, įgalinančių šias osciliacijas bei jų mases, yra vis dar neatrastos, bet egzistuoja gamtoje. Deja nėra pakankamai duomenų, galinčių tiksliai pasakyti kas yra atsakingas už neutrinų mases, taigi daug modelių, praplečiančių standartinį modelį su įvairiais tokiais mechanizmais, yra galimi. Vienas iš tokių galimų modelių yra Grimus-Neufeld modelis.

Grimus-Neufeld modelis [2] praplėčia standartinį modelį vienu svertiniu neutrinu (dar vadinamu steriliu, nes jis beveik nesąveikauja su jokiais kalibruotiniais laukais) bei vienu papildomu Higgs'o dubletu. Sterilus neutrinas sukelia sverto mechanizmą [3], kuris suteikia vienam iš lengvųjų neutrinų masę. Dėl neutrinų sąveikų su antruoju Higgs'o dubletu, įgalinama dar viena nenulinės masės neutrino tikrinė būsena per radiacines pataisas. Tokiu būdu galima paaiškinti visus neutrino sektoriaus eksperimentinius duomenis: maišymosi kampus bei du masių kvadratų skirtumus, vadinamus atmosferine bei soliarine masėmis. Nepostuluojant jokių papildomų simetrijų, apribojančių parametrų erdvę, šis modelis yra pakankamai apibendrintas, tačiau taip pat ir "minimalus" postuluojamų dalelių kiekių prasme. Mažas postuluotų dalelių skaičius leidžia apskaičiuoti beveik visas sąveikos konstantas tarp neutrinų ir Higgs'o dalelių vien tik iš neutrinų maišymosi kampų bei masių kvadratų skirtumų.

Vienas iš pagrindinių Grimus-Neufeld modelio sudedamųjų dalių, sverto mechanizmas, istoriškai buvo motyvuojamas „natūralumu“ t. y. kaip būdas vienu metu turėti labai mažą lengvojo neutrino masę, kai Yukawa sąveikos nariai yra maždaug vieneto eilės. Tam, kad ši sąlyga būtų tenkinama, sterilaus neutrino masė turėtų būti maždaug 10^{15} GeV eilės. Dėl šios priežasties sverto mechanizmas ir įgavo savo pavadinimą: sunkiojo neutrino masė yra atvirkščiai proporcinga lengvojo neutrino masei, taigi tarsi su svertu „atsveria“ neutrinus ir paaiškina kodėl lengvieji neutrinai turi daugybe eilių mažesnes mases negu visos kitos dalelės. Nepaisant šios, iš pirmo žvilgsnio elegantiškos idėjos, modeliai su sverto mechanizmu nėra natūralūs skaliariniame sektoriuje: pasirodo, kad Higgs'o masės kvantinės pataisos tampa didesnės už pačią Higgs'o masę, kai sterilaus neutrino masė viršija 10^7 GeV [4].

Nors sverto mechanizmas istoriškai buvo pristatytas ypatingai sunkių sterilių neutrinų kontekste, nėra eksperimentinių duomenų uždraudžiančių sverto mechanizmą su maža sterilaus neutrino mase. Iš tiesų, sterilūs neutrinai gali egzistuoti netgi su O(keV) mase ir tokių neutrinų efekto mes vis tiek nepastebėtume šiuolaikiniuose neutrinų eksperimentuose. Žinoma, Yukawa sąveikos konstantos su standartinio modelio Higgs'o dalele tampa tarsi nenatūraliai mažos, bet šis argumentas gali būti apverstas aukštyn kojomis, nes jeigu šios sąveikos tampa nulinės, Lagranžianas turi daugiau simetrijų, kas yra natūralu pagal t' Hooft'o kriterijų. Atsižvelgian į šiuos argumentus, tampa vis populiariau nagrinėti ir, tam tikra prasme pražiūrėtą, sąlyginai lengvo svertinio neutrino galimybę.

Mes tikriname, ar yra įmanoma patenkinti visus neutrino eksperimentinius duomenis Grimus-Neufeld modelyje, turint mažą sterilaus neutrino masę. Priėmę prielaidą, kad sterilus neutrinas yra mažesnės masės negu elektrosilpnoji skalė, aproksimuojame neutrinų masių išraiškas ir išreiškiame supaprastintą analitinį saryšį tarp Yukawa sąveikos konstantų ir skaliarinio sektoriaus šiame artinyje. Iš to parodome, kad skaliarinis Grimus-Neufeld modelio sektorius yra praktiškai neapribotas iš eksperimentinių neutrinų duomenų, nepaisant kelių ekstremalių atvejų.

Reikšminiai žodžiai: Sverto mechanizmas, neutrinai, radiacinė masė, Higgs'o dalelės

Literatūra

[1] C. Athanassopoulos et al. Phys. Rev. Lett. 81, 1774–1777, 1998.; Y. Fukuda et al. Phys. Rev. Lett. 81, 1562–1567, 1998.; Q. R. AhmadkeV et al. Phys. Rev. Lett. 89, 011301, 2002.
[2] W. Grimus and H. Neufeld. Nucl. Phys. B 325, 18–32, 1989.
[3] P. Minkowski. Phys. Lett. B 67, 421–428, 1977.
[4] F. Vissani, Phys. Rev. D 57, 7027 (1998), arXiv:hep-ph/9709409 .

Apie Fermionų Masių, Laukų ir Maišymosi Matricų Pernormavimą ant Masės Apvalko ties 1-kilpa

On the On-Shell Renormalization of Fermion Masses, Fields, and Mixing Matrices at 1-loop

Simonas Draukšas[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Teorinės Fizikos ir Astronomijos Institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
simonas.drauksas@ff.stud.vu.lt

Dalelių fizikos modeliuose be dalelių maišymosi pernormavimas yra gerai suprastas ir pristatomas jau kvantinio lauko teorijos vadovėliuose. Kita vertus, modeliuose, kuriuose yra dalelių maišymasis (pavyzdžiui, Standartiniame Modelyje), pernormavimo procesas nebėra akivaizdus, kadangi reikia rasti tinkamas pernormavimo sąlygas nebediagonaliems parametrams, nėra aišku, kaip pernormuoti atsiradusias maišymosi matricas. Taip pat viską apsunkina priklausomybė nuo kalibruotės, kuri, netinkamai pernormavus modelį, gali pasirodyti ir fizikiniuose stebimuosiuose [1]. Papildomai, dažnai naudojamos fermionų propagatorių ant masės apvalko nesimaišymo sąlygos nėra suderinamos su Lagranžiano ermitiškumu dėl nestabilių dalelių pernormavimo konstantose atsirandančių absorbtyvių dalių [2]. Šiuo metu literatūroje sutinkamos pernormavimo schemos neišsprendžia visų paminėtų problemų vienu metu, pavyzdžiui, fizikiniai parametrai nuo kalibruotės nepriklauso, bet propagatorius lieka nediagonalus [3]; propagatorius diagonalus, tačiau atsiranda bėdų dėl Lagranžiano ermitiškumo ir nėra akivaizdus maišymosi matricos pernormavimas [2].

Pranešime bus pristatyta nauja pernormavimo schema [4], kuri išsprendžia ar išvengia didelės dalies aukščiau paminėtų problemų. Naujoje schemoje apibrėžiami nediagonalūs masės atsvaros nariai bei nediagonalios lauko atsvaros narių anti-ermitinės dalys, kai tuo tarpu diagonalūs atsvaros nariai bei lauko atsvaros narių ermitinės dalys išlieka nepakitusios lyginant su įprastu pernormavimu ant masės apvalko. Verta pastebėti, jog atsvaros nariai apibrėžiami nesinaudojant jokio konkretaus modelio ypatybėmis, bet remiantis Dirako struktūra ir iš jos kylančiomis masių struktūromis. Lauko atsvaros narių anti-ermitinės dalys apibrėžiamos atitinkamose išraiškose paėmus masių kvadratų skirtumų koeficientus. Naudojantis Nielsen tapatybėmis parodoma, jog ties 1-kilpa šie koeficientai talpina visą priklausomybę nuo kalibruotės, o remiantis Passarino-Veltman funkcijomis randama, jog šie koeficientai yra UV-baigtiniai. Apibrėžus lauko atsvaros narius, nesunkiai randami ir nediagonalūs masės atsvaros nariai, kurie nepriklauso nuo kalibruotės ir talpina atitinkamas UV divergencijas (begalybes). Didelis šios schemos patogumas yra tas, jog atsvaros nariai išreiškiami fermionų savi-energijos skaliarinėmis funkcijomis.

Turint masės bei lauko atsvaros narių apibrėžimus taip pat galima aptarti ir maišymosi matricų pernormavimą ties 1-kilpa. Kaip pavyzdį naudosime kvarkų maišymosi matricą Standartiniame Modelyje. Kvarkų maišymosi matricos atsvaros narį įprasta apibrėžti per anti-ermitinę lauko pernormavimo dalį, kad būtų užtikrintas *Wud* sąveikos UV-bagtinumas, tačiau atsiranda fizikinių dydžių priklausomybė nuo kalibruotės. Mūsų schemoje nėra reikalinga pernormuoti kvarkų maišymosi matricos, kadangi anti-ermitinė lauko pernormavimo dalis bei Standartinio Modelio *Wud* sąveikos viršūnė yra UV-baigtiniai. *Wud* sąveikos viršūnės kalibruotės savybės taip pat nėra pakeičiamos, kadangi nėra maišymosi matricos atsvaros nario.

Reikšminiai žodžiai: pernormavimas, fermionai, maišymosi matrica, kalibruotė, masės apvalkas

Literatūra

[1] P. Gambino, P. Grassi, F. Madricardo, *Fermion Mixing Renormalization and Gauge Invariance,* Phys. Lett. B **454** (1998)
[2] D. Espriu, J. Manzano, P. Talavera, *Flavour Mixing, Gauge Invariance and Wave-function Renormalisation,* Phys. Rev. D **66** (2002)
[3] B. Kniehl, A. Sirlin, *Simple On-Shell Renormalization Framework for the Cabibbo-Kobayashi-Maskawa Matrix,* Phys. Rev. D **74** (2006)
[4] S. Draukšas, *On the On-Shell Renormalization of Fermion Masses, Fields, and Mixing Matrices at 1-loop,* arXiv:2107.09361

Foninių procesų su netikrais leptonais įvertinimas Drell-Yan proceso diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavime

Fake lepton background estimation for the differential cross section measurement of the Drell-Yan process

Marijus Ambrozas, Andrius Juodagalvis
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
marijus.ambrozas@gmail.com

CERN Didysis hadronų greitintuvas – didžiausias ir galingiausias dalelių greitintuvas pasaulyje, kuriame protonų susidūrimo energija siekia net 13 TeV. Tokių smarkių protonų susidūrimų metu sukuriama gausybė naujų dalelių, atskleidžiančių svarbios informacijos apie fundamentaliausius Visatos procesus. Standartinis modelis, dažnai vadinamas sėkmingiausia iki šiol sukurta teorija, negali numatyti protono ir kitų hadronų sandaros iš pirminių principų, todėl teoretikai ją aprašo pasinaudodami partonų pasiskirstymo funkcijomis, kurios nustatomos iš eksperimentinių duomenų.

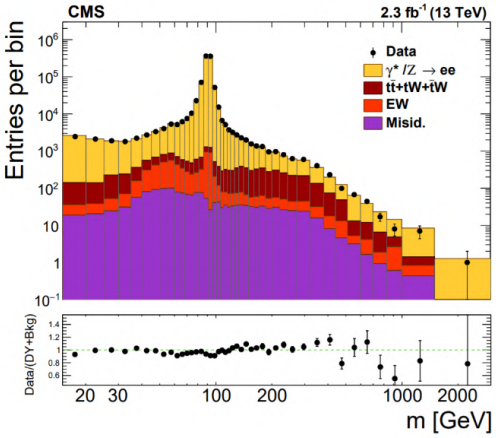
Standartinio modelio teisingumui patikrinti bei partonų pasiskirstymo funkcijų tikslumui didinti dalelių fizikai atlieka gerai žinomų procesų didelio tikslumo matavimus. Vienas iš tokių procesų yra Drell-Yan (DY) procesas [1], kurio metu kvarkas ir antikvarkas iš susiduriančių protonų anihiliuoja ir sukuria priešingo krūvio leptonų (elektronų, miuonų, tauonų) porą. Šis procesas įdomus tuo, kad jame dalyvauja nevalentinis protono antikvarkas. Didžiojo hadronų greitintuvo eksperimentai matuoja vienmačius ir daugiamačius Drell-Yan proceso diferencialinius reakcijos skerspjūvius [2-6].

Lietuvos mokslininkai dalyvauja Drell-Yan proceso diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavime naudojant 2016 metais CMS detektoriaus užregistruotus protonų susidūrimų duomenis. Teorinių rezultatų patikrinimui svarbu įvertinti foninių procesų indėlį į matuojamus pasiskirstymus. Foniniai procesai – tai tokie pašaliniai procesai, kurių signalai, palikti detektoriuje, praktiškai neatskiriami nuo tiriamojo proceso. Pagrindiniai Drell-Yan foniniai procesai yra tokie, kurių metu susidaro priešingo krūvio leptonų poros: WW, ZZ, WZ, tW, $\bar{t}W$, $t\bar{t}$. Tiriant Drell-Yan proceso metu susidariusias elektronų bei miuonų poras, Drell-Yan proceso tauonų gamyba (DY→ττ) taip pat laikoma foniniu procesu.

Protonų susidūrimo metu dažnai susidaro daug hadronų džetų. Džetas – tai kūgio formos hadronų bei fotonų srautas, hadronizacijos proceso metu susidaręs iš išlaisvinto kvarko arba gliuono. Kai kuriuose džetuose atsiranda ir leptonų, todėl egzistuoja maža tikimybė, kad hadronų džetas bus klaidingai klasifikuotas leptonu. Tokių „netikrų“ leptonų turintys foniniai procesai (W+Jets – vienas netikras leptonas, QCD – du netikri leptonai) pasitaiko ir Drell-Yan proceso tyrime.

Paprasčiausiu atveju foninių procesų indėlį į matuojamus pasiskirstymus galima įvertinti pasinaudojant *Monte Carlo* įvykių modeliavimu, tačiau atliekant didelio tikslumo matavimus stengiamasi rinktis matavimu grįstus metodus, kurie mažiau jautrūs modeliavimo netikslumams. Visi matavimu grįsti metodai paremti kontrolinės įvykių srities, kurioje dominuoja fonas, apibrėžimu bei matematine operacija, kuri fono įvertį perkelia iš kontrolinės srities į signalo sritį. Foniniai procesai su netikrais leptonais gali būti įvertinti klaidingo fizikinio objekto atpažinimo bei matricų metodais. Pastarieji yra paremti tikimybių vertinimu, kad tikras bei netikras leptonai praeis taikomą įvykių atranką. Šie metodai bus detaliai aptarti pranešimo metu.

Darbas atliktas bendradarbiaujant su mokslininkais iš Belgijos, JAV ir Pietų Korėjos.



1 pav. Priešingo krūvio elektronų poros invariantinės masės pasiskirstymas. Juodi taškai vaizduoja CMS detektoriaus užregistruotą įvykių skaičių, o spalvoti stulpeliai – įvertintus skirtingų procesų indėlius į pilną pasiskirstymą. Geltona spalva vaizduoja Drell-Yan procesą, o kitos spalvos – foną. „EW“ žymi WW, WZ, ZZ ir DY→ττ, o „Misid.“ – W+Jets ir QCD procesus [6].

Reikšminiai žodžiai: protonų susidūrimai, Drell-Yan procesas, reakcijos skerspjūvis, leptonai, hadronai, džetai.

Literatūra

[1] S.D. Drell, T.M. Yan, Phys. Rev. Lett., **25**, p. 316-320 (1970).
[2] CMS Collaboration, JHEP, 12, 030 (2013).
[3] ATLAS Collaboration. Phys. Lett. B, 725, p. 223-242 (2013).
[4] CMS Collaboration, Eur. Phys. J. C, 75, 147 (2015).
[5] ATLAS Collaboration, JHEP, 12, 059 (2017).
[6] CMS Collaboration, JHEP 12, 061 (2019).

Spartūs scintiliaciniai detektoriai būsimiems CERN aukštų energijų fizikos eksperimentams ir medicininei vaizdinimo įrangai

Fast scintillation detectors for future high energy physics experiments at CERN and medical imaging devices

Gintautas Tamulaitis[1], Saulius Nargelas[1], Augustas Vaitkevičius[1], Mikhail Korjik[2], Etiennette Affray[3]
[1]Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, Vilnius
[2]Research Institute for Nuclear Problems, Minsk, Belarus
[2]CERN, Switzerland

gintautas.tamulaitis@ff.vu.lt

Faster response, higher light yield, and stronger radiation tolerance have been the hallmark properties of scintillation detectors of ionizing radiation like the Olympic motto *Citius*, *Altius*, *Fortius*. The future high-luminosity high energy physics experiments at CERN and other large facilities put forward a substantial improvement in the response time as the key challenge in the development of the scintillation detectors. A faster scintillator response would also serve for a better spatial resolution of medical imaging devices, in particular, for that of positron emission tomographs operated in time-of-flight mode. This demand encouraged the CERN Crystal Clear Collaboration, where our research team studying scintillation materials at Vilnius University is a participant, to put forward the ambitious target of 10 picoseconds for the time resolution of radiation detectors [1].

This report is intended to review our recent advances in adopting nonlinear optical techniques, which are well developed for the study of semiconductor materials, to investigate the processes in scintillators limiting their response time [2]. The transient absorption (TA) technique in pump and probe configuration turned out to be very informative for studying fast scintillators. The time resolution in TA experiments is limited only by the duration of the pump and probe pulses and might easily be in subpicosecond domain, provided that the pulses are delivered by a femtosecond laser. Equipping the channel to deliver the pump pulses by harmonics generators enables changing the energy of the pump photons in a wide spectral range, whereas the application of optical parametric oscillators allow for a fine tunability of the pump photon to ensure a selective excitation of targeted optical transitions in the studied material. As a result, the TA signal reflects the populations of certain centers in the scintillating material. Probing the scintillator with white light continuum pulses at variable delay enables simultaneous tracing of TA in time and spectrum and is useful for revealing the populations of the centers and their energy levels important for scintillator performance.

The application of the transient absorption technique will be demonstrated in two types of Ce-doped scintillators prospective for fast scintillation detectors. Garnet-type scintillator $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$:Ce (GAGG:Ce) [3,4] is currently considered to be the most prospective candidate for future applications in high energy physics experiments, whereas $Lu_{2(1-x)}Y_{2x}SiO_5$:Ce (LYSO:Ce) [5] is currently used in PET devices and considered as the material of choice for the barrel timing layer in the current upgrade of the Compact Muon Solenoid (CMS) experiment at CERN. Our TA characterization is one of the techniques to select scintillators appropriate for this upgrade. The comparison of the results obtained theoretically [4,5] with the results obtained by TA and the coincidence time resolution technique, which is conventional for the characterization of the response time of scintillator materials [3-5], showed that the major factor limiting the scintillation response time is the excitation transfer to the activator ion, which is strongly affected by electron trapping. We demonstrated that the TA measurements might be successfully exploited to study the transfer. Our study revealed that the aliovalent codoping is effective in improving the response time even at low codoping concentrations. The application of the global analysis technique to analyze the TA data enabled us to estimate several rate constants for the processes important for the fast luminescence response and revealed ways for improving the scintillator timing properties by engineering of the composition of the scintillator matrix.

Reikšminiai žodžiai: scintiliatoriai, jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai, netiesinės optikos metodai.

Literatūra

[1] P. Lecoq, M. Korzhik, A. Vasiliev, Can Transient Phenomena Help Improving Time Resolution in Scintillators, IEEE Trans. Nucl. Sci. 61, 229–234 (2014).
[2] M. Korzhik, G. Tamulaitis, A. Vasil'ev, Physics of Fast Processes in Scintillators, Springer, 262 pages, 2020.
[3] G. Tamulatis, G. Dosovitskiy, A. Gola, M. Korjik, A. Mazzi, S. Nargelas, P. Sokolov, and A. Vaitkevičius, Improvement of response time in GAGG:Ce scintillation crystals by magnesium codoping, Journal of Applied Physics 124, 215907 (2018).
[4] G. Tamulaitis, A. Vasil'ev, M. Korzhik, A. Mazzi, A. Gola , S. Nargelas, A. Vaitkevičius , A. Fedorov, and D. Kozlov, Improvement of the time resolution of radiation detectors based on Gd3Al2Ga3O12 scintillators with SiPM Readout, IEEE Trans. Nucl. Sci. 66, 1879 (2019).
[5] G. Tamulaitis, E. Auffray, A. Gola, M. Korzhik, A. Mazzi, V. Mechinski, S. Nargelas, Y. Talochka, A. Vaitkevičius, A. Vasil'ev, Improvement of the timing properties of Ce-doped oxyorthosilicate LYSO scintillating crystals, J. Phys. Chem. Solids, 139, 109356 (2020).

Kompaktiški Si ir SiGe KMOP elektroniniai šaltiniai taikymams 250-400 GHz dažnių srityje

Compact Si and SiGe CMOS all-electronic sources for applications in 250-400 GHz range

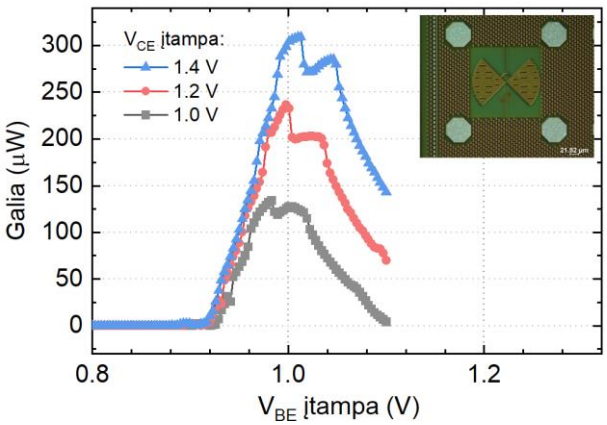
Kęstutis Ikamas[1,3], Dmytro B. But[2], Albert Cesiul[1], Cezary Kołaciński[2], Wojciech Knap[2], Alvydas Lisauskas[1,2]
[1]Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus Universitetas, LT-10257, Vilnius, Lietuva
[2]Center for Terahertz Research and Applications, Institute of High Pressure Physics PAS, 01-142 Warsaw, Poland
[3]Generolo Jono Žemaičio Lietuvos karo akademija, Šilo 5A, 10322, Vilnius, Lietuva
kestutis.ikamas@ff.vu.lt

Kietojo kūno elektronika jau daugiau nei 70 metų išlieka viena sparčiausiai vystomų technologijų pasaulyje. Pastaruosius du dešimtmečius daug dėmesio skiriama naujai sričiai - terahercų dažnių juostos (0,1-10 THz) elektronikai. Siekiama pritaikyti gerai išvystytą, masinei gamybai tinkančią Si CMOS (liet. komplementari metalo, oksido ir puslaidininkio) technologiją naujų šaltinių ir detektorių, kertinių THz spektroskopijos, naujos kartos bevielės telekomunikacijos ir kitų, virš 100 GHz dirbančių sistemų, kūrimui. Fundamentinių osciliatorių srityje didžiausių laimėjimų pasiekta SiGe BiCMOS technologinėje platformoje - sukurti 240 GHz dažnio ir 8,5 dBm galios šaltiniai [1]. Aukštesnių už 300 GHz virpesių taip vadinamuose harmoniniuose osciliatoriuose gavimui naudojami netiesiniai reiškiniai. 2008 metais pademonstruotas 410 GHz ir -47 dBm įtaisas, pagamintas naudojant 45 nm Si CMOS technologiją [2]. Aukščiausias, 1,4 THz dažnis pasiektas su į dauginimo grandinę apjungtais 65 nm CMOS varaktoriais [3], o didžiausia galia – 0,8 dBm ties 312 GHz, išgauta 65 nm CMOS pusės kvadratūros osciliatoriaus architektūroje [5]. Šiose tezėse pateikiami lietuvių ir lenkų mokslininkų pasiekimai rekordinės galios THz ruožo osciliatorių kūrimo srityje.

Harmoniniai osciliatoriai pagaminti naudojant standartinį komercinį 65 nm Si CMOS gamybos procesą, suteiktą Taivanio kompanijos TSMC. Osciliatorių modeliavimo teorija teigia, kad šaltinio generuojamo fundamentinio sinusoidinio signalo dažnis visuomet mažesnis už taip vadinamą maksimalių virpesių dažnį f_{max}. Tranzistorių modeliavimo su TSMC suteiktais modeliais rezultatai rodo, kad pasirinktoje technologijoje maksimalus f_{max} siekia 165 GHz. Dėl to aukštesnio dažnio šaltinių kūrimui pasirinkta diferencinio Colpitts osciliatoriaus architektūra, optimizuota trečios harmonikos virpesiams. Grandinė sudaryta iš dviejų 60 nm ilgio ir 28 µm pločio lauko tranzistorių, aukštadažnių pasyvių LC (indukcinių ir talpinių) elementų ir tranzistoriaus užtūros ir kanalo maitinimo nuolatine srove dalies. Pasyvūs elementai parinkti taip, kad kuo labiau slopintų fundamentinius 84 GHz virpesius ir kuo efektyviau spinduliuotų į laisvą erdvę trečiąją 252 GHz harmoniką.

Iš viso pagaminti trys harmoninio osciliatoriaus variantai [5]. Kiekvieno charakteristikos išmatuotos su taškas-taškas stendu, sudarytu iš dviejų neašinių parabolinių veidrodžių ir dviejų detektorių – vieno plačiajuosčio (komercinis Golėjaus narvelis) ir atrankinio, optimizuoto 250 GHz dažniui (savos gamybos tranzistorinis įtaisas). Didžiausia šaltinių galia ties 252 GHz siekė 78 µW (-11,1 dBm), o bendroji galia, įskaitanti visų harmonikų spinduliuotę – 139 µW (-8,6 dBm). Virpesių dažnis gali būti parinktas 252-265 GHz intervale keičiant tranzistorių užtūros ir kanalo įtampas.

Siekdami pagaminti dar aukštesnės galios ir dažnio imtuvus pasirinkome kitą, vokiečių kompanijos IHP siūlomą 130 nm SiGe CMOS įvairialytės sandūros dvipolių tranzistorių gamybos technologiją, pasižyminčią 400 GHz f_{max} dažniu. Šioje platformoje sukonstravome fundamentinį 300 GHz dažnio šaltinį. Įtaiso architektūra ta pati – diferencinis Colpitts osciliatorius, tačiau pasyvūs elementai optimizuoti pirmosios harmonikos išspinduliavimui į laisvąją erdvę. Pirminių matavimų duomenimis, pagamintų įtaisų galia siekia 300 µW (-5,2 dBm, žr. 1 pav.). Tai gerokai mažiau nei tikėjomės. Grandinės modeliavimo rezultatai rodo, kad iš grandinės galima tikėtis arti 1 mW galios. Šiuo metu ruošiama gamybai pagerintos 130 nm SiGe CMOS terahercų šaltinio versijos.



1 pav. 130 nm SiGe CMOS fundamentinio osciliatoriaus galia. Išmatuota su atrankiuoju 300 GHz tranzistoriniu detektoriumi. Nuotraukoje – pagamintas šaltinio lustas.

Reikšminiai žodžiai: terahercai, harmoninis osciliatorius, fundamentinis osciliatorius, CMOS.

Literatūra

[1] P. Rodriguez-Vazquez et al., *in Proc.of IEEE Radio Wireless Symp.*, Anaheim, CA, USA, pp. 146–149 (2018).
[2] E. Seok, et al., *in Proc. of ISSCC 2008*, pp. 472–629 (2008).
[3] Z. Ahmad and K. O. Kenneth, *in Proc. Symp. VLSI Circuits*, Kyoto, Japan, pp. C310–C311 (2015).
[4] L. Wu et al., *IEEE J. Solid-State Circuits*, 52 (11), 2920 (2017).
[5] K. Ikamas et al., *Sensors*, vol. 21 (17), 5795 (2021).

Titano mikrobolometrų taikymas terahercinėje spektroskopijoje su laikine skyra

Application of Titanium-based microbolometers in Terahertz Time-Domain Spectrometers

Liang Qi[1], Linas Minkevičius[1], Andrzej Urbanowicz[1], Andrej Švigelj[2], Ignas Grigelionis[1], Irmantas Kašalynas[1], Janez Trontelj[2], and Gintaras Valušis[1]
[1]Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Laboratory for Microelectronics, Faculty of Electrical Engineering, University of Ljubljana, Tržaška 25, 1000 Ljubljana, Slovenia

ignas.grigelionis@ftmc.lt

Terahertz waves have been widely studied and cover a broad spectrum of applications, such as medical inspection [1], security check [2], solar cell quality [3] or food control [4]. Due to the increasing demand, THz sensors must be highly sensitive, display a fast response and a high signal-to-noise ratio. Recently, titanium-based antenna coupled microbolometers have been demonstrated exhibiting the noise equivalent power of below 20 pW/Hz$^{1/2}$ and a response time in 5 µs range [5].

In this work, we present a comprehensive experimental study dedicated to reveal features of Ti-µbolometers useful for spatial mode control in THz-TDS systems. Before raster scanning, response spectra of Ti-µbolometers designed for resonant frequencies centered at 0.3 THz, 0.7 THz and for wideband detection were investigated using Fourier transform infrared spectrometer. Spatial beam profiles were explored with and without hyper hemispherical lens in THz-TDS system using 0.7 THz Ti-µbolometer in a recording distance of 55 mm away from the tip of the lens or the antenna. As it can be seen from the response spectra in Panel A of Fig. 1, each spectrum displays peculiarities related to the resonant nature of a dipole antenna coupled Ti-µbolometers designed for 0.3 THz and 0.7 THz frequencies. As for wideband sensor which is coupled with log-periodic antenna, a detection bandwidth falls in the range of 0.25 THz – 1.3 THz.

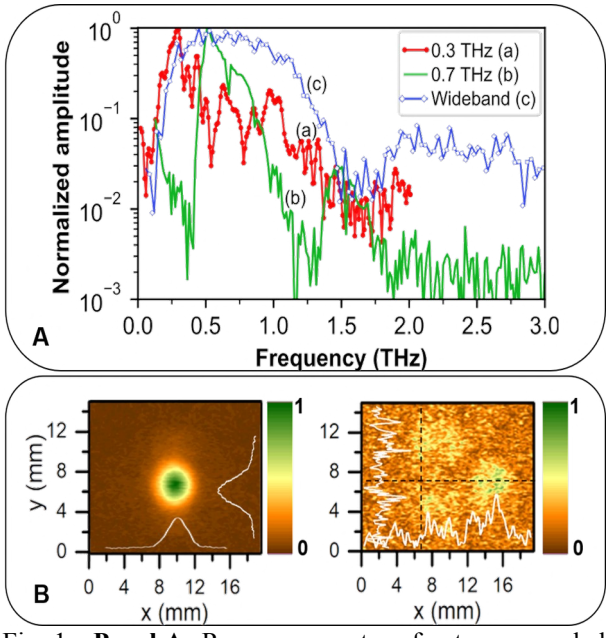


Fig. 1: **Panel A:** Response spectra of antenna-coupled Ti-µbolometersdesigned for resonant frequencies centered at 0.3 THz (a), 0.7 THz (b) and forwideband detection (c). **Panel B:** Intensity normalized beam profiles recordedby 0.7 THz Ti-µbolometers when the photoconductive antenna with lens(left)and without lens(right). White lines indicate intensity cross sections along the relevant axes.

Figure 1 (Panel B) shows normalized intensity spatial beam profiles recorded using 0.7 THz Ti-µbolometers separately when the photoconductive antenna is with (left) and without (right) collimating optics. With lens, the spatial mode profile exhibits nicely resolved quasi-gaussian shape. When the lens is removed, more detailed THz beam structure is unveiled: it can be seen spatial mode structure consisting of three constituents related to the emission antenna properties. Although the quality of the beam image is reduced (signal-to-noise ratio decreases down to 3), it is still enough to reveal features of the spatial mode profile of THz-TDS source.

The Ti-µbolometers with readout electronics exhibit high sensitivity of 200 kV/W and a relatively short response time within 5 µsmicroseconds including electronics circuit. Such devices can be an important part of the sensor family bringing together properties of solid-state based detectors for precise and convenient control of THz-TDS beam spatial profiles even without additional focusing or collimating optics.

Keywords: Ti microbolometers, THz-TDS, beam mode imaging

References

[1] J. H. Son, S. J. Oh, and H. Cheon, J. Appl. Phys. **125**, 19 (2019)
[2] V. A. Trofimov and S. A. Varentsova, Sensors **19**, 1 (2019)
[3] L. Minkevičius, R. Suzanovičiene, S. Balakauskas, G. Molis, A. Krotkus,G. Valušis, and V. Tamošiunas, Electron. Lett. **48**, 932 (2012)
[4] M. Karaliūnas, K. E. Nasser, A. Urbanowicz, I. Kašalynas, D. Bražinskienė, S. Asadauskas and G. Valušis, Sci. Rep. **8**, 18025 (2018)
[5] L. Minkevičius, L. Qi, A. Siemion, D. Jokubauskis, A. Sešek, A. Švigelj, J. Trontelj, D. Seliuta, I. Kašalynas, and G. Valušis, Applied Sciences **10**, 3400 (2020)

Kaitinami metapaviršių emiteriai, skirti THz/sub-THz dažnių ruožui

Thermal metamaterial emitters for THz/sub-THz frequency range

Vladislovas Čižas[1], Ignas Grigelionis[1], Kęstutis Ikamas[2], Vytautas Jakštas[1], Domas Jokubauskis[1], Andrius Bičiūnas[1], Marius Treideris[1], Renata Butkutė[1] ir Linas Minkevičius[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
[2] Vilniaus universitetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
vladislovas.cizas@ftmc.lt

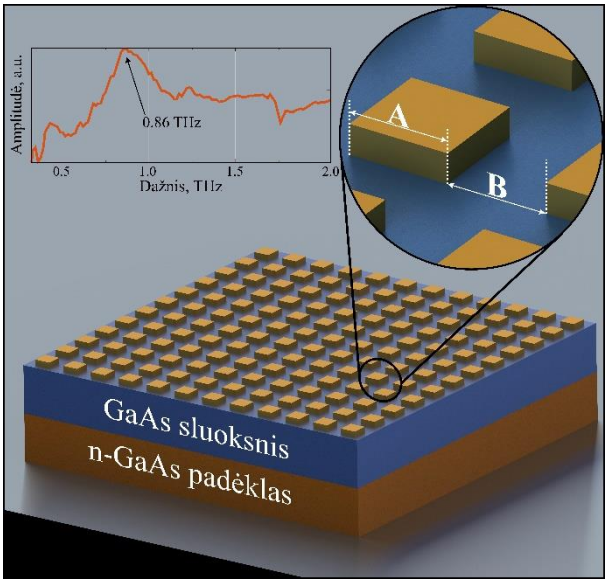
Šiuolaikiniame sparčiai vystomų technologijų pasaulyje atrandama vis daugiau sričių praktiniams terahercinio ir sub-terahercinio (0,1 THz – 10 THz) dažnių ruožo taikymams. Vaizdinimo pasiekimai skirtingiausiose srityse (pvz. apsaugos, farmacijos, žemės ūkio) skatina mažų, galingų, paprastų, kambario temperatūroje veikiančių spinduliuotės šaltinių poreikį [1, 2]. Šiuo metu didžiausias tyrimų kiekis THz dažnių ruožo šaltiniams kurti yra daugiausiai orientuotas į kvantinius kaskadinius lazerius (angl. Quantum Cascade Laser - QCL). Reikia pastebėti, kad QCL pasižymi sudėtinga struktūra, tai lemia aukštus gamybos kaštus. Be to tokie spinduliuotės šaltiniai reikalauja kriogeninio aušinimo bei yra sunkiai realizuojami sub-THz dažnių ruože. Metamedžiagos (ypač sub-THz dažnių intervale) pasižymi sąlyginai mažesnėmis galiomis, bet yra patrauklios dėl gerokai paprastesnių technologinių procesų bei garantuoto veikimo kambario temperatūros aplinkoje.

Šiame darbe pateikiami GaAs sub-THz/THz dažnių ruožo šiluminio šaltinio modeliavimo ir eksperimentiniai rezultatai. Tokiu įtaisų veikimas paremtas šiluminės spinduliuotės, sugeneruotos dielektriko sluoksnyje, rezonansu tarp dviejų laidžių sluoksnių. Šis efektas generuoja tam tikro dažnio spinduliuotę indukuojant paviršinius plazmoninius poliaritonus (angl. Surface Plasmon Polariton – SPP) [3, 4].

Nepriklausomai nuo spinduliuojamo dažnio, šiluminio metamedžiagos spinduliuotės šaltinio galia yra susieta su visiškai juodo kūno spinduliuotės spektru. Kadangi sub-THz dažnių ruože juodo kūno spinduliavimo intensyvumas yra žemas, ypatingai svarbu yra gerai optimizuotas struktūros ir metapaviršiaus dizaino pasirinkimas. Optimizavimas atliktas skaitmeniškai, naudojant trimatį baigtinių skirtumų laiko srityje (angl. 3D FDTD) metodą. Siekiant gero suderinamumo su laboratorijoje vystomais puslaidininkiniais įtaisais, realizuojamais GaAs platformai, nuspręsta naudoti Au/GaAs/n-GaAs daugiasluoksnę struktūrą, vietoje įprasto SiO_2 tarpiklio naudojant GaAs [5].

Pirmieji eksperimentai, buvo atliekami pasirinkus paprasčiausią kvadrato formos narvelį. Metapaviršiaus sluoksnis buvo paruoštas garinant auksą elektronų pluoštų metodu, o narveliai suformuoti naudojant lazerinę UV litografiją, leidžiančia pasiekti ~1 µm skyrą. Pagrindiniai sluoksnio parametrai: periodas ir užpilda, buvo keičiami optimizuojant struktūrą kiekvienam pasirinktam dažniui, atsižvelgiant į teorinio modeliavimo metu gautus rezultatus.

Šaltinių spinduliavimo spektras tirtas THz Maikelsono interferometru. Eksperimentui paruoštos 4 skirtingos struktūros, veikiančios 0,8 – 1,5 THz dažnių ruože. Bandiniai buvo šildyti iki 400°C naudojant specialios konstrukcijos bandinio laikiklį, užtikrinantį kokybišką šilumos perdavimą, ir stabilią temperatūrą. Siekiant išvengti konstrukcijos parazitinio šiluminio spinduliavimo, struktūra buvo patalpintą į nespinduliuojančią dėžutę su 4 mm kūgine apertūra. Siekiant nuslopinti nereikalingas aukštesnio dažnio modas į eksperimentinę liniją papildomai įterptas aukštadažnis (4 THz) filtras. Signalas registruotas Golay detektoriumi.



1 pav. Eksperimente naudotų struktūrų schema ir vienos iš struktūrų emisijos spektras (intarpe).

Šiame darbe sukurti veikiantys įtaisai bei geras eksperimentinių rezultatų atitikimas teoriniam modeliavimui leidžia tikėtis sėkmingo efektyvesniu šiluminių šaltinių sukūrimo. Kitos prietaisų dizaino iteracijos ateityje leis padidinti spinduliuotės galią bei pagerinti spektrines šaltinio charakteristikas.

Reikšminiai žodžiai: metamedžiaga, THz spinduliuotė, FDTD, GaAs, THz šaltinis

Literatūra

[1] G. Valušis et. al., Sensors, **21**, 4092 (2021).
[2] R. Xu and Y. Lin, Nanomaterials, **10**, 1442 (2020).
[3] M. Tsai et. al., Appl. Phys. Lett. **89,** 173116 (2006).
[4] C. Chen et. al. Appl. Phys. Lett. **91**, 243111 (2007).
[5] F. Alves et. al., Optics Express **19**, 21025-21032 (2012).

IR jautrio pagerinimas GeSn fotodioduose lazerinio atkaitinimo pagalba

IR Sensitivity Enhancement in GeSn Photodiodes by Laser Annealing

Patrik Ščajev[1], Pavels Onufrijevs[2], Algirdas Mekys[1], Tadas Malinauskas[1], Kuo-Chih Lee[3], Jevgenijs Kaupuzs[2], Arturs Medvids[2], Hung Hsiang Cheng[3]

[1]Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Sauletekio av. 3, Vilnius 10257, Lithuania
[2] Institute of Technical Physics, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University, P. Valdena 3/7, Riga, LV-1048, Latvia
[3] Center for Condensed Matter Sciences and Graduate Institute of Electronic Engineering, National Taiwan University, Roosevelt Road No 1, Section 4, Taipei 10617, Taiwan

patrik.scajev@ff.vu.lt

Photo-detection in the near-infrared is commonly performed by Ge or InGaAs-based photodetectors. Further extension of the detection range to the mid-infrared region can be performed by germanium-tin (GeSn) material which shows promising characteristics and is fully compatible with silicon electronics as can be directly grown on silicon substrates. In this study, we focused on the optoelectronic properties of the photodiodes prepared by using 200 nm thick $Ge_{0.95}Sn_{0.05}$ epitaxial layers on Ge/n-Si substrate with aluminium contacts. Photodiodes were formed on non-irradiated and Nd:YAG laser irradiated $Ge_{0.95}Sn_{0.05}$ layers. The samples were irradiated by pulsed Nd:YAG laser with 61.5-259.2 MW/cm^2 intensity. The photodiodes were characterized by using short laser pulses with the wavelength in 2.0-2.6 μm range. The laser-irradiated diode was found more sensitive in the long wavelength range due to laser induced Sn atoms redistribution providing formation of graded bandgap structure. Sub-millisecond photocurrent relaxation in the diodes revealed their suitability for image sensors. Our findings open the perspective for improving the photo-sensitivity of GeSn alloys in the mid-infrared by pulsed laser processing [1].

In Fig. 1 responsivity spectral dependencies of the photodiodes with different laser irradiation are provided. It is evident that the laser irradiation extends the photosensitivity to longer wavelengths by 250 nm, revealing a positive impact of laser irradiation at low intensities. Further increase of the laser annealing induces a strong Sn accumulation into a thin surface layer, and a drop of efficiency is observed at longer wavelengths, since Sn-enriched surface layer is suspected to have stronger non-radiative losses, as evidenced by faster photocurrent relaxation decay and faster recombination of carriers investigated by pump-probe. XRD 2-theta peak broadening explains the Sn redistribution and arising relaxation, which increased the concentration of dislocation defects from 2×10^8 cm^{-2} to ~10^9 cm^{-2}. Photocurrent dependencies on laser power showed a slight reduction of the photocurrent with laser irradiation. Rather low photo-responsivity is explained mainly by the weak absorption in the layer due to its indirect bandgap. Similar values of 33 mA/W [2] and 24 mA/W [3] at 2000 nm were obtained in conventional GeSn photodiodes.

#

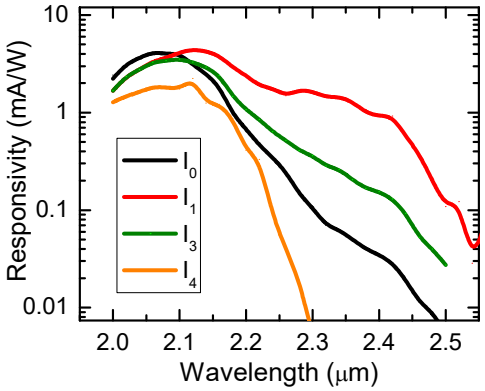


Fig. 1. Responsivity spectral dependences of the photodiodes with different laser irradiation [1].

Keywords: photodiode, infrared, laser annealing, GeSn.

References

[1] P. Ščajev, P. Onufrijevs, A. Mekys, T. Malinauskas, D. Augulis, L. Subacius, K.-C. Lee, J. Kaupuzs, S. Varnagiris, A. Medvids, H. H. Cheng, Extension of Spectral Sensitivity of GeSn IR Photodiode after Laser Annealing, Applied Surface Science 555, 149711 (2021).
[2] H. Cong, C. Xue, J. Zheng, F. Yang, K. Yu, Z. Liu, X. Zhang, B. Cheng, Q. Wang, Silicon Based GeSn p-i-n Photodetector for SWIR Detection, IEEE Photonics J. 8, 1–6 (2016).
[3] T. Hu, B. Dong, X. Luo, T.-Y. Liow, J. Song, C. Lee, G.-Q. Lo, Silicon photonic platforms for mid-infrared applications, Photonics Res. 5, 417 (2017).

Periodiškai nanostruktūrizuotos optinės dangos, skirtos lazerio šviesos valdymui

Periodically nanostructured optical coatings for the manipulation of laser radiation

Lina Grinevičiūtė[1], Julianija Nikitina[1], Ceren Babayigit[2], Darius Gailevičius[3,4], Tomas Tolenis[1], Martynas Peckus[3], Kęstutis Staliūnas[3,5,6]

1.Center for Physical Sciences and Technology, Savanoriu Ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania
2. TOBB University of Economics and Technology, Söğütözü Str. 43, 06510, Ankara, Turkey
3. Vilnius University, Faculty of Physics, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, Vilnius, Lithuania
4. Femtika, Sauletekio Ave. 15, LT-10224, Vilnius, Lithuania
5. ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain
6. UPC, Dep. de Fisica, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona) Spain
lina.grineviciute@ftmc.lt

In micro-lasers, especially in high power emission regimes, the spatial quality of laser light beam deteriorates, i.e. the energy distribution deviates from the Gaussian form. Typically, a confocal arrangement of lenses with a diaphragm in the focal plane is used for intracavity spatial filtering. Such conventional filtering requires access to the far-field domain. In microlasers, however, conventional filtering is impossible due to the lack of space in micro-resonators to access the far-field. Therefore, a novel concept for more compact and efficient spatial filtering is necessary.

In this study, we propose and demonstrate a conceptually novel mechanism of spatial filtering in the near-field domain, by a nanostructured multilayer coating - a 2D photonic crystal structure with a periodic index modulation along the longitudinal and transverse directions to the beam propagation (see Fig.1) [1]. The structure is built on a nano-modulated substrate, which provides the transverse periodicity. The physical vapor deposition of materials with different refractive indexes is used for the self-repeating modulation in the longitudinal direction.

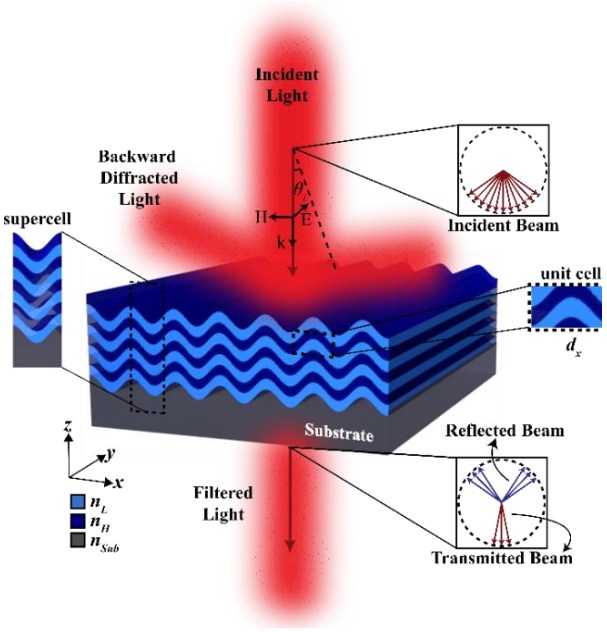


Fig. 1 The schematic representation of designed Photonic Crystal with angular selectivity

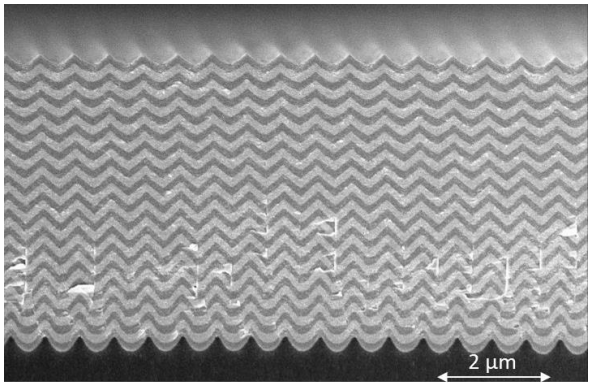


Fig. 2 SEM image of the cross-section of the fabricated structure

We experimentally demonstrate a 5 µm thick photonic multilayer structure composed of nanostructured layers of alternating high- and low-index materials (Nb_2O_5 and HfO_2, respectively) providing angular selectivity in the near-infrared frequencies with 2° low angle passband. The proposed 2D photonic structure can be considered as a promising component for intracavity spatial filtering even in high power microlasers systems.

In the presentation, the investigation of different technologies for the single layer and multilayer coating deposition on nanostructured surfaces will be reviewed. The focus will be on the possibility to form the dielectric structures with periodic modulation of optical constants by Ion Beam Sputtering technology together with the application of angular filtering of light [1,2].

Key words: optical coatings, ion beam sputtering, nanostructured surface, angular and frequency selectivity.

This investigation has received funding from Horizon 2020 ERA.NET-COFUND program project MiLaCo (Project No. S-M-ERA.NET-20-2).

Literature

[1] L. Grineviciute, C. Babayigit, D. Gailevičius, M. Peckus, M. Turduev, T. Tolenis, M. Vengris, H. Kurt, K. Staliunas, *Adv. Optical Mater*. 2001730, 2021
[2] L. Grineviciute, J. Nikitina, C. Babayigit, K. Staliunas, *Applied Physics Letters* 118, 131114, 2021

Medžiaginių kaukių filtravimo efektyvumo nustatymas

Evaluation of filtration efficiency of textile masks

Kamilė Kandrotaitė[1,2], Vadimas Dudoitis[2], Ieva Uogintė[2],Kristina Plauškaitė-Šukienė [2], Francis Pope[3], Peter Strizak[4], Steigvilė Byčenkienė[2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[3]The University of Birmingham, UK
[4]L.V. Pisarzhevskii Institute of physical chemistry of NAS of Ukraine, Ukraine
kamile.kandrotaite@ff.stud.vu.lt

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

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

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

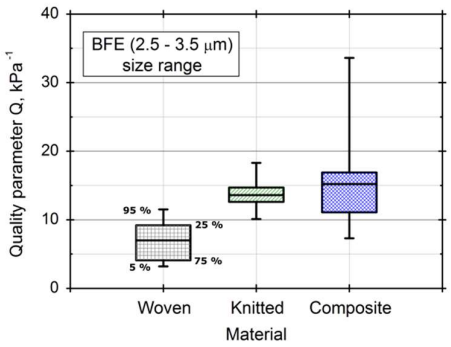
Sujungus ΔP ir FE duomenis, galima įvertinti skirtingų tekstilės gaminių našumą. Audiniai parodė dvi ekstremalias situacijas: (a) mažas slėgio kritimas ir prastas filtravimas; (b) geras filtravimas ir didelis slėgio kritimas. Austų audinių pavyzdžių, kurie galėtų atspindėti šių dviejų kraštutinumų tarpinę būseną nenustatyta. Koreliacijos tarp medžiagos paviršiaus tankio ir jos ΔP arba FE verčių nenustatyta. Tai rodo, kad austos medžiagos efektyvumą nulemią pynimo modelis ir tankis.

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

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

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

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



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

Reikšminiai žodžiai: SARS-CoV-2, aerozolio dalelės, filtravimo efektyvumas

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

Literatūra

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

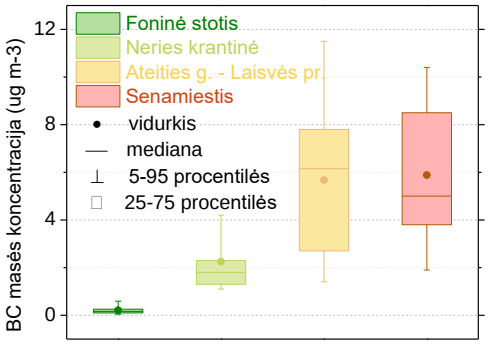
Taršos aerozolio juodąja anglimi lygio nustatymas pėstiesiems ir dviratininkams skirtose vietose Vilniaus mieste

Assessment of the aerosol black carbon pollution level in the places for pedestrians and cyclists in Vilnius

Agnė Minderytė[1,2], Steigvilė Byčenkienė[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva
[2]Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 9, LT- 10222 Vilnius, Lietuva
agne.minderyte@ftmc.lt

XXI amžiuje klimato kaita ir prasta oro kokybė yra dvi aktualiausios aplinkosaugos problemos, su kuriomis šiuo metu susiduria daugiau nei 85% Europos ir viso pasaulio gyventojų. Juodoji anglis (angl. Black Carbon (BC)) yra aerozolio dalelių komponentė, pasižyminti stipriausia šviesos sugertimi, susidaranti degant iškastiniam kurui ir kietajam biokurui nepilno degimo sąlygomis ir galinti atmosferoje išlikti iki dviejų savaičių. Vienas pagrindinių taršos šaltinių yra automobilių keliama tarša, kuri daugiausiai koncentruojasi miestuose ir yra pagrindinė aplinkos oro kokybės problema juose. Lietuvos oro kokybės stebėjimo stotys matuoja pagrindinių teršalų vertes, kuriems galioja aplinkos oro užterštumo normos, nustatytos žmonių sveikatos, ekosistemų ir augmenijos apsaugai. Stočių informacija reprezentuoja bendrus lygius, vyraujančius pasirinktoje vietovėje, tačiau negali atspindėti lygių sinchronizuotų su žmogaus judumo maršrutu mieste. Šio tyrimo metu nagrinėti miesto oro kokybės pokyčiai, t.y. juodosios anglies masės koncentracijos svyravimai, patiriami keliaujant pėsčiomis ir dviračiu Vilniaus mieste bei taršos šaltinių indėlį.

Šiame tyrime naudotas modernus micro-Aetalometras, skirtas matuoti BC ekvivalentinės masės koncentraciją ir nustatyti taršos lygį mobiliame režime keliaujant pėsčiomis skirtingose miesto aplinkose. Stacionarūs juodosios anglies sudėtyje turinčių aerozolio dalelių tyrimai buvo atlikti naudojant 7 bangos ilgių Aetalometru (Magee Scientific, EA31), Vilniuje, miesto taršos foninį lygį atspindinčioje vietovėje, 2021 m. liepos mėn. Siekiant nustatyti taršos erdvinį pasiskirstymą, buvo nustatyta, kad keliaujant šalia didelio aktyvumo eismo gatvės, patiriamas taršos poveikis yra iki 27 kartų didesnis nei foninėje miesto aplinkoje. Tai svarbi informacija rengiant darnaus miesto planavimą.



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

Projektas finansuojamas iš Europos socialinio fondo lėšų pagal priemonės Nr. 09.33.3-LMT-K-712 veiklą „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą".

Branduolinių reaktorių metalinių radiaktyviųjų atliekų charakterizavimas ir klasifikavimas PREDIS projekte

Characterization and classification of the metallic radioactive waste of the nuclear reactors in PREDIS

Rita Plukienė[1], Artūras Plukis[1], Elena Lagzdina[1], Marina Konstantinova[1], Anastasia Savidou[2], Stefan Coninx[3], Joerg Feinhals[3]

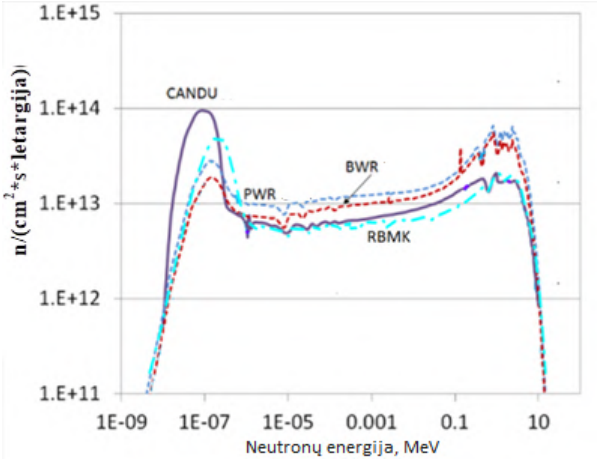
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania,
[2] National Centre of Scientific Research "Demokritos" (NCSRD), Patr. Gregoriou E & 27 Neapoleos Str, 15341 Agia Paraskevi, Greece
[3]DMT GmbH & Co. KG, Große Bahnstr. 31, 22525 Hamburg, Germany
rita.plukiene@ftmc.lt

Radioaktyviųjų atliekų tvarkymo ir šalinimo strategija yra labai svarbi šalims, kuriose veikia ar veikė atominės elektrinės (AE). PREDIS (angl. PRE-DISposal management of radioactive waste) yra HORIZON2020/ Euratom ketverių metų projektas, kurio pagrindinis tikslas yra plėtoti ir tobulinti radioaktyviųjų atliekų charakterizavimo, klasifikavimo, apdorojimo, laikino ir galutinio saugojimo veiklas, ypatingą dėmesį skiriant vidutinio ir mažo aktyvumo atliekoms, kurios galėtų būti išvalytos ir panaudojamos antrą kartą arba būtų sumažintas jų pavojingumas.

Viena iš PREDIS veiklų skirta metalinių atliekų problematikai: metalo atliekų charakterizavimui ir klasifikavimui, apdorojimui bei tūrio mažinimui. Svarbu sukurti optimizuotą reaktoriaus metalinių atliekų klasifikavimo schemą, atsižvelgiant į atliekų aktyvacijos lygį: labai aktyvuotos, tarpinės, mažai aktyvios metalo konstrukcijos ir neaktyvuotos medžiagos. Taip būtų lengviau atlikti dezaktyvacijos procedūras užtikrinant efektyvesnį ir ekonomiškai naudingesnį atliekų šalinimą. Metalo atliekų charakterizavimo metodika yra panaši į visiems reaktoriams ir yra pagrįsta nuklidinio vektoriaus (NV) sudarymu atliekų srautams. Skaičiavimai rodo, kad du trečdaliai AE metalinių atliekų, susidariusių dėl eksploatavimo nutraukimo ir išmontavimo, yra nebekontroliuojamų lygių atliekos, likęs trečdalis yra įvairaus aktyvumo radioaktyviosios medžiagos [1]. MRA aktyvumą nulemia įvairūs radionuklidai, kurių koncentracijos priklauso nuo branduolinio reaktoriaus tipo ir konstrukcinių medžiagų.

Pagrindiniai metalinių atliekų tvarkymo etapai:

- Išankstinis MRA charakterizavimas naudojant (MCNP6/SCALE6.2) modeliavimą (1 pav.), gaunant neutronų aktyvacijos 3D žemėlapį reaktoriaus aktyviojoje zonoje ir periferinėse konstrukcijose.
- Išsamus MRA charakterizavimas išmontuojant konstrukcijas bei atliekant *in situ* matavimus pasitelkiant branduolinius bei masių spektrometrijos eksperimentinius metodus (bandinių radiologinė analizė bei paviršiaus užterštumo ir neutronų aktyvacijos įvertinimas).
- Optimizuotas charakterizavimas: nuklidinių vektorių (NV) nustatymas MRA srautui. Apjungiant modeliavimą ir eksperimentinius matavimus galima atskirti homogeniškai aktyvuotų MRA, mišrių (aktyvuotų ir užterštų) MRA ir metalo atliekų, kurioms būdingas tik paviršinis užterštumas, srautus.



1 pav. Neutronų srautų PWR, BWR, RBMK ir CANDU reaktoriuose palyginimas (adaptuota pagal L. Walters [2], RBMK atvejis pagal [3]

Optimizuotas NV gaunamas analizuojant ir susisteminant metalinių atliekų matavimus, parenkant optimalius atraminius radionuklidus (pvz., ^{60}Co ar ^{94}Nb Zr-Nb lydiniams), taip pat įvertinant atraminių bei sunkiai matuojamų (^{59}Ni, ^{63}Ni, aktinoidai ir kt.) nuklidų tarpusavio ryšius, atsižvelgiant taip pat į neutronų aktyvacijos ir užterštumo atliekų srautuose analizę.

Tyrimai buvo vykdami pagal HORIZON2020 PREDIS projekto 2019-2020 veiklas, sutartis Nr. 945098.

Reikšminiai žodžiai: metalinės radiaktyviosios atliekos, nuklidinis vektorius.

Literatūra

[1] Stade Decommissioning and dismantling of the nuclear power plant - from the nuclear power plant to the green lawn 3 ed. (2008).
[2] L. Walters et al., Equivalent Radiation Damage in Zr-Alloys Irradiated in Various Reactors, 18th Int. Symp. on Zirconium in the Nuc. Industry, USA: ASTM International (2018).
[3] V. Remeikis et.al, Nuc. Eng. and Design **361,** 1–10, (2020).

Dirbtinio neuroninio tinklo naudojimas neutronų ir gama jonizuojančiosios spinduliuotės atskyrimui organiniame scintiliaciniame detektoriuje

Use of an artificial neural network for neutron and gamma particles discrimination in organic scintillation detector

Jevgenij Garankin[1], Artūras Plukis[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
jevgenij.garankin@ftmc.lt

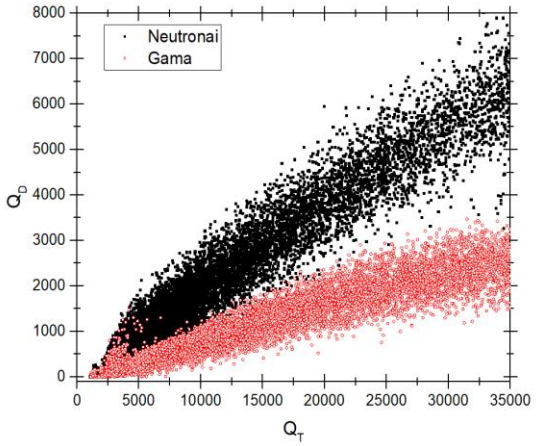
Šiuo metu yra paklausūs greiti, lengvai pagaminami ir, svarbu, pigūs detektoriai sugebantys atskirti neutronus nuo lydinčiosios gama spinduliuotės arba aptikti skirtingo tipo jonizuojančiosios spinduliuotės daleles mišriuose šaltiniuose. Tokių detektorių panaudojimas yra platus – nuo saugos įrenginių oro uostose iki radioaktyvių atliekų charakterizavimo, neutronų srauto stebėjimo branduolinėse jėgainėse ar kosminės spinduliuotės tyrimų kosmose. Šiuo metu yra aktyviai tiriami ir kuriami įvairaus tipo organiniai scintiliaciniai detektoriai, kurie gali ne tik registruoti patekusių į detektorių jonizuojančiosios spinduliuotės dalelių spektrus, bet ir nustatyti jų tipą. Daug tyrimų yra skirta plastikiniams organiniams detektoriams, jų gamybai ir panaudojimui.

Vystant detektorių gamybą, tobulėja ir detektorių atsako analizės būdai. Šiuo metu pagrindinis scintiliacinių detektorių atsako analizės būdas yra impulso formos analizė (pulse shape discrimination arba PSD). Skirtingo tipo jonizuojančiosios spinduliuotės dalelės skirtingai sužadina detektoriaus medžiagą. Lengvos dalelės, tokios kaip įgreitinti elektronai (beta spinduliuotė) arba elektronai atsiradę detektoriaus viduje dėl sąveikos su pirmine gama spinduliuote, pasižymi mažesniu detektoriaus medžiagos sužadinimo tankiu nei, pavyzdžiui, sunkios alfa dalelės. Dėl skirtingo sužadinimo tankio sužadintos detektoriaus medžiagos molekulės išspinduliuoja energiją skirtingais būdais. Kai dėl sąveikos su sunkia dalele medžiagoje atsiranda didelio sužadinimo tankio sritis, tampa galima triplet-tripletinės anihiliacijos (TTA) relaksacija, kuri medžiagoje pasireiškia per uždelstąją fluorescenciją. Uždelstosios ir greitosios fluorescencijos impulso dalių integralų palyginimas parodo dalelės tipą.

PSD dalelių atskyrimo metodas puikiai tinka atskiriant didelės energijos daleles, tačiau jo tikslumas mažėja mažėjant registruojamai dalelių energijai.

Kompiuterio mokymas ir dirbtinio intelekto naudojimas gali padėti, kai standartinių matematinių metodų naudojimas neleidžia pakankamai tiksliai nustatyti dalelės tipo. Kiekvieno impulso atveju išmokytas algoritmas gauna visą impulso informaciją ir gali nustatyti dalelę neapsiribojant impulso integralu. Norint teisingai apmokyti modelį jam reikalingas teisingai paruoštas ir teisingas klasifikuotas duomenų masyvas, tačiau sprendžiant neutronų ir gama spinduliuotės atskyrimą tokio masyvo paruošimas yra labai sudėtingas. Nėra metodo, kuris leistų visiškai izoliuoti neutronus ir registruoti juos atskyrai nuo gama kvantų, šių dalelių srautai yra registruojami kartu.

Šiame darbe buvo panaudotas RProp daugiasluoksnio tinklo metodas [1]. Modelio mokymas ir testavimas buvo vykdomas KNIME Analytics Platform programos aplinkoje. Modelis pritaikytas nustatant jonizuojančiosios spinduliuotės dalelių tipą iš duomenų gautų registruojant PEN (polietilen naftalato) detektoriaus atsaką į izotopinį PuBe šaltinį. Ankstesni tyrimai parodė, kad PEN galima naudoti nustatant dalelės tipą [2]. Kadangi nėra galimybės tiksliai apmokyti modelio naudojant tik vienalaikį neutronų ir gama dalelių srautą, tam tikslui buvo panaudoti gama ir alfa dalelių šaltiniai. Alfa dalelės detektoriuje sukuria panašaus tankio sužadintas sritis kaip ir atatrankos protonai po sąveikos su neutronu. Apmokyto modelio atsakas į neutronų ir gamą dalelių srautą pavaizduotas 1 pav.



1 pav. Neutronų ir gama dalelių atskyrimas naudojant daugiasluoksnio tinklo metodą. Q_T – viso impulso integralas, Q_D – uždelstosios fluorescencijos integralas.

Atsižvelgiant į gautus rezultatus matome, kad metodas yra tinkamas nustatant mažos energijos jonizuojančiosios spinduliuotės daleles, tačiau dar reikalingi papildomi tyrimai ir matavimai siekiant sumažinti galimas metodo paklaidas.

Reikšminiai žodžiai: jonizuojanti spinduliuotė, dirbtinis neuroninis tinklas.

Literatūra

[1] M. Riedmiller, H. Braun and etc. , ICNN **16** (1993).
[2] J. Garankin, A. Plukis and etc. , IEEE Trans. Nuc. Sc. **65,** 2 (2018).

Krūvininkų difuzijos įtaka InGaN darinių kvantiniam našumui

Impact of carrier diffusion to internal quantum efficiency of InGaN quantum well structures

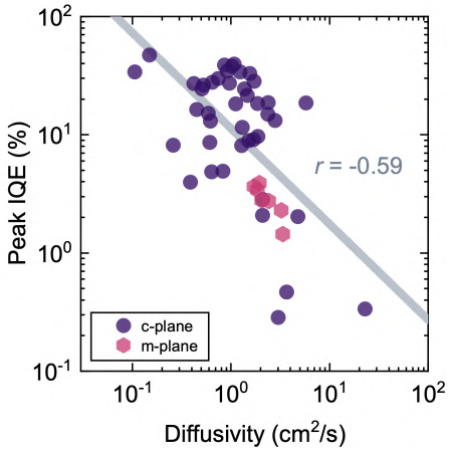
Ramūnas Aleksiejūnas, Kazimieras Nomeika, Žydrūnas Podlipskas, Saulius Nargelas, Gintautas Tamulaitis
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
ramunas.aleksiejunas@ff.vu.lt

Vidinis kvantinis našumas (*Internal Quantum Efficiency*, IQE) yra apibrėžiamas kaip santykis tarp spindulinės ir suminės rekombinacijos spartų. Šiuolaikinių InGaN mėlynų šviestukų IQE viršija 90%. Deja, našumas sparčiai krenta tiek didinant indžio kiekį, tiek didinant krūvininkų tankiui, o tai rimtai riboja dalį nitridinių šviestukų taikymų [1]. Šios dvi problemos yra seniai žinomos ir tiriamos, tačiau galutinių atsakymų vis dar nėra. Tai parodo, kad procesai, lemiantys našumą InGaN dariniuose, yra sudėtingi, galimai dėl tokio tipo lydiniuose neišvengiamos netvarkos ir jos įtakos krūvininkų pernašai ir rekombinacijai [2].

Šiame pranešime pristatome mūsų naujausius tyrimus, kurie parodo, kad maksimalią IQE vertę InGaN kvantiniuose dariniuose riboja tiek netiesioginė Auger rekombinacija per defektus, tiek ir krūvininkų difuzija. Siekdami išskirti universalius IQE lemiančius veiksnius, tyrėme 57 tarpusavyje nesusijusiu darinius, skirtingų augintojų užaugintus MOCVD būdu per paskutinius 15 metų, turinčius nevienodą indžio kiekį, kvantinių šulinių ir barjerų storį, projektuotus skirtingiems tikslams ir pan. 7 bandiniai buvo suformuoti homoepitaksiškai ant *m* GaN plokštumos – pagal rezultatus šiuose bandiniuose įvertinome spontaninio elektrinio lauko ir dislokacijų įtaką rezultatams. Tyrimams naudojome skirtuminio pralaidumo, šviesa indukuotų difrakcinių gardelių ir laikinės skyros katodoliuminescencijos metodikas. IQE bandiniuose įvertinome dviem nepriklausomais būdais: tiesiogiai matuodami integruojančia sfera arba skaičiuodami iš skirtuminio pralaidumo irimo spartos priklausomybės nuo sužadintų krūvininkų tankio.

Pastebėjome, kad skirtingais būdais išmatuotų IQE priklausomybės nuo krūvininkų tankio nesutampa, o skirtumas yra ryškesnis bandiniuose su mažesnėmis absoliutinėmis našumo vertėmis. Šis nuokrypis parodo, kad InGaN dariniuose vyksta nespindulinis procesas, kurio sparta tiesiškai auga nuo krūvininkų tankio. Kita vertus, ši sparta tiesiškai koreliuoja su Shockley-Read-Hall, SRH, rekombinacijos sparta. Tokias savybes turi Auger rekombinacija per taškinius defektus (*trap-assisted Auger recombination, TAAR*). Panašius procesus anksčiau esame stebėję AlGaN sluoksniuose [3], o neseniai TAAR buvo patvirtinta ir žemos kokybės MBE dariniuose [4]. Šio tyrimo rezultatai leidžia teigti, kad TAAR yra pagrindinis veiksnys ribojantis našumą „bloguose“ bandiniuose su IQE<10%. Kita vertus, bandiniuose su IQE>20% našumą riboja tiesioginė Auger rekombinacija. Įdomu pastebėti, kad anksčiau nepastebėtas TAAR procesas galėjo būti priežastimi ilgai vykusio ginčo dėl efektyvumo kryčio (*efficiency droop*) prigimties – skirtingos kokybės bandinius tiriančios grupės galėjo prieiti skirtingų išvadų.

Kita vertus, šiame pranešime parodome, kad tiek SRH, tiek TAAR sparta tiesiškai koreliuoja su skylių difuzijos koeficientu, o tai reiškia, kad IQE krenta bandiniuose su efektyvesne krūvininkų pernaša. Svarbu pažymėti, kad ta pati tendencija yra matoma tiek poliniuose, tiek ir nepoliniuose bandiniuose, o tai leidžia atmesti spontaninio elektrinio lauko poveikį. Pateikiami rezultatai leidžia teigti, kad krūvininkų migracija link taškinių defektų sankaupų vaidina svarbų vaidmenį ribojant maksimalų InGaN našumą.



1 pav. Vidinio kvantinio našumo priklausomybė nuo difuzijos koeficiento

Reikšminiai žodžiai: InGaN, vidinis kvantinis našumas, krūvininkų difuzija, krūvininkų rekombinacija.

Literatūra

[1] C. Weisbuch, ECS J. Solid State Sci. Technol. 9, 016022 (2019).
[2] S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, and S. Nakamura, Appl. Phys. Lett. 69, 4188 (1996).
[3] Ž. Podlipskas et al., Journal of Physics D: Applied Physics, 49, 145110 (2016).
[4] D.J. Myers et al., Appl. Phys. Lett. 116, 091102 (2020).

Puslaidininkinės GaN struktūros teraherciniam ir infraraudonajam spektro ruožams

Semiconductor GaN structures for terahertz and infrared spectrum ranges

Justinas Jorudas[1], Vytautas Janonis[1], Daniil Pashnev[1], Roman Balagula[1], Ignas Grigelionis[1], Liudvikas Subačius[1], Simonas Indrišiūnas[1], Irmantas Kašalynas[1]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras (FTMC), Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
irmantas.kasalynas@ftmc.lt

Puslaidininkinių jutiklių ir spinduolių kūrimas teraherciniame (THz) ir infraraudonajame (IR) spektro ruožuose susijęs su naujais THz bei IR taikymais [1,2]. Išskirtinės GaN medžiagos fizikinės savybės lėmė naujų puslaidininkinių technologijų atsiradimą 2014 m. Lietuvoje, FTMC [3] bei GaN struktūrų intensyvius tyrimus ir taikymus nuo THz iki IR spektro ruožo [4–6].

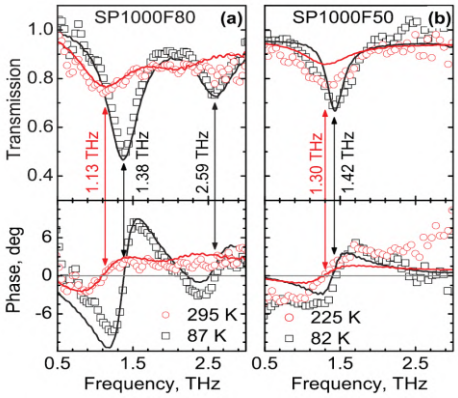
Šiame darbe ištyrėme derinamo dažnio emiterius, kuriuose panaudojami fizikiniai plazmonų ir fononų bei jų sąveikos ypatumai puslaidininkinėse GaN struktūrose [7–9]. Pasirinkus AlGaN/GaN/SiC didelio elektronų judrio tranzistorinės (HEMT) struktūras su dvimatėmis elektronų dujomis (2DEG) ir optimizavus elektrinių kontaktų charakteristikas [10,11], ištyrėme dispersinius 2D plazmonų dėsnius bei elektronų efektinės masės priklausomybę temperatūrų ruože 77-300 K naudojant THz spektroskopiją su laikine skyra [8,12]. Nustatyti plazmonų rezonansinai ypatumai pralaidumo amplitudės ir fazės spektruose, kur plazmono dažnį atitinka minimumo ir didžiausio gradiento taškai atitinkamuose spektruose (žr. 1 pav.), leido pasiūlyti paprastesnį integralinį sąryšį rezonansų aplinkoje tarp spektrų, nei žinomas Kramerso-Kronigo sąryšis. Signalai fazės spektruose, būdami mažiau jautrūs gardelės defektams nei, kad amplitudžių spektruose, leido stebėti rezonansinius 2D plazmonų ypatumus net iki kambario temperatūros bei aprašyti elektronų efektinės masės priklausomybę nuo temperatūros empirine formule:

$$m^*(T)/m_0^* = 1 + 0.01\left(T/T_c\right)^5, \qquad (1)$$

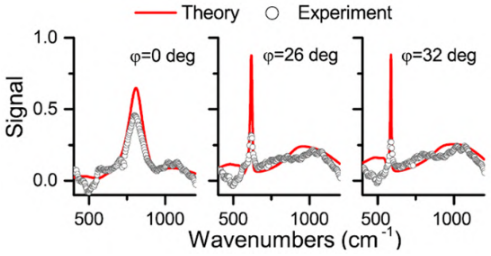
čia T_c = 134 K parodo temperatūrą nuo kurios elektrono masė nuo nominalios 0.22 m_0 vertės pradeda didėti netiesiškai, o temperatūroje T = 295 K yra apie 0.34 m_0. Elektrono masės renormalizacija eksperimentiškai stebėta įvairiose AlGaN/GaN HEMT struktūrose [6,12].

Galiausiai nustatėme paviršinių plazmonų-fononų-poliaritonų (SPPhP) dispersijos dėsnius sekliose *n*-tipo GaN gardelėse. Išskirtinai SPPhP gali padidinti gardelės spinduliavimo efektyvumą labai siaurame spektro ruože skersinio optinio fonono aplinkoje net iki 100 % (žr. 2 pav.). Tas leidža kurti IR ir THz ruožo šaltinius, kurie kaupinami elektriškai spinduliuoja normalės kryptimi pasirinkto dažnio šviesos pluoštelį su aukšta spektrine kokybe (kvazi-monochromatinis) ir dideliu erdviniu koherentiškumu (maža skėstis) [13].

Verta pažymėti, kad sukurtuose emiteriuose darbinį dažnį galima keisti arba sklendės įtampa, prijungta prie ekranuotų 2DEG, arba paviršinės gardelės parametrų inžinerija, apgalvotai parenkant gardelės parametrus ar polinio puslaidininkio legiravimo laipsnį. Deja, elektronų plazmos savųjų svyravimų slopinimo koeficientas yra didelis, o tai lemia, kad 2D plazmoninių šaltinių spektrinė kokybė bus gerokai žemesnė, nei SPPhP pagrindu pagamintų šaltinių. Tačiau, galimybė 2D plazmonų rezonansinį dažnį valdyti išorine įtampa išlieka patraukli įvairiems praktiniams taikymams [9].



1 pav. Pralaidumo amplitudžių ir fazių spektrai 2D plazmonams AlGaN/GaN HEMT struktūroje temperatūrų ruože 80-295 K. Metalinės gardelės periodas ir užpildos skaičius – 1000 nm ir 80 % (a) bei 1000 nm ir 50 % (a), atitinkamai [12].



2 pav. Suskaičiuoti (linijos) ir išmatuoti (simboliai) emisijos spektrai seklios n-GaN gardelės, kurio gylis, periodas ir užpildos skaičius yra 1 μm, 11 μm ir 50 %, atitinkamai [7].

Padėka. Tyrimus remia LMT per projektą KOTERA-PLAZA (Nr. 01.2.2-LMT-K-718-01-0047) ir Lietuvos-Lenkijos projektą TERAGANWIRE (Nr. S-LL-19-1).

Reikšminiai žodžiai: GaN, AlGaN/GaN, dvimačiai elektronai, plazmonai, poliaritonai, THz ir IR emiteriai.

Literatūra

1. I. Kašalynas et al., Sensors 16(4), p.432 (2016).
2. S. Indrišiūnas, et al., Opt. Lett. 44(5), p.1210 (2019).
3. V. Jakštas et al., Lith. J. Phys. 54(4), p.227 (2014).
4. P. Sai,e Appl. Phys. Lett. 115(18), p.183501 (2019).
5. J. Jorudas et al., in 44th Conf. Proc IRMMW-THz. IEEE, (2019).
6. R. B. Adamov et al., Appl. Sci. 11(13), p.6053 (2021).
7. V. Janonis et al., Appl. Phys. Lett. 116(11), p.112103 (2020).
8. D. Pashnev et al., Appl. Phys. Lett. 117(5), p.051105 (2020).
9. V. Janonis et al., SPIE 11499, p.1149909 (15 September 2020).
10. I. Grigelionis et al., Mater. Sci. Semicond. Process. 93, p.280 (2019).
11. J. Jorudas et al., Micromachines 11(12), p.1131 (2020).
12. D. Pashnev et al., Appl. Phys. Lett. 117(16), p.162101 (2020).
13. V. Janonis et al., Opt. Express 29(9), p.13839 (2021).

Lazerinių diodų fosforinių keitiklių šiluminio gesinimo slopinimas panaudojant hBN daleles

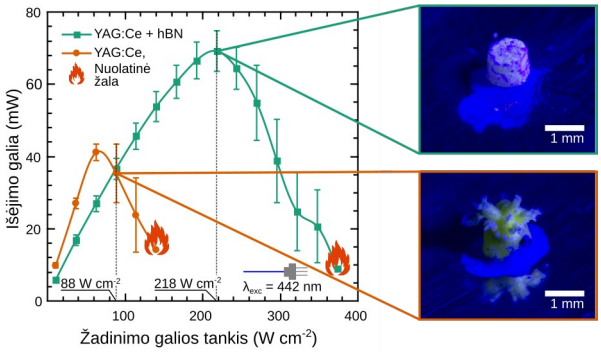
The reduction of thermal quenching effect in laser-excited phosphor converters using hBN particles

Akvilė Zabiliūtė-Karaliūnė, Justina Aglinskaitė, Pranciškus Vitta
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
akvile.zabiliute@ff.vu.lt

Dėl ekonomiškumo, patvarumo ir patogumo kietakūniai šviesos šaltiniai jau spėjo įsitvirtinti daugelyje apšvietimo sričių. Tačiau esant aukštoms maitinimo srovės tankio vertėms puslaidininkiniai šviestukai patiria našumo kryti, todėl nėra itin tinkami taikymams, reikalaujantiems didelio išėjimo galios tankio, pvz. kryptiniam apšvietimui, automobilių žibintams ir pan. Tokiose srityse kur kas pranašesni lazeriniai diodai (LD) [1], kurie jau sėkmingai taikomi kai kurių modelių automobilių žibintuose. Bet čia atsiranda kitų problemų – norint išgauti baltą šviesą kietakūniuose šviesos šaltiniuose naudojami konversijos fosfore šviesos keitikliai, kurie, žadinami intensyvia lazerio spinduliuote, pernelyg įkaista ir yra pažeidžiami. Tai ypač aktualu silikoniniams šviesos keitikliams, kadangi dėl mažo silikono šiluminio laidumo perteklinė šiluma negali būti nuvedama [2].

Silikoninių šviesos keitiklių žadinimo galios tankį galima padidinti pagerinus jų šiluminį laidumą. Tai galima atlikti sumaišius silikoną su šviesai skaidriomis ar ją atspindinčiomis bei dideliu šiluminiu laidumu pasižyminčiomis dalelėmis. Šiame darbe nagrinėjama heksagoninio boro nitrido (hBN) mikrodalelių įtaka silikoninių-fosforinių keitiklių šiluminiam laidumui, fotoliuminescencijos intensyvumui, kvantinei išeigai, spalvinėms savybėms bei optinės išėjimo galios priklausomybei nuo žadinančio lazerio spinduliuotės galios tankio [3]. Siekiant įvertinti hBN įtaką minėtoms savybėms, tyrimas atliekamas su dviem skirtingų tipų fosforais: sparčiu temperatūriniu fotoliuminescencijos gesimu pasižyminčiu Eu^{2+} legiruotu chalkogenidu, bei itin stabiliu ir plačiai naudojamu Ce^{3+} legiruotu itrio aliuminio granatu (YAG:Ce). Rezultatai parodė, kad panaudojant hBN miltelius, silikono šiluminis laidumas gali būti padidinamas iki penkių kartų. Dėl šios priežasties keitikliai su hBN gali ištverti didesnes žadinimo galias – tai puikiai iliustruoja 1 pav. Čia oranžinė kreivė vaizduoja įprasto 15 wt% silikoninio YAG:Ce keitiklio optinės išėjimo galios priklausomybę nuo žadinančio lazerio (λ_{exc} = 442 nm) spinduliuotės galios tankio, o žalia kreivė 15 wt% YAG:Ce keitiklio su 30 wt% hBN milteliais optinės galios priklausomybę. Oranžinė liepsna žymi žadinimio galią, kuomet bandinys pažeidžiamas. Sveikas YAG:Ce + hBN bandinys pavaizduotas viršutinėje nuotraukoje, o pažeistas YAG:Ce – apatinėje. Iš grafiko galime matyti, kad keitiklis su hBN dalelėmis ištveria didesnes žadinimo galias ir juo galime pasiekti daugiau negu pusantro karto aukštesnę maksimalią optinę išėjimo galią. Tyrimai taip pat atskleidė, kad, papildžius silikoninius šviesos keitiklius hBN milteliais, stabilesnis išlieka ir jų spinduliuojamos šviesos spalvis bei santykinis šviesinis veiksmingumas.

Konferencijoje pristatomi rezultatai parodo, kad hBN dalelės puikiai tinka siekiant pagerinti lazeriniuose dioduose naudojamų silikoninių-fosforinių šviesos keitiklių šilumines savybes, stabilizuoti jų fotoliuminescencijos spektrų spalvines charakteristikas bei padidinti optinę išėjimo galią.



1 pav. Kairėje: optinės išėjimo galios priklausomybė nuo žadinančios spinduliuotės galios tankio įprastame YAG:Ce keitiklyje (oranžinė) ir keitiklyje su 30 wt% hBN (žalia); liepsna žymi žadinimo galią, kuomet bandinys pažeidžiamas; Dešinėje: viršutinė nuotrauka vaizduoja nepažeistą, apatinė – pažeistą bandinį

Reikšminiai žodžiai: fotoliuminescencija, lazeriniai diodai, fosforai, šiluminis laidumas.

Literatūra

[1] J. Piprek, Appl. Phys. Lett. **109**, 021104 (2015).
[2] Cozzan, C. et al., Monolithic translucent BaMgAl10O17:Eu2+ phosphors for laser-driven solid state lighting. AIP Adv. **6**, 105005 (2016).
[3] A. Zabiliūtė-Karaliūnė, J. Aglinskaitė, and P. Vitta, Sci. Rep. **11**, 6755 (2021).

Aukštos optinės kokybės GaAsBi/GaAs kvantinių duobių fotoliuminescencijos tyrimas

Photoluminescence study of high optical quality GaAsBi/GaAs quantum wells

Evelina Dudutienė[1], Algirdas Jasinskas[1], Bronislovas Čechavičius[1], Sandra Stanionytė[1], Martynas Skapas[1], Dominykas Sanda[1], Monika Jokubauskaitė[1], Joshya Shyamala Rajagopal[1,2], Helene Carrere [1,2], Renata Butkutė[1], Gintaras Valušis[1]

[1]Center for physical sciences and technology, Saulėtekio av. 3,10257 Vilnius
[2]LPCNO, Institut National Des Sciences Appliquées, de Rangueil av. 135, 31077 Toulouse, France
evelina.dudutiene@ftmc.lt

Bismide-based material systems are an attractive candidate to develop GaAs-platform applications for long wavelength optoelectronics, such as infrared lasers [1], photodetectors [2], solar cells [3], terahertz devices [4] etc. This is mainly due to the large band gap reduction possible with incorporation of small amounts of Bi, relatively temperature insensitive band gap, high electron mobility, and the large spin–orbit splitting. In order, to design and optimize GaAsBi-based devices it is essential to know their optical properties, electronic structure, nature of defects, the emission channels, and the efficiency of carrier recombination. In recent years, luminescent properties of GaAsBi quantum wells (QW) are extensively studied. However, the exploitation of those GaAsBi heterostructures has been hampered by the practical difficulties of growing GaAsBi quantum wells with high emission at room temperature (RT).

This work presents temperature-dependent photoluminescence (PL) study of three GaAsBi/GaAs multi-quantum wells (MQW) structures (samples: B862, B871 and B905) grown by molecular beam epitaxy. Carrier recombination in GaAsBi/GaAs MQW were investigated by time-resolved photoluminescence spectroscopy (TRPL) at room temperature (see 1 fig. (a)).

All three MQW structures exhibit exceptionally high room temperature emission intensity. The RT PL spectra dependences on photoexcitation power exhibit a linear behavior. The slopes estimated by fitting the experimental data with the power law $I_{\mathrm{PL}} \propto P_{\mathrm{exc}}^{m}$, are $m = 1.25$, $m = 1.24$ and $m = 1.08$ for the samples B862, B871 and B905, respectively. The index m value around 1 indicates that radiative recombination is dominant even at room temperature. However, RT PL decay times for three investigated structures are different: 52 – 196 ps (B862), 50 – 90 ps (B871) and 200 – 400 ps (B905). Also, temperature-dependent PL measurements showed that all three structures have different temperature dependencies of PL band position. PL peak position versus temperature was analyzed using combined Varshni–Eliseev equations [5]. S-shape character of PL peak position variation with temperature of sample B905 (see 1 fig. (b)) with parameter $\sigma = 24.65 \pm 1.19$ meV indicates effect of carrier localization. That corelates well with longer PL decay time for sample B905. As further matter, activation energies derived from PL measurements together with numerical calculations provided an in-sight into thermal quenching processes of the luminescence intensity.

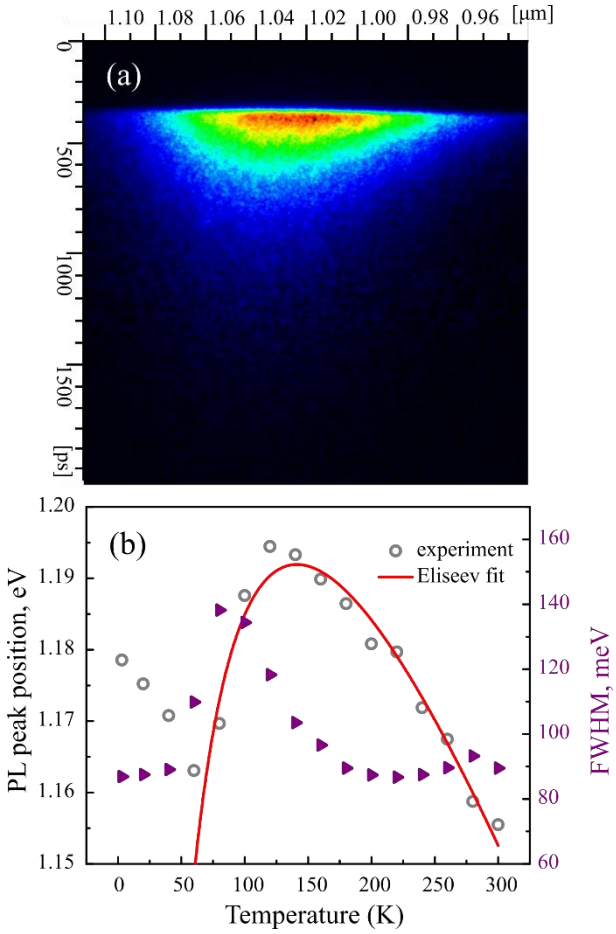


Fig. 1. Streak camera image of temporal decay of the PL of GaAsBi/GaAs MQW at room temperature (a); The energy of GaAsBi/GaAs MQW PL maximum and FWHM as the function of temperature (b).

Keywords: bismide, quantum well, decay time, photoluminescence, carrier localization.

Literature

[1]X. Wu, W. Pan, Z. Zhang, Y. Li, C. Cao, J. Liu, ... & S. Wang, ACS Photonics, **4**(6), 1322-1326 (2017).
[2]Y. Gu, R. D. Richards, J. P. David, and Y. Zhang, *Bismuth-Containing Alloys and Nanostructures*, p. 299-318,(Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2019).
[3]A. Muhammetgulyyev, O. G. Erbas, B. Kinaci, O. Donmez, Y. G. Celebi and A. Erol; Semicond. Sci. Technol., **34**(8) 085001 (2019)
[4] M. Karaliūnas, A. Udal and G. Valušis; Lith. J. Phys. **60**(2) 113-124 (2020).
[5]] P. G. Eliseev, P. Perlin, J. Lee, and M. Osiński, Appl. Phys. Lett. **71**(5), 569–571 (1997).

Balistinių fotosrovių sukelta terahercinių impulsų emisija iš puslaidininkinių heterosandūrų

Terahertz Pulse Emission from Semiconductor Heterostructures Caused by Ballistic Photocurrents

Ričardas Norkus [1], Vitaly Leonidovich Malevich [2,3], Pavel Aliaksandravich Ziaziulia [4], Vaidas Pačebutas [1], Ignas Nevinskas [1] and Arūnas Krotkus [1]
[1]Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania;
[2]Stepanov Institute of Physics, National Academy of Science, Nezavisimosti Avenue 68, 220072 Minsk, Belarus;
[3] Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Browki Str., 6 220013 Minsk, Belarus;
[4]Belarusian State University, Nezavisimosti avenue 4, 220030 Minsk, Belarus.

ricardas.norkus@ftmc.lt

When photoexcited by femtosecond optical pulses, most materials emit ultrashort pulses of electromagnetic radiation containing frequencies at the terahertz (THz) frequency range. THz pulse emission has been observed from semiconductors, dielectric crystals, metals, and even from gases, and liquids. This universal effect became an effective and popular tool for a contact-less investigation of various materials. THz emission spectroscopy (TES) can determine important parameters of the material band structure – direct band gap and subisdiary conduction band valley position. Determination of subsidiary valley position was well studied for A3B5 semiconductors like InAs, GaAs and InSb [1].

During the first few hundreds of femtoseconds, when the dipole is developing, the photoexcited electrons in narrow-gap A3B5 semiconductors are moving ballistically [2] over the distances reaching several hundred nanometers. Hz emission due to ballistic photoexcited electron propagation has been exploited for the measurements of conduction band offsets in GaAsBi/GaAs heterojunction [3]. Where onset of THz generation shows energy when carriers can overcome the heterojunction barrier. This is achieved when the lower bandgap material is thin enough and emission is very low when carriers are confined in that layer.

In this work Terahertz radiation pulses emitted after exciting semiconductor heterostructures from the substrate side by femtosecond optical pulses were used to determine the electron energy band offsets between different constituent materials. It has been shown that when the photon energy is sufficient enough to excite electrons in the narrower bandgap layer with an energy greater than the conduction band offset, the terahertz pulse changes its polarity (fig. 1). Theoretical analysis performed both analytically and by numerical Monte Carlo simulation has shown that the polarity inversion is caused by the electrons that are excited in the narrow bandgap layer with energies sufficient to surmount the band offset with the wide bandgap substrate [4]. This effect is used to evaluate the energy band offsets in GaInAs/InP and GaInAsBi/InP heterostructures.

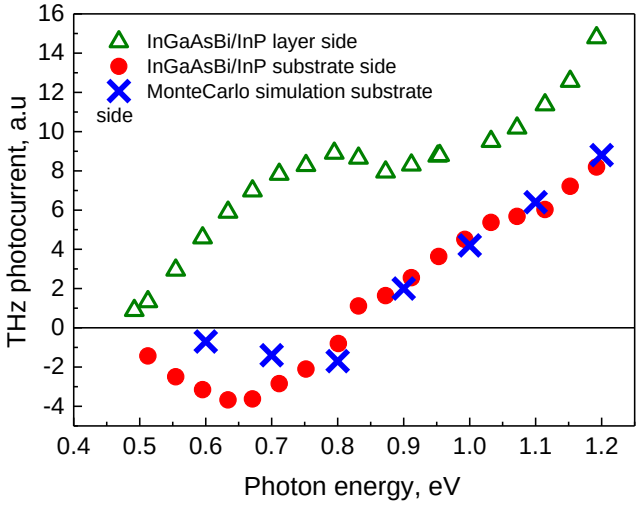


Fig. 1 THz excitation spectra of and GaInAsBi/InP heterostructure sample measured for cases of the layer-side photoexcitation (empty green triangles) and the substrate-side photoexcitation (full red circles). Blue crosses show the Monte Carlo simulation results.

Reikšminiai žodžiai: THz, THz emission spectroscopy, heterostructure, InGaAsBi/InP offset, Ballistic carrier excitation

Literatūra

[1] A. Arlauskas and A. Krotkus, “THz excitation spectra of AIIIBV semiconductors,” Semicond. Sci. Technol. 27, 115015 (2012).
[2] P Malevich, V.L.; Ziaziulia, P.A.; Adomavičius, R.; Krotkus, A.; Malevich, Y.V. Terahertz emission from cubic semiconductor induced by a transient anisotropic photocurrent. J. Appl. Phys. 2012, 112, 073115
[3] Karpus, V.; Norkus, R.; Čechavičius, B.; Krotkus, A. THz-excitation spectroscopy technique for band-offset determination. Opt. Express 2018, 26, 33807–33817
[4] Malevich, V.L.; Ziaziulia, P.A.; Norkus, R.; Pačebutas, V.; Nevinskas, I.; Krotkus, A. Terahertz Pulse Emission from Semiconductor Heterostructures Caused by Ballistic Photocurrents. Sensors, 21, 4067 (2021)

Raudonai fluorescuojantis klampai jautrus BODIPY fluoroforas

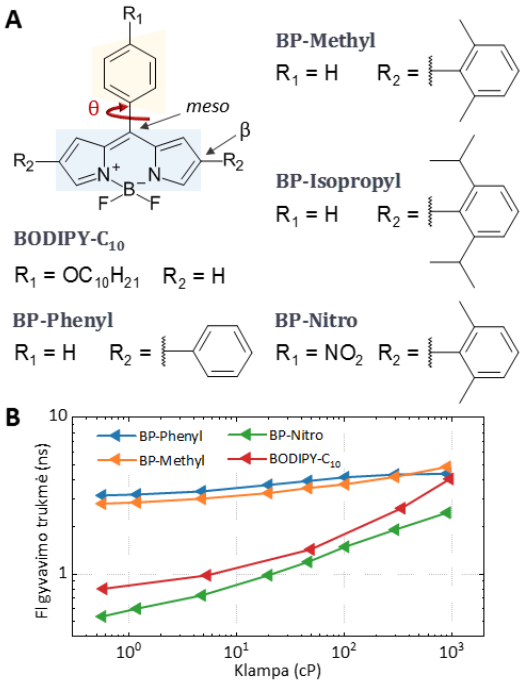
Red-fluorescing viscosity sensitive BODIPY-based fluorophore

Karolina Maleckaitė[1], Jelena Dodonova[2], Stepas Toliautas[3], Rugilė Žilėnaitė[1], Džiugas Jurgutis[4], Vitalijus Karabanovas[4,5], Sigitas Tumkevičius[2], Aurimas Vyšniauskas[1]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, Vilnius, LT-10257, Lietuva.
[2] Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Naugarduko g. 24, Vilnius, LT-03225, Lietuva
[3] Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9-III, 10222 Vilnius, Lietuva
[4] Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius, Lietuva
[5] Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva
karolina.maleckaite@ftmc.lt

Mikroklampos vaizdinimas mikroskopiniame mąstelyje gali atskleisti informaciją apie difuzijos veikiamus procesus biologinėse sistemose. Mikroklampos pokyčio stebėjimas gali parodyti aterosklerozės, diabeto ir Alzhaimerio ligų vystymąsi.[1] Molekuliniai rotoriai – tai mikroklampai jautrūs fluoroforai, kurie naudojami mikroklampos vaizdinimui polimeruose, gyvose ląstelėse ir lipidinėse membranose.[1] Molekulinių rotorių veikimas pagrįstas fluorescencijos (FL) ir nespindulinės relaksacijos konkurencija, kurią lemia vidujmolekulinė rotacija. Molekulės rotacija pakeičia elektroniškai sužadintą būseną ir lemia greitesnę nespindulinę relaksaciją, tad klampioje terpėje stebima ilgesnė FL gyvavimo trukmė.[2]

Vienas iš populiariausių molekulinių rotorių BODIPY-C_{10} išsiskiria monoeksponentine FL gesimo kinetika, kuri supaprastina duomenų analizę. Didžiausias BODIPY-C_{10} trūkumas: sugertis ir FL žalioje spektro dalyje. Biologiniams tyrimams reikalingos raudonos FL molekulės, kurios leistų išvengti autofluorescencijos ir FL persidengimo su kitais žymekliais.[3] Ilgesnių bangų ilgius galima pasiekti prie fluoroforo prijungiant pakaitus, kurie leidžia praplėsti visos molekulės konjugaciją.[4] Tačiau privalome užtikrinti, kad nauji, raudonai šviečiantys BODIPY junginiai išliks jautrūs mikroklampai.

Tyrimas atskleidžia, kaip tankio funkcionalo teorijos (angl. *density functional theory*, DFT) skaičiavimai leidžia nuspėti molekulės jautrumą mikroklampai lemiančias savybes prieš fluoroforo sintezę. Šiame darbe nagrinėjami keturi BODIPY molekuliniai rotoriai su fenilo grupės pakaitais (1A pav.). Tyrimas sudarytas iš DFT skaičiavimų, sugerties ir FL spektrų analizės, FL gyvavimo trukmės įvertinimo ir gyvų ląstelių vaizdinimo naudojant liposomas. Išnagrinėtos priklausomybės nuo molekulinės struktūros, aktyvacijos energijos barjero, tirpiklio klampos, poliškumo ir temperatūros. DFT skaičiavimai parodė, kad FL spektro poslinkis į raudoną pusę lemia aktyvacijos energijos padidėjimą. Taip pat, šie skaičiavimai leido mums sukurti raudonos FL jutiklį su prijungta nitro grupe, kuri sumažina barjerą ir padidina molekulės jautrumą mikroklampai (1B pav).[5]



1 pav. (A) Tyrime naudoti molekuliniai rotoriai: populiariausias (BODIPY-C_{10}) bei nauji junginiai be papildomų pakaitų ant β-fenilo (BP-Phenyl), su dviem metilo grupės (BP-Methyl) arba izopropilo grupės (BP-Isopropyl) pakaitais ant kiekvieno β-fenilo, su metilo grupės pakaitais ant β-fenilo ir nitro grupės pakaitu ant *meso*-fenilo (BP-Nitro). (B) Tirtų fluoroforų FL gyvavimo trukmės priklausomybė nuo mikroklampos tolueno-ricinos mišiniuose.

Reikšminiai žodžiai: molekuliniai rotoriai, BODIPY, mikroklampa, tankio funkcionalo teorija.

Literatūra

[1] M. K. Kuimova, Physical Chemistry Chemical Physics, 2012, 14, 12671–12686.
[2] M. A. Haidekker and E. A. Theodorakis, Organic and Biomolecular Chemistry, 2007, 5, 1669–1678.
[3] R. Weissleder, Nature Biotechnology, 2001, 19, 4, 316-317.
[4] D. Zhang et al., Physical Chemistry Chemical Physics, 2011, 13, 13026–13033.
[5] S. Toliautas et al., Chemistry – A European Journal, 2019, 25, 10342–10349.

1 mJ, 10 W, 10 kHz subpikosekundinis hibridinis lazeris

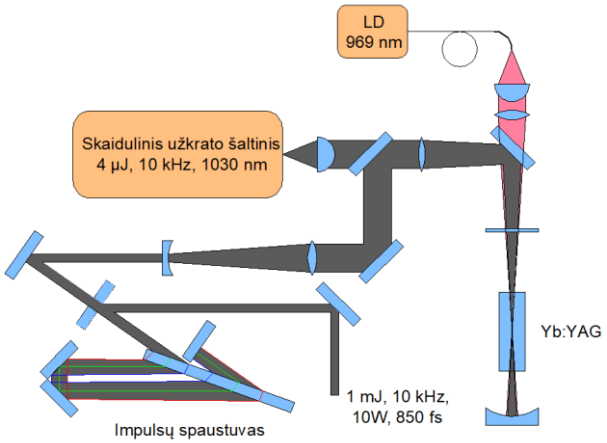
1 mJ, 10W, 10 kHz subpicosecond hybrid laser

Aivaras Kazakevičius[1,2], Audrius Zaukevičius[2], Rokas Danilevičius[2], 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 palyginti mažo dažnio pikosekundiniai lazeriai yra daugiausia pritaikomi moksle – atliekant įvairius fizikinius tyrimus. Tokie lazeriai daugiausiai naudojami itin didelės energijos kelių optinių ciklų lazerinių OPCPA sistemų kaupinimui [1]. Šiems lazeriams svarbiausia pasiekti kuo didesnę išvadinę impulso energiją išlaikant gerus spinduliuotės erdvinius ir laikinius parametrus. Iš kitos pusės, moksliniams tyrimams taip pat svarbus ir didesnis impulsų pasikartojimo dažnis, leidžiantis greičiau rinkti eksperimentų duomenis, pasiekti geresnį signalo ir triukšmo santykį bei registruoti įvykius, kurių statistinė tikimybė yra maža. Galiausiai, didesnis impulsų pasikartojimo dažnis taip pat leistų panaudoti didelės energijos lazerius medžiagų apdirbime.

Siekiant kuo didesnės lazerių impulso energijos bei vidutinės galios, sistemos dizainą riboja ne tik optinis pramušimas, bet ir Kero, elektroninio lęšio bei terminio lęšio efektai, pluošto depoliarizacija stiprintuve. Be to, didinant impulsų energiją surenkama vis daugiau netiesinės fazės. Visi šie reiškiniai riboja ne tik maksimalią lazerinės sistemos išvadinę impulso energiją, bet ir gadina pluošto parametrus. Hibridinis (skaidulinis lazeris naudojamas kartu su laisvos erdvės stiprintuvu) sistemos dizainas leidžia pasiekti aukštą mJ eilės impulsų energiją išnaudojant abiejų tipų lazerių privalumus: kompaktiškumą, gerą stabilumą ir patikimumą bei galimybę pasiekti didelę energiją [2].

Šiame darbe pristatomas hibridinis 1 mJ, 10 kHz, 850 fs lazeris paremtas čirpuotų impulsų stiprinimo technologija. Pagrindinės sistemos dalys: skaidulinis užkrato šaltinis, dviejų lėkių tiesinis laisvos erdvės Yb:YAG stiprintuvas ir keturių lėkių gardelinis impulsų spaustuvas.



1 pav. Lazerinės sistemos principinė schema.

Užkrato pluošto parametrai formuojami skaidulinėje lazerinės sistemos dalyje dviem pagrindiniais etapais. Pirmiausia, iš skaidulinio osciliatoriaus gaunamų impulsų spektras yra plečiams pasyvioje skaiduloje, o impulso trukmė didinama panaudojant čirpuotą skaidulinę Brego gardelę. Taip suformuojami 1030 nm centrinio bangos ilgio, apie 240 ps trukmės ir 4 nm spektro pločio impulsai. Toliau lazerio spinduliuotė yra stiprinama iki 4 µJ impulso energijos skaiduliniuose stiprintuvuose ir sumažinamas impulsų pasikartojimo dažnis iki 10 kHz panaudojant skaidulinį akustooptinį moduliatorių (AOM). Vėliau užkrato šaltinio spinduliuotė yra stiprinama tiesiniame dviejų lėkių laisvos erdvės Yb:YAG stiprintuve kaupinimui panaudojant 969 nm bangos ilgio nuolatinės veikos 140 W maksimalios galios lazerinį diodą. Užkrato ir kaupinimo pluoštai yra fokusuojami ir perklojami kristale. Šiame stiprintuve užkrato impulsai pasitiprinami ≈ 275 kartus iki 1,1 mJ energijos. Dėl siauros Yb:YAG stiprinimo juostos lazerio impulsų spektras siaurėja iki ≈ 2,2 nm. Sustiprinta spinduliuotė iš stiprintuvo išvedama panaudojant poliarizatoriaus ir λ/4 fazinės plokštelės porą. Galiausiai spinduliuotė nukreipiama į impulsų spaustuvą, kurio dispersija (iki ketvirtos eilės) yra suderinta su skaidulinio impulsų plėstuvo dispersija. Sistemos išėjime pasiekta 1 mJ impulsų energija (10W, 10 kHz), artima idealiai pluošto kokybė (M^2 ≈ 1,03) bei 850 fs impulso trukmė. Lazerio impulsų energijos stabilumas ≈ 0,2%.

Reikšminiai žodžiai: hibridinis lazeris, skaidulinis užkrato šaltinis, dviejų lėkių laisvos erdvės stiprintuvas, čirpuotų impulsų stiprinimas, impulsų energija, impulsų energijos stabilumas, impulsų pasikartojimo dažnis, iterbiu legiruotas itrio aliuminio granatas.

Literatūra

[1] C. Lai et al, Opt., **17**, 094009 (2015).
[2] P. Mackonis, A. M. Rodin, Opt. Express, **28,** 1261 (2020).

Modos mikrolustiniame lazeryje

Modes in microchip laser

Matas Plūkys[1,2] , Eugenijus Gaižauskas[1,2] , Darius Gailevičius[1,2], Kęstutis Staliūnas[1,2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, Vilnius 10222
[2]Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 9, III rūmai, Vilnius 10222
matas.plukys@ff.vu.lt

Mikrolustinio lazerio modų susidarymą nulemia elektromagnetinio pluošto fazės ir amplitudės moduliacija aktyviojoje terpėje [1,2]. Šio tipo modos skiriasi nuo klasikinio rezonatoriaus [3]. Modų skirtumą lemia mikrolustinio lazerio plokšti veidrodžiai ir amplitudinė moduliacija.

Elektrinio lauko pasiskirstymą *A(r,θ)* mikrolustiniame rezonatoriuje nagrinėjame kliaudamiesi (1) lygtimi cilindrinėje koordinatų sistemoje:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\rho A + id\nabla_{\perp}\mathrm{A} + i\alpha(r)A + \gamma(r)A \qquad (1)$$

Lygtis (1) yra sunormuota į vieno lėkio rezonatoriuje trukmę. Koeficientas ρ žymi nuostolius, atsirandančius rezonatoriuje per vieną lėkį. Į difrakcijos koeficiento išraišką $d = \frac{L\lambda}{2\pi}$ patenka rezonatoriaus ilgis L ir bangos ilgis λ. Per vieną lėkio trukmę pluoštas patiria fazinę $i\alpha(r)$ ir amplitudinę $\gamma(r)$ moduliacijas, kurios priklauso tik nuo radialinės dalies.

Lygtyje (1) atskiriami kintamieji:

$$A(r,\theta) = A_m e^{\lambda t}\mathrm{v}(r)\omega(\theta) \qquad (2)$$

$$\frac{\partial^2\omega}{\partial\theta^2} = -\omega m^2 \qquad (3)$$

$$r^2\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + r\frac{\partial v}{\partial r} + r^2 v\left(\frac{i\alpha(r)+\gamma(r)-\lambda-\rho}{id}\right) - m^2 v = 0 \qquad (4)$$

Laikome, kad stiprinimo ir fazinės moduliacijos profiliai yra cilindro formos:

$$\gamma(r) = \begin{cases} G_0, \text{kai } r < R \\ 0, \text{ kai } r > R \end{cases} \qquad (5)$$

$$\alpha(r) = \begin{cases} A_0, \text{kai } r < R \\ 0, \text{ kai } r > R \end{cases} \qquad (6)$$

Sunormuojame radialinę koordinatę į cilindro radiusą $\xi=r/R$ ir pažymime $\alpha^2 = R^2\frac{iA_0+G_0-\lambda-\rho}{id}$, $\beta^2 = R^2\frac{\lambda+\rho}{id}$, lygtis (4) tampa:

$$\begin{cases} \xi^2\frac{\partial^2 v}{\partial\xi^2} + r\frac{\partial v}{\partial\xi} + \xi^2 v\alpha^2 - m^2 v = 0, \text{ kai } \xi < 1 \\ \xi^2\frac{\partial^2 v}{\partial\xi^2} + r\frac{\partial v}{\partial\xi} - \xi^2 v\alpha^2 - m^2 v = 0, \text{ kai } \xi > 1 \end{cases} \qquad (7)$$

Įvedame naują koeficientą ζ, žymintį potencialo barjero aukštį:

$$\alpha^2 + \beta^2 = \zeta^2 \qquad (8)$$

Lygties (7) sprendiniai yra pirmos ir antros eilės Beselio funkcijos (9). Funkcijos potencialinėje duobėje turi būti baigtinės, o už duobės artėti į 0, kai $\xi\to\infty$.

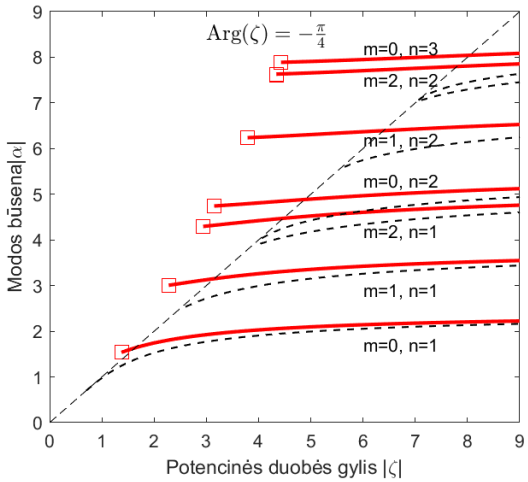
$$\begin{cases} v_m(\xi) = A_m J_m(\alpha_m\xi), \text{ kai } \xi < 1 \\ v_m(\xi) = A_m\frac{J_m(\alpha_m)}{K_m(\beta_m)}K_m(\beta_m\xi), \text{ kai } \xi < 1 \end{cases} \qquad (9)$$

Koeficientai α_m ir β_m randami iš transcendentinės lygties:

$$\frac{a_m J_{m-1}(\alpha_m)}{J_m(\alpha_m)} = \frac{\beta_m K_{m-1}(\beta_m)}{K_m(\alpha\beta_m)} \qquad (10)$$

Potencialinis barjeras $\zeta = R\sqrt{\frac{A_0}{d} - i\frac{G_0}{d}}$ yra kompleksinis. Jo fazę lemia realus ir teigiamas G_0 bei realus, bet nebūtinai teigiamas A_0.

Jeigu fazinės moduliacijos (termolęšio) nėra, $A_0 = 0$, tada $\arg(\zeta) = -\pi/4$. Šiuo atveju tik amplitudinė moduliacija ir difrakcija lemia pluošto formavimąsi. Didinant potencialinį barjerą $|\zeta|$, formuojasi vis aukštesnės eilės modos, kurių būsenos atvaizduotos 1 pav. Modų eilę žymi parametrai m ir n, atsirandantys iš lygties (3) bei Beselio funkcijos minimumų lygtyje (10).



1 pav. Modų atsiradimas ir jų būsenos kitimas, didinant potencialinį barjerą $|\zeta|$

Reikšminiai žodžiai: mikrolustinis lazeris, modos, termolęšis, amplitudinė moduliacija.

Literatūra

[1] N. J. van Druten, Observation of transverse modes in a microchip laser with combined gain and index guiding, J. Opt. Soc.Am. B **18**(12), 1793-1804 (2001).
[2] S. Longhi, Theory of transverse modes in end-pumped microchip lasers, J. Opt. Soc. Am. B **11**(6),1098-1107 (1993).
[3] H. Kkogelnik, T. Li, Laser Beams and Resonators, Applied Optics **5**(10), 1550-1567 (1966).

3D lazerinė litografija: priklausomybė nuo bangos ilgio

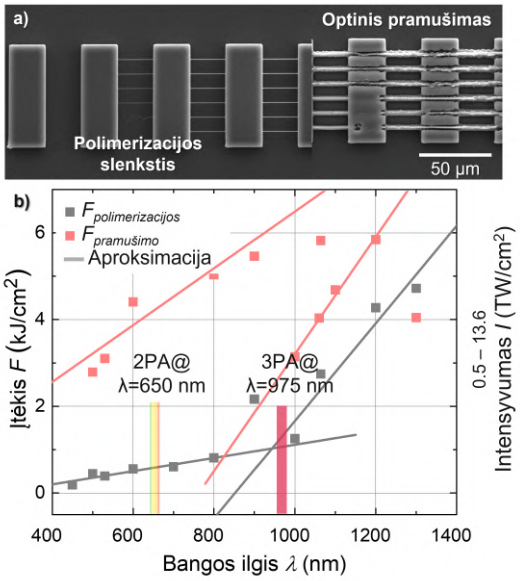
3D laser lithography: dependence on laser irradiation wavelength

Edvinas Skliutas[1], Danielius Samsonas[2], Lukas Kontenis[2], Laura Sebestinaitė[1], Salvijus Ulevičius[1], Mikas Vengris[1], Mangirdas Malinauskas[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
[2]Light Conversion, Keramikų g. 2B, LT-10234 Vilnius
edvinas.skliutas@ff.vu.lt

Trimatė lazerinė litografija (3DLL) – tai adityvios gamybos technologija, žinoma ir plėtojama jau trisdešimt metų. Per tą laiką buvo pademonstruotos 3DLL galimybės: nuo pačių elementariausių dvimačių ir trimačių objektų formavimo – geometrinių figūrų, gardelių, realių daiktų miniatiūrų [1] ir t. t., iki ištobulintų funkcinių elementų ar įtaisų: implantų audinių inžinerijai [2], elementų kontroliuoti cheminių medžiagų judėjimui mikrokanaluose [3], mikrooptikos komponentų [4], difrakcinių optinių elementų [5], programuojamų medžiagų [6] ir metamedžiagų [7] bei fotoninių elementų [8]. Nepaisant technologijos pasisekimo industriniame pasaulyje, ji vis dar slepia neišaiškintų mokslui įdomių procesų, dėl kurių verda karštos diskusijos. Vienas aktualiausių klausimų – kokie cheminės reakcijos sužadinimo mechanizmai dominuoja esant tam tikroms lazerinės spinduliuotės parametrams. Suprantama, kad priklausomai nuo medžiagos sugerties spektro ir į ją krintančios spinduliuotės bangos ilgio (λ), galima realizuoti vienfotonę, dvifotonę ar daugiafotonę sugertį ar net griūtinę jonizaciją.

Šiame darbe bus pristatytas tyrimas, kaip kinta polimerizacijos sužadinimo ir optinio pramušimo slenksčiai priklausomai nuo lazerinės spinduliuotės λ. Eksperimentui atlikti buvo naudojama optinio parametrinio stiprinimo sistema CRONUS-3P, kurią sudarė CARBIDE lazeris (1030 nm, 1 MHz, 40 W) ir I-OPA optinis parametrinis stiprintuvas, kuriuo buvo derinamas λ pasirinktame 400-1300 nm intervale. Integruotas grupinio vėlinimo dispersijos valdymas leido kontroliuoti impulso trukmę. Zeiss Plan-Apochromat 100x 1,4 skaitinės apertūros imersinis objektyvas buvo naudojamas spinduliuotei įvesti į bandinį. Objektų gamyba buvo atliekama judinant bandinį erdvėje PI NanoCube pjezoelektriniais stalais. 3DLL bendruomenėje paplitęs standartinis neigiamas prepolimeras SZ2080^{TM} buvo pasirinktas Raiškos tiltų (RT) gamybai. RT metodas yra tinkamas nustatyti polimerizacijos ir optinio pažeidimo slenksčius formuojant pavienias linijas tarp suformuotų kolonų. Linijos buvo formuojamos keičiant lazerinės spinduliuotės intensyvumą nuo minimalios vertės iki tos, kuomet per mikroskopo kamerą būdavo užfiksuojamas aiškus linijų sproginėjimas – optinis pažeidimas. Toliau bandinys būdavo paruošiamas analizei skenuojančiuoju elektronų mikroskopu (SEM), kurios metu būdavo nustatoma, ties kokia intensyvumo verte padaroma pirmoji linija, ir ties kuria pramušama, ir kaip kinta linijų storis bei aukštis tarp šių dviejų slenksčių (1 pav. a)).

Šiuo eksperimentu siekiama pademonstruoti skirtingus sugerties režimus (1 pav. b)) ir jų poveikį polimerizacijos reakcijai, o tai papildytų vyraujantį supratimą apie šviesos ir medžiagos sąveikos mechanizmus ir jų įtaką erdvinei raiškai, tikslumui, gamybos našumui ir atkartojamumui 3DLL technologijoje.



1 pav. Trimatė lazerinė litografija. a) – raiškos tiltų SEM nuotraukų koliažas, kuriame vaizduojami polimerizacijos ir optinio pramušimo slenksčiai. b) – įtėkio, reikalingo sužadinti polimerizaciją ir sukelti optinį pramušimą fotojautrintame SZ2080^{TM} prepolimere, priklausomybė nuo bangos ilgio.

Reikšminiai žodžiai: trimatė lazerinė litografija, dvi/daugia-fotonė sugertis, šviesos-medžiagos sąveika, CRONUS-3P, SZ2080^{TM}, impulso trukmė

Literatūra

[1] A. K. Yetisen, A. F. Coskun , G. England, et al., Adv. Mat., **28**, 1724-1742 (2016).
[2] J. Maciulaitis, S. Rekštytė, M. Bratchikov, et al., Appl. Surf. Sci., **487**, 692-702 (2019).
[3] D. Wu, L. G. Niu, S. Z. Wu, et al., Lab Chip. **15**(6), 1515-23 (2015).
[4] S. Thiele, K. Arzenbacher, T. Gissibl, et al., Sci. Adv. **3**(2), e1602655 (2017).
[5] E. Harnisch, M. Russew, J. Klein, et al., Opt. Mater. Express **5**(2), 456 (2015).
[6] Y. L. Zhang, Y. Tian, H. Wang, et al., ACS Nano **13**(4), 4041–4048 (2019)
[7] J. Qu, M. Kadic, A. Naber, et al., Sci. Rep., **7**(1), 1-8 (2017).
[8] D. Gailevicius, L. Jonušauskas, D. Sakalauskas, et al., Proc. SPIE, **10115**, 1011511 (2017).

Kūginė terahercų spinduliuotė žadinama bichromatiniais lazerio impulsais oro plazmoje: kūgio kampo įvertinimas

Conical terahertz radiation induced by bichromatic laser pulses in air: estimation of the cone angle

Viktorija Tamulienė, Danas Buožius, Benas Motiejūnas, Virgilijus Vaičaitis
Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
viktorija.tamuliene@ff.vu.lt

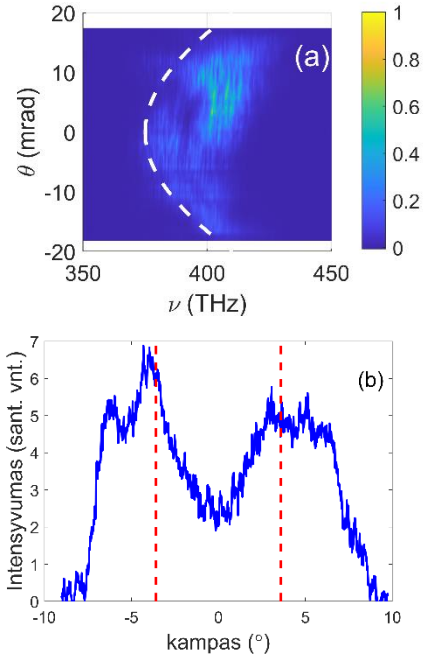
Terahercų spinduliuotės generavimas oro plazmoje, žadinamoje bichromatiniais šviesos impulsais, yra gerai žinomas ir plačiai taikomas būdas. Ti:safyro lazerio 800 nm bangos ilgio spinduliuotė kartu su jos antrąja harmonika fokusuojamos lęšiu ore. Esant ultratrumpiems impulsams, apie 100 fs trukmės, ir pakankamai impulso energijai, apie 1 mJ, lešio židinio aplinkoje stebimas plazmos filamento susidarymas. Kartu stebimi kiti netiesiniai procesai: šviesos savifokusavimas dėl Kerr'o reiškinio, plazmos defokusavimas, aukštesnių harmonikų generacija ir terahercų spinduliavimas. Terahercų generacijos efektyvumas gali būti keičiamas, keičiant vėlinimą tarp kaupinimo impulsų [1].

Tokiu būdu generuojama kūginė terahercų spinduliuotė. Kūgio puskampis paprastai būna 5º. Tokia kampo vertė aiškinama kaip optinio Čerenkovo spinduliavimo rezultatas. Čerenkovo spinduliuotę spinduliuoja plazmos srovė, kurios greitis viršyja šviesos fazinį greitį ties terahercų dažniu. Šiame darbe mes pagrindžiame kitą įdomų pastebėjimą: Čerenkovo formulė kūgio kampui rasti sutampa su X-bangų dispersijos dėsniu terahercų spinduliuotei.

X-bangos yra lokalizuotos struktūros aptinkamos įvairiose fizikos srityse: akustika, elektromagnetizmas, gravitacinės bangos ir kt.. Elektromagnetizme X-bangos sklinda greičiu, viršijančiu šviesos greitį. Tokia banga sudaryta iš bangų vektorių, kurių išilginiai komponentai sklinda vienodu greičiu; sąryšis tarp išilginio bangos vektoriaus ir šviesos dažnio yra tiesinis.

Ankstesniame darbe [2] buvome pastebėję, kad X-bangos, kurios formuojasi trečioje harmonikoje, generuojamoje oro plazmoje (vieno dažnio infraraudonas 1500 nm kaupinimas) aprašoma teoriniu dispersijos dėsniu, kuris gerai atitinka eksperimentinį tik tuomet, kai be daugiafotonės jonizacijos įskaitoma taip pat ir tunelinė plazmos jonizacija. Be to, tiek fundamentinė banga, tiek jos harmonikos pasižymi tuo pačiu X-bangos dispersijos dėsniu – jos sklinda vienodu grupiniu greičiu. Panašų reiškinį pastebime ir šiame darbe: abiejų kaupinimo bangų disperijos dėsniai ir terahercų spinduliuotės disperijos dėsnis (arba Čerenkovo formulė) yra tarpusavio susiję. Nustačius X-bangos grupinį greitį, galima rasti terahercų kūgio kampą, 1 pav..

Be eksperimentinių matavimų taip pat atliktas skaitmeninis modeliavimas, įskaitantis trečios eilės netiesiškumą, plazmos generavimą ir šviesos defokusavimą bei nuostolius plazmos filamente. Plazmos generacijos modelis pritaikytas toks pat kaip [2] darbe: įskaityti daugiafotonės ir tunelinės jonizacijų mechanizmai. Skaitmeniniai rezultatai taip pat parodė sąryšį tarp kaupinimo bangų dispersijos dėsnio ir generuojamos terahercų spinduliuotės kūgio kampo.



1 pav. Eksperimentiškai pamatuoti fundamentinės harmonikos spektras (a) ir terahercų kampinis pasiskirstymas (b). Brūkšninės linijos: X-bangos dispersijos dėsnis (a) ir jį atitinkantis kūgio kampas (b).

Taigi, remiantis eksperimentiniais ir skaitmeninio modeliavimo rezultatais parodėme, kad bichromatiniais impulsais ore generuojamas terahercų kūgis aprašomas X-bangų dispersijos dėsniu. Galima teigti, kad šiuo atveju kaupinimo X-bangos yra objektai judantys didesniu greičiu nei šviesos greitis ir spinduliuojantys terahercų kūgį.

Reikšminiai žodžiai: terahercų spinduliuotė, bichromatinis kaupinimas, plazma.

Literatūra

[1] V. Tamulienė, D. Buožius and V. Vaičaitis, Phys. Rev. A **103**, 033502 (2021).
[2] V. Tamulienė, G. Juškevičiūtė, D. Buožius, V. Vaičaitis, I. Babushkin and U. Morgner, Scientific Reports **10**, 17437 (2020).

Aukšto matmenų santykio 3D stiklinių darinių gamyba selektyvaus lazerinio ėsdinimo technogija

High aspect ratio 3D glass structures fabrication by Selective Laser Etching

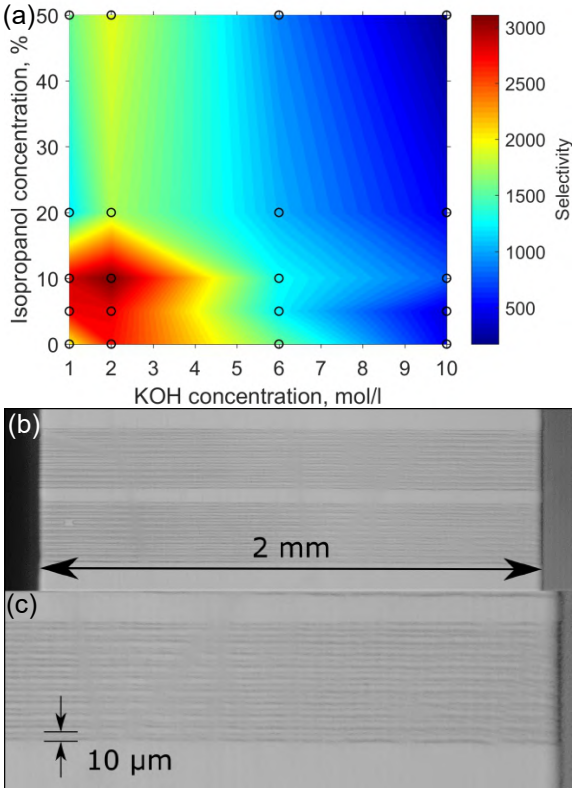
Agnė Butkutė[1,2], Tomas Baravykas[2] , Jokūbas Stančikas[1], Linas Jonušauskas[1,2], Valdas Sirutkaitis[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
[2]Femtika, Saulėtekio al. 10, LT-10224 Vilnius
agne.but.agne@gmail.com

3D stikliniai dariniai gali būti naudojami įvairiose srityse nuo medicininių prietaisų iki optinių komponentų. Stiklas patraukli medžiaga tiek dėl savo optinių, tiek dėl mechaninių savybių. Tačiau ši medžiaga yra gana sunkiai apdirbama ir reikalauja itin delikačių technologijų tam padaryti. Viena iš galimų technologijų apdirbanti stiklą ir formuoti 3D funkcinius darinius yra selektyvus lazerinis ėsdinimas [1].

Medžiagų apdirbimas selektyvus lazerinio ėsdinimo technologija susideda iš kelių procesų. Pirmiausia aukšto intensyvumo femtosekundiniais lazeriniais impulsais medžiagos tūryje įrašomos porėtos modifikacijos, vadinamos nanogardelėmis. Vėliau medžiaga paveikiama agresyviu ėsdikliu, kuriame modifikuoti regionai ėsdinasi daug kartų greičiau nei nemodifikuota medžiaga. Taip suformuojamas 3D stiklinis darinys.

Vienas pagrindinių parametrų vertinant proceso efektyvumą yra selektyvumas, kuris apibrėžiamas kaip modifikuotos ir nemodifikuotos medžiagos ėsdinimosi spartų santykis. Šis dydis apibrėžia didžiausia įmanoma darinio elemento matmenų saktykį. Įvardintas dydis priklauso nuo daugelio faktorių tiek lazerinio apdirbimo metu, tiek ėsdinimo metu. Selektyvumo vertėms įtaką daro spinduliuotės intensyvumas, impulso trukmė, poliarizacija ir kiti parametrai [2], įtaką taip pat daro ėsdiklio pasirinkimas bei ėsdiklio koncentracija ir jo temperatūra [3]. Bene didžiausia lydyto kvarco stikle selektyvumo vertė yra apie 1400[1]. Tačiau kai kurie preciziniai taikymai reikalauja netgi aukštesnių selektyvumo verčių.

Šiame darbe pristatoma technologijos patobulinimai leidžiantys gauti didesnę selektyvumo vertę. Dažniausiai minėtos technologijos ėsdinimo procese naudojama 8-10 mol/l 85-90°C temperatūros kalio šarmo (KOH) tirpalas. Tačiau nėra daug duomenų apie gaunamus rezultatus ėsdinant žemesnių koncentracijų tirpalais. Taip pat, siekiant padidinti selektyvumo vertę Kalio šarmo tirpalui ruošti buvo panaudojamas ne tik vanduo, bet ir vandens izopropanolio mišinys, kas leidžia padidinti drėkinimą bei tikėtina leidžia padidinti ir selektyvumo vertę. Taigi buvo ištirta tiek skirtingų koncentracijų KOH tirpalo panaudojimas, tiek ėsdiklio skiedimas izopropanoliu. Gauti ėsdinimo rezultatai varijuojant ėsdiklio savybes pademonstruoti spalvinėje diagramoje (1pav.). Ėsdiklio koncentracijos mažinimas ir maišymas su nedideliu kiekiu izopropanolio (5-20%) leidžia padidinti selektyvumo vertes iki maždaug 3000. Paminėti proceso patobulinimai atveria galimybes vis sudėtingesnių ir tikslesnių darinių gamybai, tokiems kaip itin tikslios kanalų sistemos kaip pademonstruota 1 pav. (b) ir (c) dalyse.



1 pav. (a) selektyvumo priklausomybė nuo kalio šarmo ir izopropanolio koncentracijos kalio šarmo tirpale, (b) ir (c) aukšto matemų santykio kanalai stiklo tūryje

Reikšminiai žodžiai: lazerinis mikroapdirbimas, 3D dariniai, stiklo apdirbimas

Literatūra

[1] [1] J. Gottmann, M. Hermans, N. Repiev, J. Ortmann, Selective laser-induced etching of 3D precision quartz glass components for microfluidic applications - up-scaling of complexity and speed, Micromachines **8**(4), 110 (2017).
[2] C. A. Ross, D. G. Maclachan, D. Choudrury, R. R. Thomson, Optimisation of ultrafast laser assisted etching in fused silica, Opt. Express **26**(19), 24343 - 24356 (2018).
[3] S. Butkus, M. Rickus, R. Sirutkaitis, D. Paipulas, V. Sirutkaitis, Fabrication of high aspect ratio channels in fused silica using femtosecond pulses and chemical etching at different conditions, J. Laser Micro. Nanoen. **14**(1), 19 - 24 (2019).

STENDINIAI PRANEŠIMAI

Astrofizika, astronomija ir kosmologija **P1-P4**
Biofizika ir medicinos fizika **P5-P24/1**
Cheminė fizika ir technologiniai taikymai **P25-P42**
Elementariųjų dalelių, atomų ir branduolių fizika, materijos sandara **P43-P45**
Fizikos pedagogika ir edukologija, istorija, terminija ir mokslo politika **P46-P48**
Instrumentai ir matavimų technologijos. Kitos su fizika susijusios temos **P49-P55**
Nanomokslas ir nanotechnologijos **P56-P61**
Teorinė, statistinė ir skaičiuojamoji fizika **P62-P79**
Aplinkos ir energetikos fizika bei technologijos **P80-P86**
Elektronika ir optoelektronika **P87-P97**
Šviesos technologijos ir kvantinė optika. Puslaidininkių ir kietųjų kūnų fizika **P98-P105**
Funkcinės medžiagos ir dariniai, medžiagų technologijos **P106-P149**
Lazerių fizika ir technologijos **P150-P170**

Atominių duomenų įvertinimas taikant astrofizikinius modelius ir astronominius stebėjimus

Atomic data accuracy evaluation using astrophysical models and astronomical observations

Romas Kisielius[1], Rasa Karpuškienė[1], Frances H. Cashman[2], Varsha P. Kulkarni[3], Fatima L. Elkhatib[3]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Space Telescope Science Institute, 3700 San Martin Drive, Baltimore, MD 21218, USA
[3]Department of Physics and Astronomy, University of South Carolina, Columbia, SC 29208, USA
Romualdas.Kisielius@tfai.vu.lt

Understanding the enrichment history of galaxies is crucial to understanding star formation and feedback processes central to galaxy evolution. Absorption lines of damped Lyman-alpha (DLA) and sub-DLA absorbers in the spectra of background quasars or gamma-ray burst (GRB) afterglows provide the most sensitive tools for measuring the heavy element content of distant galaxies. Estimation of element abundances from absorption lines is very sensitive to the accuracy of the atomic data used for the spectral lines. Atomic parameters are essential for astrophysical spectra modeling. For the theoretical results to be considered and utilized as the data one needs to know or at least to estimate their accuracy. As it was pointed-out in [1], spectroscopic parameters for many lines of astrophysically important species are determined with insufficient accuracy. Moreover, some prominent lines do not have their accuracy defined at all. These uncertainties lead to problems in determining the chemical element abundancies.

In order to overcome above mentioned issues, we calculate new sets of atomic spectroscopic data for low ions such as O I, Mg I, Si I, P I, Cl I, Mg II, Si II, P II, Cl II, Co II, Ti II. Our main goal is to calculate highly accurate oscillator strengths, transition probabilities and to determine their accuracy. Our calculations are based on a very broad configuration interaction basis within a numerical Hartree-Fock framework utilizing quasirelativistic one-electron radial orbitals (quasi-relativistic Hartree-Fock approach) and non-relativistic radial orbitals (semi-relativistic Hartree-Fock approach) with the relativistic effects included by applying Breit-Pauli method. The results of these new atomic calculations are then incorporated into the plasma simulation code Cloudy through its atomic and molecular database Stout [2].

As a sample of our investigation, we present the radial velocity plots of the P II lines λλ 961.041 Å, 963.801 Å, and 1152.818 Å, detected in the spectrum of the O7I star SK 80 in the Small Magellanic Cloud taken with the FUSE (Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer) spectrograph in Fig.1. In the top three panels, the normalized data are shown in black and the dashed horizontal red line shows the continuum level. The blue curve at the bottom of the panels is the 1σ error values in the normalized flux. In all panels, the vertical dashed lines illustrate the centroid and width of the component of interest at zero velocity, which is absorption occurring in the interstellar medium associated with the Milky Way. The fourth panel shows an overplot of the P II lines showing a direct comparison of the absorption due to each transition, where the strongest absorption occurs for λ963 Å, indicated by the green curve.

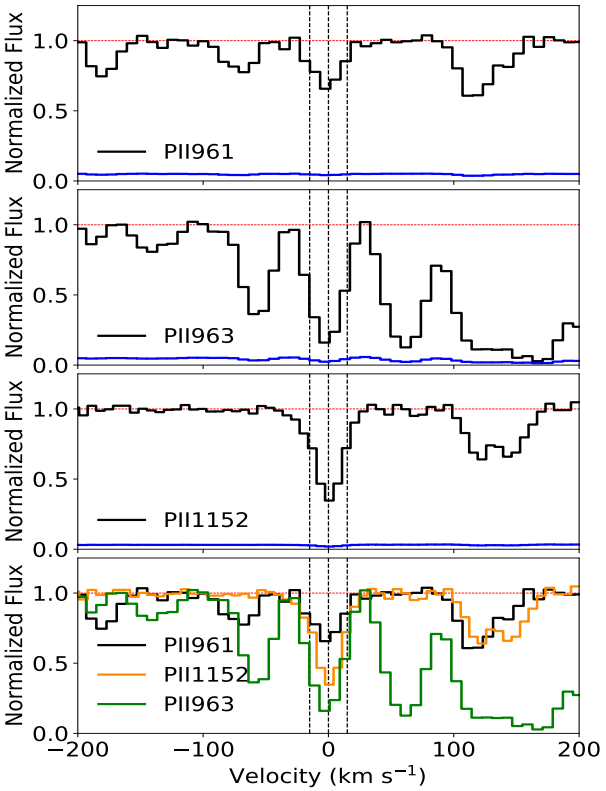


Fig 1. Radial velocity plots of three P II lines at λλ961.041Å, 963.801Å, and 1152.818Å

Reikšminiai žodžiai: atomic data, absorption lines, spectra modeling

Literatūra

[1] F. H. Cashman, V. P. Kulkarni, R. Kisielius, G. J. Ferland, P. Bogdanovich, ApJSS, 230, 8 (2017).
[2] M. L. Lykins, G. J. Ferland, R. Kisielius, M. Chatzikos, R. L. Porter, P. A. M. van Hoof, R. J. R. Williams, F. P. Keenan, P. C. Stancil, ApJ, 807, 118 (2015).

Stochastiniai efektai žvaigždžių spiečiuose

Stochastic Effects in Star Clusters

Karolis Daugevičius[1,2], Rima Stonkutė[1,2], Vladas Vansevičius[1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
[2]Vilniaus universiteto Astronomijos observatorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
karolis.daugevicius@ftmc.lt

Kadangi žvaigždės gimsta daugiausia žvaigždžių spiečiuose, jų pagrindinių fizinių ir struktūrinių parametrų tyrimai įgalina geriau suprasti ir galaktikų evoliuciją. Tačiau šiam tikslui būtina įskaityti ryškių žvaigždžių erdvinio pasiskirstymo stochastikos įtaką nustatomiems spiečių parametrams.

Mes suskaičiavome platų 3D spiečių modelių tinklą, padengiantį realių Andromedos galaktikos (M31) spiečių parametrų ribas. Žvaigždžių masės modeliuojamos pagal Kroupa pradinių masių funkciją (IMF) [1], erdvinis pasiskirstymas – pagal Elson-Fall-Freeman profilį [2], kur spiečiaus erdvinis tankis yra 3 parametrų funkcija:

$$\rho(R) = \rho_0(1 + R^2/a^2)^{-(\gamma+1)/2}, \qquad (1)$$

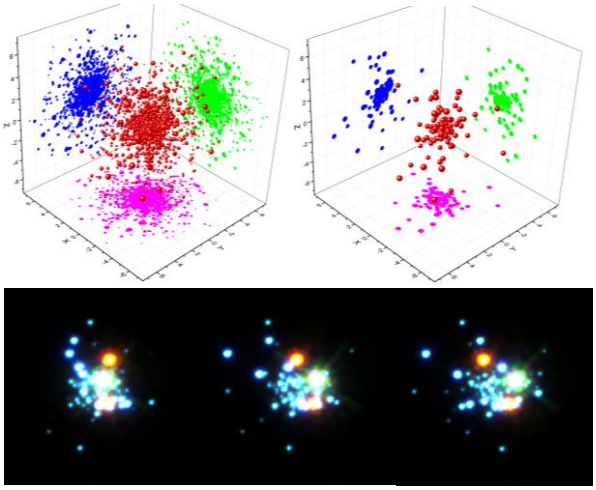
čia ρ_0 – centrinis spiečiaus tankis, R – 3D atstumas nuo spiečiaus centro, a – skalės ilgis, susijęs su spiečiaus branduolio spinduliu r_c: $r_c \approx a(2^{2/\gamma} - 1)^{1/2}$.
Modelinių Saulės metalingumo spiečių parametrai: masės nuo 10^2 iki 10^4 $M_\odot$; amžius nuo 4 mln. m. iki 12,5 mlrd. m.; r_c nuo 0,1 iki 0,8 arcsec; γ nuo 2,5 iki 10. Kiekviename tinklo mazge sugeneravome po 10^3 spiečių, ir juos „stebėjome“ iš 10^2 skirtingų krypčių (1 pav.).

Stebėjimai buvo modeliuojami, kad atitiktų realius M31 spiečius PHAT apžvalgoje (*angl.* Panchromatic Hubble Andromeda Treasury) [3], kuri 6 fotometrinėmis juostomis padengia spektro ruožą nuo 0,25 iki 1,7 μm. Kiekvienam modeliniam spiečiui buvo atlikta apertūrinė fotometrija ir visose 6 juostose nustatyti pusės šviesio spinduliai, r_h.

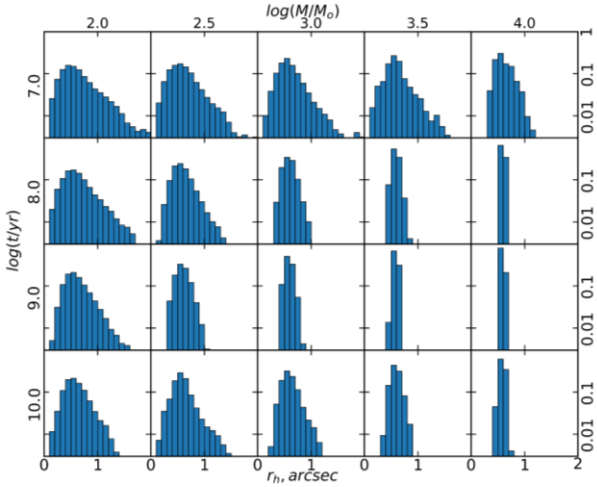
2 pav. parodyti r_h skirstiniai, kurie nustatyti *F475W* juostoje „stebint“ spiečius iš 10^2 skirtingų krypčių. Spiečių modeliai 2 pav. išdėstyti eilutėmis pagal amžių ir stulpeliais pagal masę (šių parametrų logaritminės vertės nurodytos diagramos kairėje ir viršuje). Matome, kad jauni mažos masės spiečiai pasižymi labai plačia sklaida dėl skirtingai besiprojektuojančių ryškių žvaigždžių sukeliamų stochastinių efektų.

Taip pat buvo nustatyti labai dideli r_h skirtumai matuojant tuos pačius spiečius skirtingose fotometrinėse juostose. Šie skirtumai atsiranda daugiausia dėl spiečiaus raudoniausių ir mėlyniausių žvaigždžių atsitiktinės projekcijos centro atžvilgiu efektų „stebint“ spiečius iš skirtingų regėjimo krypčių.

Modeliavimo rezultatai rodo, kad dėl stochastinių efektų mažos masės (<10^3 $M_\odot$) bet kokio amžiaus spiečiams nustatyti geometriniai parametrai bus netikslūs. Todėl tokių spiečių dydžio evoliuciją bei jų irimo požymius pagal apertūrinės fotometrijos rezultatus reikia interpretuoti atsargiai. Jauniausiems (<30 mln. m.) net ir masyviems (~10^4 $M_\odot$) spiečiams nustatyti jų dydžius taip pat galima tik labai apytikriai.



1 pav. Spiečiaus amžius 30 mln. m. Viršutinė eilė: kairėje – 3D spiečiaus diagrama, simbolio dydis atitinka žvaigždės masę: $\log(m/M_\odot) + 5(\log(m/M_\odot) + 2)$; dešinėje parodytos tik ryškios žvaigždės (*F475W* < 28). Apačioje – šio spiečiaus *F336W/F475W/F814W* nuotraukos stebint jį trimis skirtingomis kryptimis.



2 pav. r_h histogramos *F475W* juostoje, parodytos priklausomai nuo spiečių masės ir amžiaus. Spiečių parametrai: $r_c = 0{,}4$ arcsec ir $\gamma = 5$.

Reikšminiai žodžiai: žvaigždžių spiečiai, Andromedos galaktika.

Literatūra

[1] Kroupa P. 2001, MNRAS, 322, 231
[2] Elson R. A. W., Fall S. M., Freeman K. C. 1987, ApJ, 323, 54
[3] Dalcanton J. J., Williams B. F., Lang D. et al. 2012, ApJS, 200, 18

Aktyvių galaktikų kuriamų tėkmių poveikis molekuliniams debesims

Interaction between galactic outflows and mollecular clouds

Martynas Laužikas[1], Kastytis Zubovas[1,2]
[1]Vilniaus Universiteto Astronomijos Observatorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
martynas.lauzikas@ftmc.lt

Daugumos galaktikų centruose egzistuoja itin masyvi juodoji skylė (SMBH), kuri vaidina esminį vaidmenį galaktikos evoliucijoje. Akrecijos į SMBH metu sukuriamas spinduliuotės srautas bei dalelių vėjas stumia tarpžvaigždinę medžiagą (ISM) sukurdamas masyvias dujų tėkmes. Šie srautai, sudaryti iš dujų, dulkių, plinta iš centrinės galaktikų dalies.

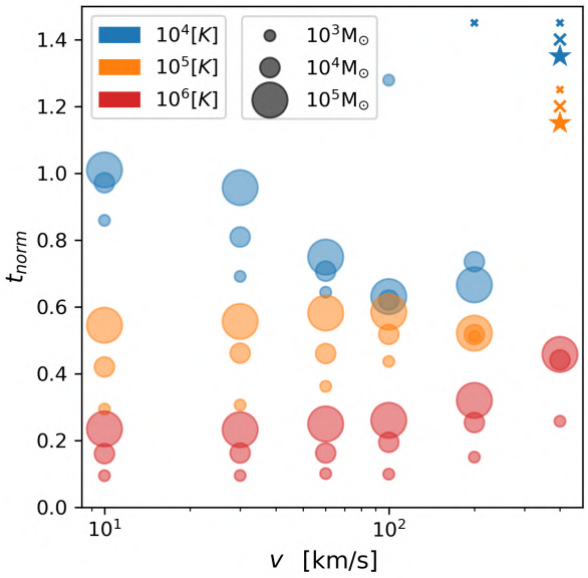
Galaktikoje esanti ISM nėra homogeniška, egzistuoja išsibarstę vėsios medžiagos regionai - molekuliniai debesys (MC). Juose vykstantys žvaigždėdaros procesai lemia galaktikų cheminės evoliucijos ciklą. Dažniausiai sutinkama nuomonė, kad greitos tėkmės šiuos debesis suardo, žvaigždėdara stabdoma [1, 2]. Dažniausiai analizuojamų tėkmių greičiai yra tūkstančių km s^{-1} eilės [3]. Bet tolimesniuose nuo centro ar tankesnės medžiagos regionuose tėkmė gali sulėtėti iki dešimčių ar šimtų km s^{-1}. Nėra aiškus tokių tėkmių poveikis MC vykstantiems procesams, kuris yra galbūt priešingas greitoms tėkmėms ir inicijuoja žvaigždėdarą. Tokių sistemų tyrimas padėtų nustatyti galaktikų aktyvumo poveikį lokaliai žvaigždėdarai.

Sistemų tyrimui pasirinktas skaitmeninis modeliavimas - Gadget 4 [4] SPH metodo kodas, papildytas kaitinimo/vėsimo modeliu apimančiu temperatūras iki 20 K, bei Džinso nestabilumo kriterijaus įverčiu. Molekulinis debesis aproksimuojamas izoterminio temperatūros profilio, tolygaus pradinio tankio, turbulentiškos medžiagos sfera. Modeliuojami 10^3, 10^4, 10^5 $M_\odot$ molekuliniai debesys. Juos veikia skirtingo greičio ir temperatūros ISM tėkmė. Pradinis MC/ISM tankių kontrastas $\chi = \rho_{MC}/\rho_{ISM}$ varijuoja 500-100 ribose. Srauto greičiai parinkti 10 - 400 km s^{-1}, ISM temperatūra - 10^4, 10^5 , 10^6 K. Modelių parametrai parinkti siekiant tankiai užpildyti fazinę erdvę (M_{MC}, T_{ISM}, v_{ISM}) ir joje identifikuoti regionus kuriuose žvaigždėdarą stiprinama ir slopinama.

Evoliucija modeliuojama iki pradinės žvaigždėdaros stadijos – dujų fragmentacijos. Fragmentacija įvyksta dujoms atitinkant Džinso kriterijų. Fragmentacijos laikas – momentas, kada fragmentavusių dujų masės dalis yra 2% pradinės debesies masės. Modelių fragmentacijos laiko normavimui pasirinktas stacionarus 10^4 K modelis. Normuoto laiko išraiška

$$t_{\mathrm{norm}} = \frac{t_{\mathrm{frag}}\,[\mathrm{v},\ \mathrm{T},\ \mathrm{M}]}{t_{\mathrm{frag}}\,[0\ km\ s^{-1},\ 10^4\ K,\ \mathrm{M}]} \qquad (1)$$

Didžiojoje dalyje modelių dėl šiluminio slėgio fragmentacija paankstėja, o greičio (kinematinio slėgio ir maišymosi efektų) įtaka nevienareikšmė (1 pav.).



1 pav. Normuotas fragmentacijos laikas. Spalva nurodo tėkmės temperatūrą, žymeklio dydis - molekulinio debesies masę. ×, žvaigždute pažymėtuose modeliuose fragmentacija apskritai neįvyko, arba yra silpna.

Mažiausios 10^4 K temperatūros modeliuose, didėjant tėkmės greičiui, stebimas fragmentacijos spartėjimas. Viršijus 100 km s^{-1} maišymosi efektai lemia dalinį ar pilną debesies suardymą. Didžiausia įtaka stebima mažiausios masės debesyse. Esant didesniam šiluminiam slėgiui greičio efektas yra mažiau išreikštas. 10^5 K temperatūros tėkmei pasiekus 200 km s^{-1} greitį, debesys yra suardomi. Didžiausios 10^6 K temperatūros atveju, fragmentacija įvyksta visame tirtame greičių intervale.

Žvaigždėdaros slopinimas būdingas vėsesnėms ir greitesnėms tėkmėms. Šie rezultatai gerai dera su kitų autorių darbais. Likusioms sistemoms būdingas žvaigždėdaros spartinimas.

Reikšminiai žodžiai: aktyvios galaktikos, molekuliniai debesys, hidrodinaminis modeliavimas.

Literatūra

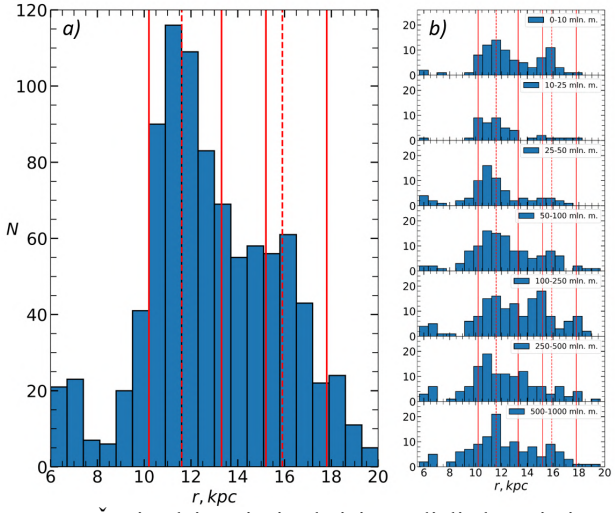
[1]McNamara, B. R. and Nulsen, P. E. J., "Heating Hot Atmospheres with Active Galactic Nuclei", *AR&A*, vol. 45, pp. 117–175, 2007.
[2]Hopkins, P. F. and Elvis, M., "Quasar feedback: more bang for your buck", *MNRAS*, vol. 401, no. 1, pp. 7–14, 2010.
[3]Dugan, Z., Gaibler, V., Bieri, R., Silk, J., and Rahman, M., "AGN Outflow Shocks on Bonnor-Ebert Spheres", *ApJ*, vol. 839, 2017.
[4]Springel, V., Pakmor, R., Zier, O., and Reinecke, M., "Simulating cosmic structure formation with the GADGET-4 code", *MNRAS*, vol. 506, no. 2, pp. 2871–2949, 2021.

ANDROMEDOS GALAKTIKOS ŽVAIGŽDŽIŲ SPIEČIAI

STAR CLUSTERS IN THE ANDROMEDA GALAXY

Eimantas Kriščiūnas ir Vladas Vansevičius
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
eimantas.krisciunas@ftmc.lt

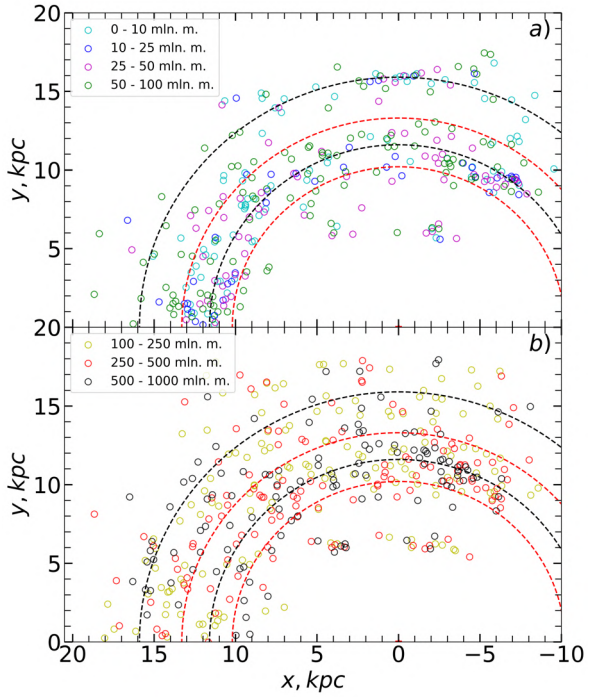
Žvaigždžių spiečių tyrimas suteikia galimybę nagrinėti astrofizikines problemas, kurios apima galaktikų, spiečių ar žvaigždžių evoliuciją ir formavimąsi. Tam tikslui, pasitelkiant Hablo kosminį teleskopą (*angl.* Hubble Space Telescope – HST) buvo atlikta PHAT (*angl.* The Panchromatic Hubble Andromeda Treasury) plataus lauko apžvalga, kurios metu buvo nufotografuota ~1/3 Andromedos galaktikos (M31) disko. Stebėjimai atlikti plačiame spektro ruože, panaudojant 6 fotometrines juostas, nuo ~250 nm iki ~1500 nm. Didelė HST teleskopo kampinė skyra leido identifikuoti žvaigždžių spiečius, kurie prieš tai nebuvo matomi antžeminiais teleskopais [1]. Žvaigždžių spiečių katalogo objektams (1181) buvo atlikta tiksli daugiaspalvė apertūrinė fotometrija [2]. Remiantis šiais duomenimis buvo nustatyti pagrindiniai spiečių parametrai: amžius, masė ir ekstinkcija. Šiame darbe parametrai buvo panaudoti M31 globalios galaktikos disko struktūros tyrimui.



1 pav. Žvaigždžių spiečių skaičius radialia kryptimi: a) visų nagrinėjamų objektų; b) skirtingo amžiaus žvaigždžių spiečių. Raudonos ištisinės linijos žymi nustatytas vijų padėtis ties 10,2-13,3 ir 15,2-17,8 kpc; punktyrinės linijos rodo jaunų (<10 mln. m. amžiaus) spiečių skaičiaus maksimumus ties: 11,6 ir 15,9 kpc.

Pirmiausia „atsukome“ Andromedos galaktikos diską, atsižvelgdami į jo polinkį mūsų atžvilgiu ir tardami, kad jaunesni nei 1 mlrd. m. spiečiai yra plonajame diske. Apskaičiavome kiekvieno spiečiaus atstumą (r) nuo galaktikos centro (1a pav.). Suskirstę spiečius į optimalius amžiaus intervalus (1b pav.), tyrėme žvaigždėdaros struktūrą M31 galaktikos diske. Spiečių atstumų skirstinio maksimumų padėtis ir jų pločius nustatėme pagal jaunesnius nei 10 mln. m. amžiaus spiečius. Identifikavome tris sutankėjimų padėtis ties: i) ~6 kpc atstumu nuo galaktikos centro; ii) 11,6±0,1 kpc – plotis nuo 10,2 kpc iki 13,3 kpc; iii) 15,9±0,2 kpc – plotis nuo 15,2 kpc iki 17,8 kpc. Jaunų spiečių pasiskirstymas galaktikos diske rodo, kad M31 žvaigždės šiuo metu formuojasi trijose stambaus masto struktūrose: 6, 11 ir 16 kpc žieduose.

Žvaigždžių spiečių pasiskirstymas galaktikos diske parodytas 2 pav. Jaunesnieji spiečiai daug aiškiau koncentruojasi į atskirus žiedus, o senesnieji pasiskirsto gan tolygiai, tikėtina dėl migracijos per evoliucijos laiką.



2 pav. Žvaigždžių spiečiai M31 diske. Raudonos ir juodos linijos žymi tą patį kaip ir 1 pav.

Sprendžiant pagal jauniausių žvaigždžių spiečių išsidėstymą taisyklinguose žieduose, galima daryti išvadą, kad spiralinių vijų užsisukimo kampas (*angl.* pitch angle) yra labai mažas ir būdingas morfologiniam spiralinių galaktikų tipui Sa, t. y. ankstyvesniam nei Andromedos galaktika yra klasifikuojama (Sb).

Reikšminiai žodžiai: M31 galaktika, žvaigždžių spiečiai.

Literatūra

[1] Johnson, L. C., Seth, A. C., Dalcanton, J. J., ir kt. 2015, ApJ, 802, 127
[2] Naujalis, R., Stonkutė, R., Vansevičius, V. 2021, A&A, priimtas spaudai, doi.org/10.1051/0004-6361/202039306

Ūminio Spindulinio dermatito predikcija ir ankstyva diagnostika panaudojant konfokalią atspindžio mikroskopiją

Acute radiation dermatitis prediction and early diagnostics using reflectance confocal microscopy

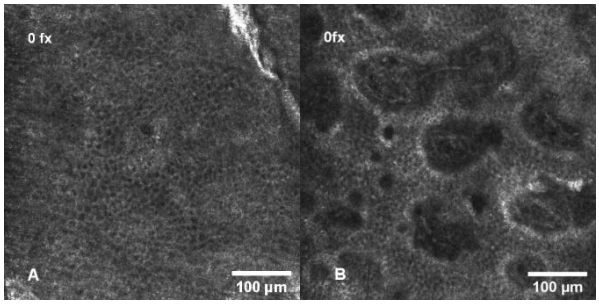
Juras Kišonas[1,2], Jonas Venius[3,4], Mindaugas Grybauskas[1], Arvydas Burneckis[1], Daiva Dabkevičienė[5], Ričardas Rotomskis[4]
[1]Nacionalinis Vėžio Institutas, Onkologinės Radioterapijos skyrius, Santariškių g. 1, LT-08660, Vilnius
[2]Vilniaus Universitetas, Neurobiologijos ir Biofizikos katedra, Saulėtekio al. 7, LT-10257. Vilnius
[3]Nacionalinis Vėžio Institutas, Medicinos fizikos skyrius, Santariškių g. 1, LT-08660, Vilnius
[4]Nacionalinis Vėžio Institutas, Biomedicininės Fizikos laboratorija, P. Baublio g 3b, LT-08406, Vilnius
[5]Nacionalinis Vėžio Institutas, Biobankas, P. Baublio g 3b, LT-08406, Vilnius
juras.kisonas@gmail.lt

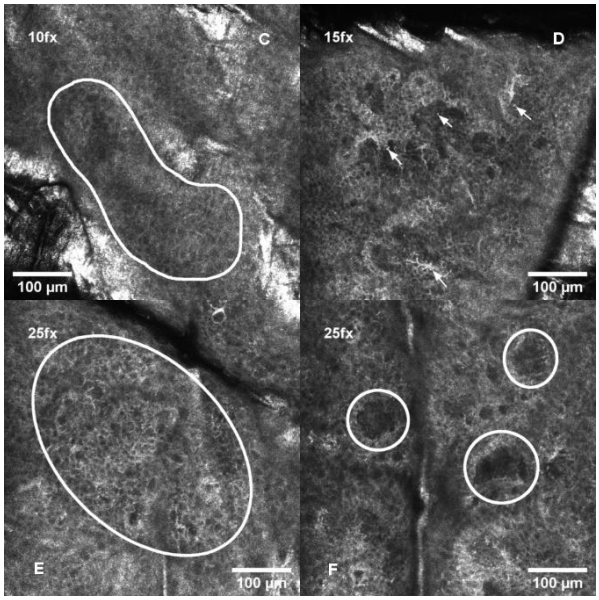
Daugiau nei pusė vėžiu sergančių pacientų yra gydomi spinduline terapija (ST) [1]. Beveik visi (iki 95%) juonizuojančiąją spinduliuote (JS) gydomi pacientai patiria ūminę odos spindulinę reakciją – ūminį spindulinį dermatitą (ŪSD) [2]. Vis dar trūksta naujų tyrimų metodų, kurie pagerintų ŪSD diagnostiką. Konfokalinė atspindžio mikroskopija (KAM) yra optinės odos biopsijos metodas, kurio metu odos nepažeidžiančiu lazeriu (λ - 830nm) apšviečiamos odos struktūros, jos atspindi šviesą atgal, kuri pro siaurą diafragmą grįžta į detektorių. Taip nepažeidžiant odos gaunamas vaizdas ląstelių lygmenyje. KAM yra visiškai saugi, todėl matavimus galima atlikti dažnai ir dinamiškai stebėti odos pokyčius gydymo metu.

Šio tyrimo tikslas yra pritaikius KAM nustatyti dėl JS poveikio atsirandančius odos pokyčius, palyginti juos su klinikiniu ŪSD pasireiškimu ir įvertinti KAM predikcinę vertę.

Metodai: atliktas biomedicininis tyrimas į kurį įtrauktos 103 moterys, kurioms dėl krūties vėžio taikyta ST; kas savaitę buvo atliekamas klinikinis ŪSD vertinimas ir KAM.

Rezultatai: atliekant KAM nustatyta, kad po 1 ST savaitės spongiozė arba egzocitozė pasireiškia 65% pacientų, o po 2 ST savaičių – 94%; po 3 ST savaičių uždegiminės ląstelės dermoje (ULD) aptiktos 47%; epidermio struktūros pažeidimas (ESP) po 4 ST savaičių nustatytas 68% tiriamųjų ir 93% po 5 ST savaičių; pažeistos dermos papilos (PLP) po 5 ST savaičių aptiktos 68% iš visų tiriamųjų (1 pav).





1 pav. KAM matavimai. A ir B – kontroliniai matavimai, C – spongiozė, D – uždegiminės ląstelės dermoje, E – epidermio struktūros pažeidimas, F – dermos papilų pažeidimas; fx – spindulinės terapijos frakcijos.

Išvados: lyginant su klinikiniais ŪSD simptomais KAM pagalba aptinkami JS sukeliami odos pažeidimai yra nustatomi anksčiau, turi tipinę eigą ir leidžia prognozuoti ŪSD sunkumą.

Reikšminiai žodžiai: spindulinė terapija, ūminis spindulinis dermatitas, konfokalinė atspindžio mikroskopija.

Literatūra

[1] Delaney, G., et al., The role of radiotherapy in cancer treatment: estimating optimal utilization from a review of evidence-based clinical guidelines. Cancer, 2005. 104(6): p. 1129-37.
[2] Chitapanarux, I., et al., Randomized phase III trial of concurrent chemoradiotherapy vs accelerated hyperfractionation radiotherapy in locally advanced head and neck cancer. J Radiat Res, 2013. 54(6): p. 1110-7.

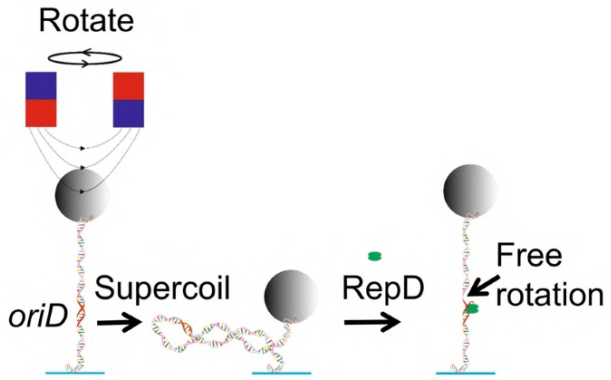
Susukti DNR ir pamatuoti kinezino generuojamą jėgą - pavienių biomolekulių mechaninės savybės

Twisting DNA and measuring kinesin generated force – single molecule mechanics

Algirdas Toleikis[1]
[1]VU Gyvybės Mokslų Centras, Saulėtekio al. 7, Vilnius 10257
algirdas.toleikis@gmail.com

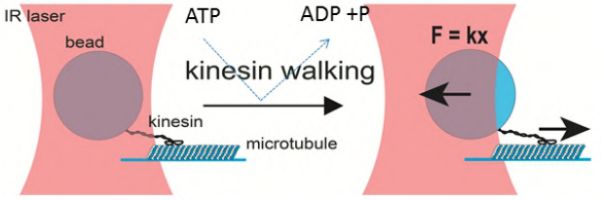
Pavienių molekulių biofizikiniai metodai yra galingas įrankis išaiškinti biomolekulinius mechanizmus. Magnetiniai ir optiniai pincetai leidžia ne tik pamatuoti biologinių motorų sukuriamą jėgą, bet ir paveikti bei tiesiogiai manipuliuoti biologines molekules, tokias kaip DNR ir baltymai.

Panaudojant magnetinius pincetus galima susukti DNR molekulę, tarsi telefono kabelį. Ląstelėse DNR molekulės būna kompaktiškai susuktos, kitaip netilptų ląstelės viduje. Baltymai, kurie nori nuskaityti DNR informaciją, turi gebėti tai padaryti su kompaktiškai susukta DNR. Vienas iš mechanizmų, padedančių tai padaryti yra lokalus DNR struktūros pakeitimas, panaudojant energiją iš neigiamos DNR superspiralizacijos. Vienas iš tokių pavyzdžių yra bakterijų RepD baltymas. Šiame tyrime buvo atrasta, kad šis baltymas yra inhibuotas jeigu DNR nėra susukta. Ir tik susukus DNR į priešingą pusę nei natūrali DNR spiralė, RepD baltymas gali kirpti DNR [1].



Kitas pavienių molekulių metodas, optiniai pincetai, buvo plačiai pritaikytas tirti molekulinius motorus. 2018 metais už tai buvo suteikta Nobelio premija Fizikos srityje. Molekulinio motoro, kinezino, veikimo mechanizmas buvo išaiškintas būtent panaudojant optinius pincetus.

Buvo atrasta kad kinezinas gali generuoti jėgą iki 7.2 pN. Taip pat atrasta kad kinezinai gali eiti ne tik į priekį, bet ir atgal. Pasirodo, kad žingsniavimas atgal yra dalis kinezino mechanizmo, tam kinezino kroviniui užstrigus ląstelės struktūrose, kinezinas neatsijungtų nuo mikrovamzdelio, ant kurio žingsniuoja, bet pažengęs žingsnį atgal vėl galėtų tęsti kelionę į priekį [2].



Reikšminiai žodžiai: magnetiniai pincetai, optiniai pincetai, pavienės molekulės, DNR, moleculiniai motorai

Literatūra

[1] Toleikis, A., Webb, M. R. & Molloy, J. E. oriD structure controls RepD initiation during rolling-circle replication. Sci. Rep. (2018). doi:10.1038/s41598-017-18817-6
[2] Toleikis A, Carter NJ, Cross RA. Backstepping Mechanism of Kinesin-1. Biophys J. (2020) doi:10.1016/j.bpj.2020.09.034.

Kalcio jonų įtaka molekulių pernašai pro plazminę membraną ir ląstelių gyvybingumui po ląstelių elektroporacijos

The roles of calcium ions for molecular transfer across plasma membrane and cell viability after cell electroporation

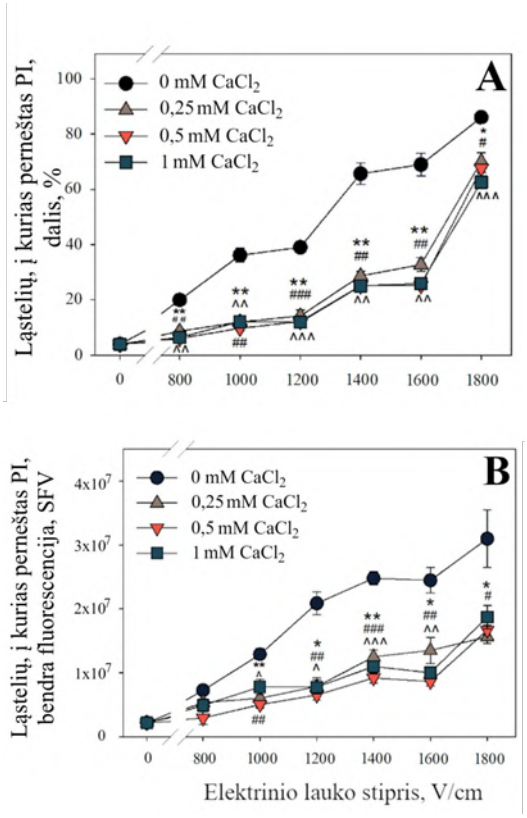
Diana Navickaitė[1], Paulius Ruzgys[1], Rūta Palepšienė[1], Martynas Maciulevičius[1], Saulius Šatkauskas[1],
[1]Vytauto Didžiojo universitetas, Gamtos mokslų fakultetas, Vileikos g. 8, LT-44404 Kaunas
saulius.satkauskas@vdu.lt

Kalcio jonai dalyvauja įvairiuose ląstelių procesuose – raumenų susitraukimuose, hormonų ir neuromediatorių išskyrime, ląstelių proliferacijoje, genų raiškos valdyme, fermentų aktyvumo reguliavime (Carafoli et al., 2001), ląstelių plazminės membranos pažaidų tvarkymo mechanizmuose (Bunney et al., 2017). Tiriant plazminės membranos pažaidų susitvarkymo mechanizmus ląstelėse, pastebėta, kad kalcio jonai yra atsakingas už šio proceso iniciaciją. Šis kalcio jonų poveikis plazminės membranos pažaidų tvarkyme gali taip pat turėti įtakos medžiagų transmembraninei pernašai po ląstelių elektroporacijos. Be to, padidinus kalcio jonų koncentraciją ląstelės citoplazmoje virš slenkstinės koncentracijos, ląstelės gyvybingumas yra negrįžtamai sutrikdomas (Frandsen et al., 2017). Šiuo metu, pradėti kalcio jonų pernašos (kalcio elektroporacijos) tyrimai, siekiant pritaikyti metodą priešvėžinėje terapijoje (Frandsen et al., 2020).

Darbo tikslas: ištirti kalcio jonų įtaką molekulių transmembraninei pernašai ir ląstelių gyvybingumui po ląstelių elektroporacijos.

Tyrimams naudotos žiurkėno kiaušidžių CHO-K1, ląstelės bei skirtingų linijų vėžinės 4T1, B16F10, MX-1 ir U87 ląstelės. Ląstelės prieš eksperimentus buvo suspenduojamos HEPES pagrindu paruoštoje terpėse su skirtingomis kalcio jonų koncentracijomis. Ląstelių elektroporacijai buvo naudojami BTX T820 ar laboratorijoje pagaminti elektroporatoriai. Ląstelių elektroporacijos efektyvumui vertinti buvo naudojamos fluorescuojančios molekulės: propidžio jodidas (PI), YO-PRO-1 ir kalceinas. Kalcio jonų viduląstelinės dinamikos vertinimui buvo naudojamas kalbraitas 590AM. Ląstelių fluorescencijos pokyčiai vertinti naudojant fluorescencinę mikroskopiją bei tėkmės citometriją.

Rezultatai parodė, kad kalcio jonų koncentracijos didėjimas elektroporacijos terpėje sumažina mažų molekulių elektropernašos efektyvumą tiek į CHO-K1 (1 pav.) tiek ir į kitas tirtas vėžio linijų ląsteles. Be to, nustatėme, kad kalcio jonai ne tik mažina molekulių pernašą į ląsteles, bet taip pat slopina ir kalceino ištekėjimą iš ląstelių. Šie efektai yra susiję su kalcio jonų poveikyje pagreitėjusiu membranos barjerinės funkcijos atstatymu. Tiriant vienalaikį kalcio jonų viduląstelinės dinamikos pokyčius ir ląstelių gyvybingumą nustatyta, kad elektroporacijos terpę papildžius 1 mM kalcio jonų koncentracija, ląstelių žuvimo padidėjimas po elektroporacijos yra susijęs su ląstelių nesugebėjimu išpumpuoti kalcio jonų pertekliaus.



1 pav. PI elektropernašos priklausomybė nuo elektroporacijos terpėje esančios kalcio jonų koncentracijos. Ląstelių, į kurias perneštas PI, dalis (A) ir ląstelių, į kurias perneštas PI, bendra fluorescencija (B). Ląstelės buvo elektroporuojamos, taikant vieną aukštos įtampos (800–1800 V/cm) 100 µs elektrinį impulsą. PI fluorescencija buvo matuojama praėjus 15 min po elektroporacijos.

Reikšminiai žodžiai: ląstelių elektroporacija, kalcio jonai, elektrinio lauko stipris, ląstelių žuvimas

Literatūra

[1] Carafoli, E. et al. Generation, control, and processing of cellular calcium signals. Critical Reviews in Biochemistry and Molecular Biology, 36(2), 107–260 (2001).
[2] Bunney, P. E. et al. Orexin activation counteracts decreases in nonexercise activity thermogenesis (NEAT) caused by high-fat diet. Physiology and Behavior. Elsevier Inc, 176, 139–148 (2017).
[3] Frandsen, S. K. et al. Normal and malignant cells exhibit differential responses to calcium electroporation. Cancer Research, 77(16), 4389–4401 (2017).
[4] Frandsen, S. K., Vissing, M., Gehl, J. A Comprehensive Review of Calcium Electroporation – A Novel Cancer Treatment Modality. 1–20 (2020).

Gelinės dozimetrijos taikymai spindulinėje terapijoje

Dose Gel Applications in Radiotherapy

Evelina Jaselskė, Benas Gabrielis Urbonavičius, Jurgita Laurikaitienė, Diana Adlienė
Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
evelijas@gmail.com.lt

Spindulinė terapija yra vienas iš onkologinių ligų gydymo metodų, kurio taikymo efektyvumas ženkliai priklauso nuo gydymui naudojamų techologijų, spinduliuotės rūšies (rentgeno fotonai, gama fotonai, elektronai, protonai, neutronai) bei apšvitos parametrų. Apšvita yra charakterizuojama energija tenkančia vienetinio tūrio masei, kuri vadinama sugertąja doze. Dozės planuojamos kiekvienam pacientui individualiai, stengiantis apsaugoti periferinius audinius nuo nereikalingos apšvitos. Siekiant užtikrinti šių organų optimalią apsaugą nuo spinduliuotės, parengti paciento dozių planai yra verifikuojami remiantis eksperimentinės dozimetrijos rezultatais. Atsižvelgiant į tai, kad onkologiniai navikai yra 3D objektai, šiuo metu egzistuoja tik vienas - cheminės dozimetrijos - metodas, leidžiantis įvertinti 3D dozių pasiskirstymą taikinyje. Gelinė dozimetrija yra vienas iš perspektyviausių 3D cheminės dozimetrijos metodų, kai varijuojant dozimetrinio gelio sudėtį bei komponentų koncentracijas galima pasiekti reikiamą erdvinę bei dozimetrinę skyrą, užtikrinančią spindulinės terapijos procedūros kokybę.

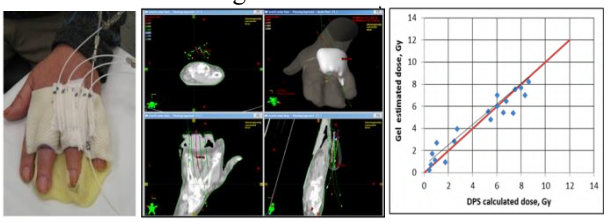
Dozimetrinių gelių sudėtyje paprastai yra vienas ar keli monomerai, kuriuos apšvitinus formuojasi polimerinės struktūros įsitvirtinančios želatinos ar agarozės matricoje. Analizuojant erdvinį polimerizacijos laipsnio pasiskirstymą gelyje, gaunama unikali informacija apie 3D dozių pasiskirstymą taikinyje, leidžianti maksimaliai individualizuoti paciento gydymą.

Tyrimuose buvo naudojamos įvairios standartinių normoksinių gelių nPAG (akrilamidas, BIS- akrilamidas, želatina, dhidro, deguonies surišėjas ir vanduo), nMAG (metakrilo rūgštis, želatina, deguonies surišėjas ir vanduo), VIPET (vinilpirolidonas, BIS-akrilamidas, želatina, deguonies surišėjas ir vanduo), modifikacijos.

Apšvitintų gelių savybės bei dozimetrinės charakteristikos buvo analizuojamos naudojant branduolių magnetinio rezonanso (BMR) vaizdinimo, Ramano spektroskopijos, UV-VIS spektrofotometrijos metodus bei specialiai šiems tyrimams sukurtą foto dozimetrijos metodą [1].

Tyrimo metu buvo sukurtos padidinto dozimetrinio jautrio gelių kompozicijos: modifikuotų nMAG gelių jautris fotonų apšvitai padidėjo nuo 0,06 Gy^{-1} iki 0,12Gy^{-1} , o nPAG - nuo 0,11 Gy^{-1} iki 0,22 Gy^{-1}. Šie geliai buvo panaudoti kaip fantomai dozių pasiskirstymui taikiniuose, apšvitintuose pagal planavimo sistema sukurtą planą, vertinti.

Gelinė dozimetrija buvo taikoma rentgeno terapijoje, išorinėje spindulinėje terapijoje, gama peilio radiochirurgijoje bei brachiterapijoje. Didelės dozės galios brachiterapijoje panaudojus geliu užpildytą kateterį pavyko nustatyti tik 5-7 % neatitikimus tarp planinių ir išmatuotų dozių (1 pav.), kai tuo tarpu leistinas neatitikimas gali būti iki 20 %



1pav. Gelinės dozimetrijos taikymas brachiterapijoje

Gelinė dozimetrija pasiteisino vertinant dozių pasiskirstymą mažuose taikiniuose (< 5 mm), kurie būdingi pacientams, gydomiems naudojant gama peilio technologiją. Naudojant modifikuotą VIPARnd gelį erdvinė dozių registravimo skyra buvo < 0,2 mm, o dozimetrinis jautris - 0,08 Gy^{-1}.

Gelių savybė polimerizuotis dėl jonizuojančiosios spinduliuotės poveikio, atkartojant švitinamo tūrio (naviko) formą buvo įveiklinta kuriant ir įgyvendinant 3D spausdinimo naudojant jonizuojančiąją spinduliuotę koncepciją tvarių gelių struktūrų gamybai. Pirmą kartą atskyrus polimerizuoto gelio darinį iš bendros gelio masės buvo sukurta prielaida fiziškai patikrinti, ar apšvita pagal planą tiksliai apima visą taikinį (naviką) ir jei reikia, atlikti plano koregavimą.

Tyrimų metu gauti rezultatai parodė gelinės dozimetrijos potencialą ir galimo pritaikomumo tendencijas spindulinėje terapijoje, tačiau norint šį metodą taikyti kasdienėje klinikinėje praktikoje būtina atlikti daugiau ir detalesnių tyrimų.

Reikšminiai žodžiai: dozimetriniai geliai, polimerizacija, spindulinė terapija.

Literatūra

[1] Padidintu jautrumu mažų dozių apšvitai pasižyminčių polimerinių gelių ir kompozitų kūrimas: daktaro disertacijos santrauka /Neringa Šeperienė ; Kaunas, Kauno technologijos universitetas, 2018.43 p.

Dozimetrinių plėvelių su metalų druskomis kūrimas bei panaudojimo mažų dozių dozimetrijoje tyrimas

Formation and investigation of dosymetric films with metals possible use for low dose dosimetry application

Džiugilė Valiukevičiūtė, Judita Puišo
Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
dziugile.valiukeviciute@ktu.edu

Pastaruoju metu ypač paplitęs jonizuojančios spinduliuotės taikymas medicinoje – gydymui ir diagnostikai. Tačiau visos gyvosios ląstelės yra jautrios jonizuojančiai spinduliuotei. Jonizuojančios spinduliuuotės dozės privalo turi būti kruopščiai parinktos ir įvertintos, nes jonizuojančios spinduliuotės dozės viešijančios slensktinę ribą gali sutrikdyti natūralų ląstelės gyvybinį ciklą, sukelti negrįžatamas genetines mutacijas. Gydant onkologinius ligonius jonizuojanti spinduliuotė yra naudojama ne tik vėžinių ląstelių aptikimui ir sunaikinimui.

Dozimetriniai geliai ir plėvelės kol kas yra vienintelė žinoma priemonės, kuria galima įvertinti apšvitos dozės pasiskirstymą trimatėje erdvėje. Kadangi gelių ir plėvelių tankis yra artimas žmogaus minkštųjų audinių tankiui, tai sudaro galimybę tiksliau įvertinti jonizuojančios spinduliuotės pasiskirstymą.

Priklausomai nuo dozimetrinės plėvelės sudėties, gaunamas skirtingas atsakas į apšvitą: polimerizacija arba/ir spalvinis pokytis. Siekiant padidinti polimerinių dozimetrinių plėvelių jautrumą legiruojant metalo jonais. Dažnų atveju naudojami vienos rūšies metalo jonai [1].

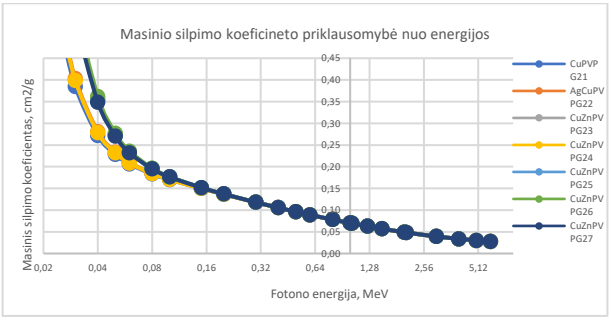
Šiame darbe buvo tirta dviejų rūšių dozimetrinės plėvelės: polimerinės plėvelės su metalų druskomis.

AgCuZn polimerinių plėvelių gamybai buvo naudojama sidabro nitrato, vario (II) sulfato ir cinko acetato druskos.

Naudojant XCOM [4][5] programinę įrangą buvo lyginamos skirtingų sudėčių polimerinės plėvelės, jų jautrumas mažos energijos spinduliuotėms (iki 6 MeV).

1 lentelė. Gelių cheminė sudėtis

Cheminė sudėtis, %	CuPVPG21	AgCuPVPG22	CuZnPVPG23	CuZnPVPG24	CuZnPVPG25	CuZnPVPG26	CuZnPVPG27
$AgNO_3$	0.00	0.08	0.81	0.00	0.79	0.78	0.78
$CuSO_4$	0.36	0.36	0.00	0.35	0.00	0.34	0.00
$Zn(CH_3COO)_2$	0.00	0.00	0.00	0.35	0.34	0.34	0.00
PVP (C_6H_9NO)	0.10	0.10	0.00	0.09	0.00	0.00	0.18
$C_{102}H_{151}O_{39}N_{31}$	9.62	9.57	9.52	9.43	9.35	9.17	9.17
H_2O	89.93	89.89	89.67	89.77	89.52	89.37	89.86



1 pav. Masinio silpimo koeficineto priklausomybė nuo energijos

Nustatyta, kad didžiausias masinis silpimo koeficientas, nustatytas, kai Ag:Cu:Zn santykis yra 2:1:1.

2 lentelė. Masinio silpimo keoficiento reikšmė, kai energija 6 MeV

	CuPVPG21	AgCuPVPG 22	CuZnPVPG 23	CuZnPVPG 24	CuZnPVPG 25	CuZnPVPG 26	CuZnPVPG 27
Masinio silpimo koef.	0.02756	0.02757	0.0276	0.02757	0.0276	0.02761	0.0276

Ištyrus septynių skirtingos sudėties dozimetrinių plėvelių masinio silpimo koeficientus buvo gauta, kad didžiausią koeficiento vertė turi plėvelė, kurios sudėtyje yra visų trijų metalų druskų. Mažiausią koeficientą turėjo plėvelė, kurios sudėtį papildė tik vario sulfato druska.

Reikšminiai žodžiai: dozimetrija, jonizuojanti spinduliuotė, Cu, Zn, Ag, nanodalelės, polimerai želatina.

Literatūra

[1] S.Vrbaski, J. Puišo, D. Adlienė, M. Aziukaitienė, Enhancement of radiosensitivity of dose gels. *Proceedings of the 14th International Conference on Medical Physics*. 2019, pp. 121-124. ISSN 1822-5721

[2] M. Kattan, Y. Daher, H. Alkassiri, *A high-dose dosimeter-based polyvinyl chloride dyed with malachite green*, (Damascus, Syria, 2006).

[3] S.M. Gafar, M.A. El-Ahdal, *Radiochromic Fuchsine-Gel and Its Possible Use for Low Dosimetry Applications*, (Cairo, Egypt, 2015).

[4] L. Gerward, N. Guilbert, K. Bjorn Jensen, H. Levring, *X-ray absorption in matter. Reengineering XCOM*, (Denmark, 2000).

[5] A. A. Okunade, *Parameters and computer sftware for the evaluation of mass attenuation and mass energy-absorbtion coefficients for body tissues and substitutes*, (Nigeria, 2007).

Žalių fluorescencinių grafeno kvantinių taškų sąveika su žmogaus trombocitais

Interaction of green fluorescent graphene quantum dots with human platelets

Lena Golubewa[1,2], Danielis Rutkauskas[1], Tatsiana Kulahava[2], Renata Karpicz[1], Polina Kuzhir[2,3]
[1]Center for physical sciences and technology, Department of molecular compounds physics, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Institute for nuclear problems of Belarusian state university, Laboratory of nanoelectromagnetics, Bobruiskaya str. 11, BY-220006 Minsk
[3]University of Eastern Finland, Institute of photonics, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu
lena.golubewa@ftmc.lt

Green fluorescent graphene quantum dots (GQDs) are promising nano-agents for optically-guided targeted drug delivery. Thrombus formation in response to the action of nanomaterials [1] is one of the significant obstacles in biomedical applications, therefore, the establishment of the aggregation activity of nanoparticles and the mechanisms of their interaction with platelets and blood plasma proteins is a primary task in the development of nanoparticle-based treatment and diagnosis. Thus, the main goal of the study was to reveal the accumulation of GQDs in platelets, investigate the activation/aggregation of platelets in the presence of GQDs, and demonstrate the role of the blood plasma proteins in the GQD aggregation properties. Platelet-rich plasma (PRP) was used to evaluate the impact of plasma proteins.

Aggregation activity of GQDs at a final concentration of 50 μg/mL towards platelets and platelets in PRP was investigated by fluorescence microscopy. Fluorescence images of cells were analyzed using a custom Matlab R2009b (MathWorks, USA) script.

It was revealed that GQDs induce the activation of platelets. Cells without GQDs were visualized via autofluorescence when excited with λ_{ex}=473 nm (Fig. 1a, g) and fluorescence intensity analysis was performed (Fig.1c, i). The fluorescence of GQDs accumulated in platelets (Fig.1l) significantly exceeded the autofluorescence of cells in control samples. However, slight fluorescence intensity increase was also observed for GQD-treated platelets in PRP (Fig.1f). It was assumed that some accumulation of GQDs in activated cells in PRP was also present. Platelets and cells in PRP non-treated with GQDs had round shape without any features of activation (Fig.1a and g), with similar size distribution (Fig.1b and h), while in GQD-treated cells significant morphological changes were observed (Fig.1d and j). Cell size analysis (Fig.1b, e, h, and k) revealed an increase in platelet size for GQD-treated platelets and cells in PRP. A huge fraction of platelet aggregates with sizes exceeding the average size of a single platelet by more than 20 times was detected in samples with GQD-treated cells (agglomerates are marked with arrows, Fig.1j). In PRP platelets were present as single cells, however, a significant change in their shape was also observed (Fig.1d) as compared with control cells (Fig.1g).

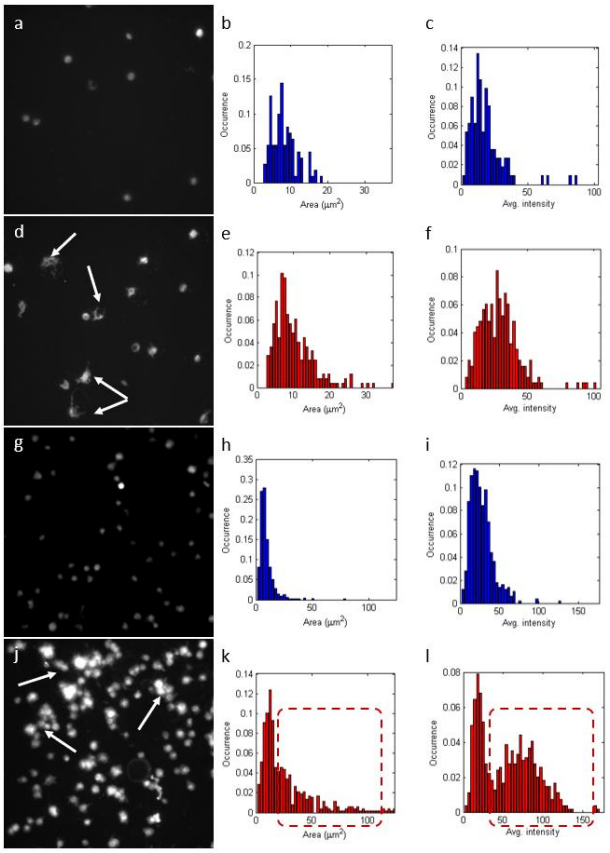


Fig.1. Fluorescence microscopy analysis of platelets in PRP (a-c) and isolated platelets (g-i): (b, e, h, k) – platelet area distribution; (c, f, i, l) – distribution of average intensity per cell; (a-c, g-i) – non-treated cells; (d-f, j-l) – GQD-treated cells.

Summing up, GQDs are accumulated in platelets, lead to platelet activation and aggregation at the concentration of 50 μg/mL. The presence of blood plasma proteins in the medium (PRP model) prevents platelet aggregation due to the formation of so-called bio-corona around GQDs but does not hide the activation potential of GQDs.

Keywords: fluorescence microscopy, platelets, graphene quantum dots, platelet-rich plasma.

Literature

[1] J. Simak, and S.De Paoli, Wiley Interdiscip. Rev. Nanomed. Nanobiotechnol. **9**, 1448 (2017).

Elektroporacijos ir fotodinaminės terapijos poveikis *Staphylococcus aureus* bioplėvelės matricai
Effect of electroporation and photodynamic therapy on *Staphylococcus aureus* biofilm matrix

Wanessa Melo[1], Viktorija Juscenko1[1] and Arunas Stirke[1]
[1]Laboratory of Bioelectric, Department of Functional Materials and Electronics, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania

wanessa.melo@ftmc.lt

Currently, biofilms have been the cause of a wide variety of infections in the human body, reaching 80% of all microbial infections [1]. The bacteria *Staphylococcus aureus* is a leading cause of hospital-acquired infections. The biofilms present specific properties such as the extracellular polymeric substance (EPS), which increases the resistance to antimicrobial treatments [1]. Thus, the development of new approaches is urgent, and antimicrobial photodynamic therapy (aPDT) has been shown as a promising candidate. aPDT involves the synergistic combination of a photosensitizer (PS), molecular oxygen and visible light of appropriate wavelength in order to produce highly reactive oxygen species (ROS), which leads to the oxidation of several cellular components [2]. Even though this therapy showed be efficient to attack many components of the biofilm, the EPS hampers the PS access to the deeper biofilm cells, promoting the re-grow of the microorganism community [2]. Therefore, to overcome this problem, it is necessary to combine the aPDT with a promising approach, such as electroporation (EP). The EP may enhance the permeability of the EPS-biofilm, allowing the PS to reach the deeper cells and consequently the aPDT can completely disrupt the biofilm.

Thus, the aim of this work was evaluate the synergism between aPDT and EP against the *S. aureus* biofilm, detecting, mainly, the effect of this on the *S. aureus*-EPS components (proteins and carbohydrates).

Methods:

Biofilm formation: The *S. aureus* biofilm was formed on cellulose membrane using the method described by Kim et al [3], with slight modifications.

aPDT and Electroporation: The *S. aureus* biofilm was incubated with 1 mg mL^{-1} of methylene blue (MB) for 15 minutes and subsequently the electroporation was performed by the following parameters: two electric pulses at 1000 Vcm^{-1}, 50µs long, 1-Hz frequency. The cuvettes used fitted with electrodes with 0.1 cm between embedded aluminum plates. After, the biofilm was irradiated by a LED (red light - 630 nm) for 20 minutes. Control studies were performed. Cell viability was determined by using XTT assay and the biofilm structure visualized by scanning electronic microscopy (SEM), both as described by Chandra el al [4].

EPS analysis: Before the biochemical analysis, the EPS was extract using NaOH treatment and the proteins and carbohydrate were determinate by Bradford and anthrone methods, respectively [5].

Results and discussion:

Table 1 shows the survival index (SI) of *S. aureus* biofilm through the measurement of its metabolic activity (XTT assay). The viability of *S. aureus* after only aPDT treatment or only EP was around 45.4% and 93.1% respectively, while the synergism between them promoted a significant decreasing in the SI of the bacteria biofilm (~5.08%). This synergic effect can be visualized in the Figure 1, showing *S. aureus* biofilm before (control) and after the treatment that significantly decreased the number of cells, caused a morphologic damage to the bacteria and eliminated the presence of EPS. In addition, aPDT+EP reduced 91.71% and 95.05% of proteins and carbohydrates present in the EPS extracted from *S.aureus* biofilm. The effect of the red light or MB alone did not caused *S. aureus* biofilm reduction, as the EP only condition.

Table 1: *S. aureus* biofilm survival index (SI). Carbohydrates and proteins content of EPS extracted from *S. aureus* biofilm.

Conditions	*Survival index* (%)	*Proteins* (µg/mL)	*Carbohydrates* (µg/mL)
Control	100±0.50	123.1±2.58	78.9±3.8
Light only (630nm)	95.5±0.25	120.3±1.58	73.6±1.2
MB(1mg mL^{-1})	98.6±1.20	122.1±1.03	72.8±2.3
aPDT	45.4±1.02	30.8±5.03	15.5±4.2
EP	93.1±1.10	118.5±2.05	71.9±2.8
aPDT + EP	5.08±0.85	10.2±2.81	3.9±3.1

We may suggest that the EP possibly increased the EPS permeability allowing the PS to reach the biofilm bottom layer and consequently the deeper cells, intensifying aPDT effect.

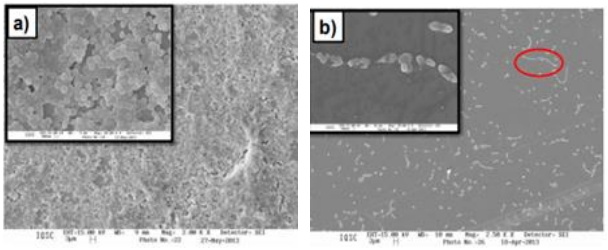


Figure 1. *S. aureus* biofilm before (a) and after treatment of aPDT + EP (b)

References

[1] Jamal, M., et al., J Chin Med Assoc. **81**, 7-11 (2018).
[2] de Melo, et al., Exp rev anti-infect ther. **11**, 669-693 (2013).
[3] Kim, Y.W., et al., Biof. Microb,**1**, 15016 (2015).
[4] Chandra, J., et al., J Dent Res, **80**, 903-8 (2001).
[5] Wu, J. and C. Xi, Appl Environ Microbiol, **75**, 5390-5 (2009).

Šviesolaidinės ATR IR spektroskopijos taikymas kasos vėžinių audinių tyrimui

Application of Fiber ATR IR Spectroscopy for Cancerous Pancreas Tissue Examination

Rimantė Bandzevičiūtė[1], Justinas Čeponkus[1], Valdas Šablinskas[1], Christian Teske[2], Gerald Steiner[3]
[1]Chemical Physics Institute, Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio Av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Department for Visceral, Thoracic and Vascular Surgery (VTG), University Hospital Carl Gustav Carus Dresden, Dresden University of Technology, Fetscherstr. 74, 01037 Dresden, Germany
[3]Clinical Sensoring and Monitoring, Faculty of Medicine Carl Gustav Carus, Dresden University of Technology, Fetscherstr. 13, 01307 Dresden, Germany
rimante.bandzeviciute@ff.vu.lt

Pancreatic cancer has one of the lowest survival rates [1] and usually it tends to spread to surrounding tissues, liver, lymph nodes, lungs or other more distant organs. The treatment of pancreatic cancer involves surgical operation, chemotherapy and radiotherapy. If the tumor is resectable, the success of treatment depends on the ability to determine its exact boundaries. It is necessary to remove all the cancerous cells in order to avoid the relapse of the malignancy and to prolong life of the patient. On the other hand, it is important to leave as much as possible of the non-damaged tissue in order to save vital functions of the organ. Therefore, a directly usable method for the identification of tumor borders during the surgery is needed.

A variety of methods of vibrational spectroscopy are being applied for examination of biological tissues in recent decades [2]. First attempts in such studies was to study thin slice of the tissue placed in the sample chamber of the spectroscopic instrument. The sample should be specially prepared, the thickness of the sample should be appropriate for the measurements. While using standard ATR (attenuated total reflection) technique, a thickness of the sample is not limited but a piece of tissue also should be cut and transferred to the device.

In case of application of spectroscopic methods in clinical diagnostics, it is important to examine the sample in its native conditions, at the shortest time and applying minimal sample pre-processing. In this study, fiber optics was applied for the spectroscopic measurements. ATR crystal of the probe enables measurements of the tissue without any specific preparation; changeable tips of the probe provide the possibility to strerilize them. Measurements could be performed *in situ* or *in vivo* conditions in a few minutes that is important for the use in the operating room during the surgery.

In this study cases of 27 patients with pancreas pathology (pancreatic ductal adenocarcinoma – PDAC, neuroendocrine carcinoma, metastatic tumors and pancreatitis) were investigated. Measurements were performed for the tissue removed during the surgery. ATR IR absorption spectra of normal and PDAC (the most common pancreatic cancer) tissue are represented in the Fig. 1. The increased intensity of the spectral bands located at 1034, 1207 and 1339 cm^{-1} is observed in the spectra of cancerous tissue. The increased intensity of these spectral bands of the tumorous tissue indicates altered levels of collagen in the tissue. The amount of collagen in PDAC tissue increases due to the desmoplasia which is a common feature of PDAC tumors. During this desmoplastic reaction fibroblast cells secrete more fibrous proteins (collagen) to the extracellular matrix of the tissue. The established spectral markers of tumorous pancreatic tissue indicate that applied technique is appropriate for identification of malignant pancreatic tissue.

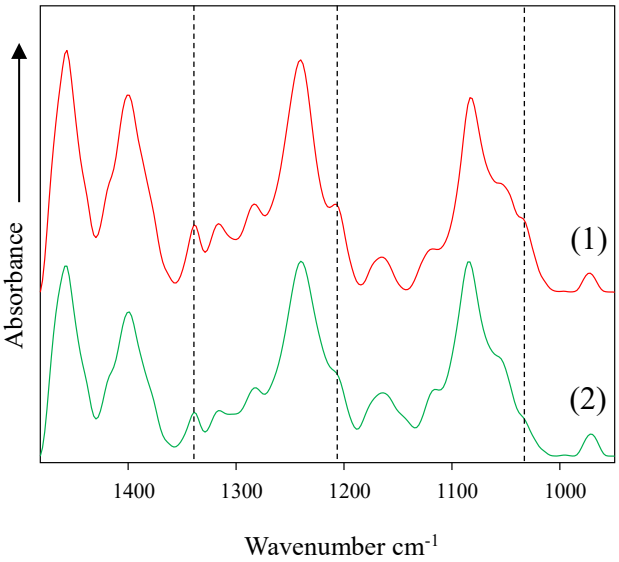


Fig. 1. Averaged ATR IR absorption spectra of PDAC (1) and normal (2) pancreas tissue of 16 patients

Key words: Pancreatic cancer, ATR IR spectroscopy, ATR fiber probe

Literature

[1] M. Orth, P. Metzger, S. Gerum, et al., Radiat Oncol **14**, 141 (2019).
[2] G. Bellisola, C. Sorio, Am J Cancer Res **2**, 1 (2012).

Plataus lauko antros harmonikos generacijos mikroskopija, skirta fibrozės progresavimo analizei esant arterinei plaučių hipertenzijai

Wide-field second-harmonic generation microscopy for analysis of fibrosis progression during pulmonary arterial hypertension

Danielis Rutkauskas[1], Lena Golubewa[1,2], Yaraslau Padrez[1,2], Renata Karpicz[1], Galina Semenkova[3], Igor Adzerikho[4], Olga Yatsevich[4], Tatyana Vladimirskaja[5], Tatsiana Kulahava[2], Polina Kuzhir[6]
[1]Center for physical sciences and technology, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Institute for nuclear problems of Belarusian state university, Bobruiskaya str. 11, BY-220006 Minsk
[3]Belarusian State University, Nezavisimosti Ave. 4, BY-220030 Minsk
[4]State Educational Establishment BelMAPE, Brovki st. 3, BY-220013, Minsk
[5]Central Scientific and Research Laboratory of BelMAPE, Lesnoy village 31, BY-220088 Minsk region
[6]University of Eastern Finland, Institute of photonics, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu
danielis.rutkauskas@ftmc.lt

Collagens are the key structural proteins in lung, responsible for the integrity of airways, bronchovesicular bundles, blood vessels, and alveolars. Its overproduction leads to fibrosis, often complicated with pulmonary arterial hypertension (PAH) – a syndrome caused by pulmonary arterial remodeling and leading to increased pulmonary vascular resistance, right ventricular hypertrophy, and heart failure. Conventional techniques for collagens imaging require several stages of preliminary tissue preparation and can cause undesirable morphological changes in the extracellular matrix, containing collagen. At the same time, second-harmonic generation (SHG) microscopy allows label-free imaging of collagen because of its non-centrosymmetric structure. In this study we demonstrate the application of recently developed wide-field SHG microscopy [1] for label-free investigation of fibrosis progression during PAH.

PAH in rats was chemically induced via monocrotaline injections. Tissue samples of healthy animals (control group) and animals with PAH on the 4th and 8th weeks of disease progression were investigated by a combination of brightfield, fluorescence, and SHG microscopies of hematoxylin-eosin (HE) stained samples. Imaging was performed on a home-build wide-field SHG microscope. Images of slices of lung tissue are presented in Fig. 1 with SHG signal colored in yellow and fluorescence in red. In control group, collagen can be seen to surround the blood vessel wall (marked with arrows in Fig. 1b) but is absent in the lung tissue. In rats with PAH, significant collagens overproduction is observed (Fig. 1d, f), while HE images (Fig. 1c, e) demonstrate only thickening of the walls of blood vessels as compared with control samples (Fig. 1a). In rats with PAH, collagens content increases in time-dependent manner, fibers are long, highly assembled, form dense fiber network both around blood vessels and in the surrounding tissue propagating deep inside the alveolar region (marked with arrows, Fig.1d, f). This supports our previous results [2], indicating a significant increase in the expression of collagens after 4-8 weeks of PAH progression.

Thus, SHG microscopy could serve as a powerful tool for label-free, fast, and sensitive analysis of fibrosis progression during pulmonary arterial hypertension.

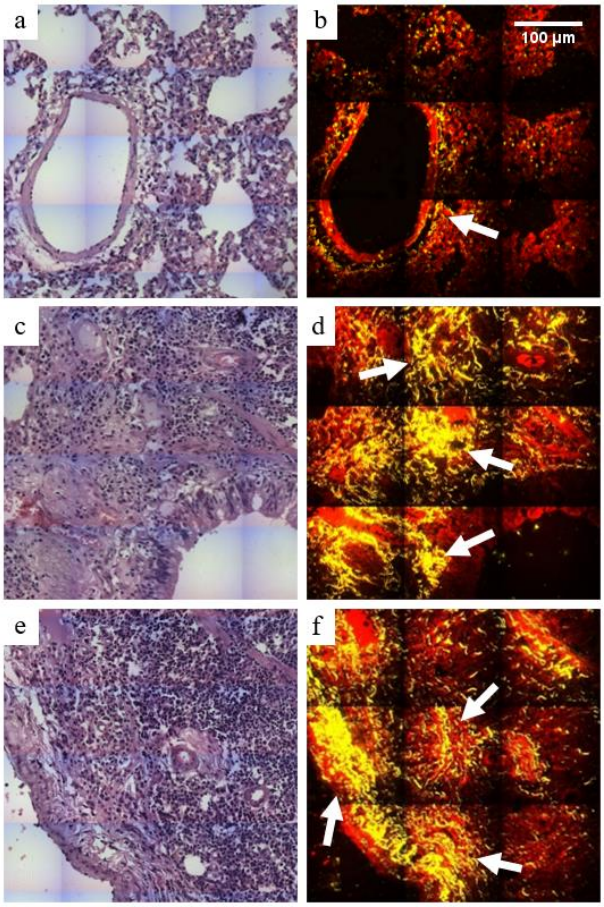


Fig.1. Brightfield images of HE-stained lung tissue (a, c, e), and merged fluorescence and SHG images (b, d, f) in: (a, b) – control group rats, (c, d) and (e, f) – rats on the 4th and the 8th week of PAH induction, respectively.

Keywords: second-harmonic generation, pulmonary arterial hypertension, fibrosis, collagen.

Literature

[1] A. Dementjev, R. Rudys, R. Karpicz, D. Rutkauskas, Lith. J. Phys. **60**, 145–153 (2020).
[2] I. Adzerikho, O. Yatsevich, T. Vladimirskaja, G. Semenkova, N. Amaegberi, ESC Congress, 82265 (in press) (2021).

Patogeninių mikroorganizmų identifikavimas ATR IR spektriniu metodu

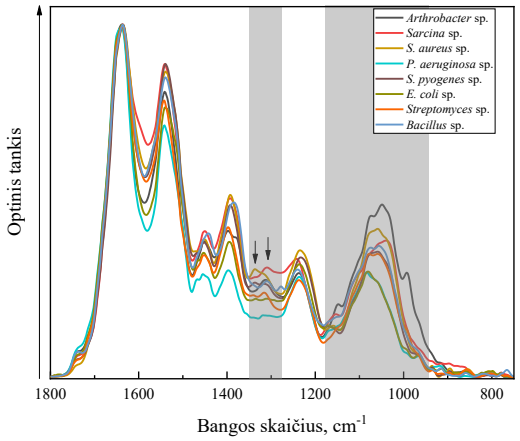
Identification of pathogenic microorganisms by means of ATR IR spectroscopy

Gerda Anužienė[1], Rimantė Bandzevičiūtė[1], Eglė Lastauskienė[2], Justinas Čeponkus[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Gamtos mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
mickunaitegerda@gmail.com

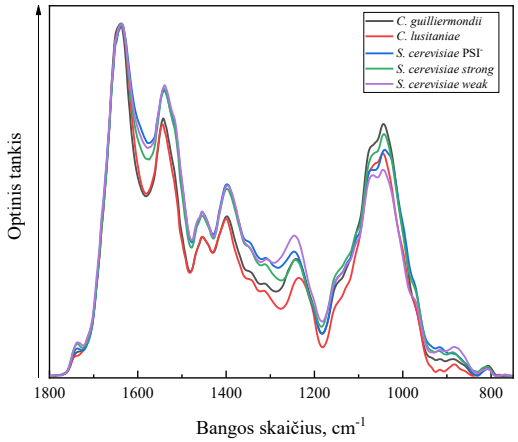
Patogeniniai mikroorganizmai, tokie kaip mieliagrybiai ir bakterijos, gali sukelti infekcines ligas, kurių komplikacijos sukelia pavojų paciento gyvybei. Šiuo metu mielių sukeliamoms ligoms gydyti yra skiriami priešgrybeliniai vaistai, o bakterijų sukeliamoms ligoms gydyti – antibiotikai. Esant mišriai grybelinei ir bakterinei infekcijai, gydymas medikamentais gali paveikti tik vieną mikroorganizmų tipą (eukariotus arba prokariotus), o išgyvenusi mikroorganizmų rūšis plinta dar greičiau. Todėl yra svarbu ankstyvoje susirgimo stadijoje tiksliai identifikuoti patogeninio mikroorganizmo rūšį. Siekiant identifikuoti skirtingas patogeninių mikroorganizmų rūšis yra taikomi įvairūs molekulinės biologijos, cheminiai ir fizikiniai tyrimo metodai, tačiau taikant šiuos metodus tyrimas užtrunka iki kelių dienų ar net savaičių. Taikant ATR IR spektrinį metodą nereikalingas specialus bandinių paruošimas, o spektro registravimas užtrunka kelias minutes, todėl identifikavimas gali būti atliekamas greičiau [1-3].

Mokslinio darbo metu tyrimas atliktas su 8 skirtingomis bakterijų ir 3 skirtingomis mielių rūšimis, iš viso ištirta 150 bandinių.

Svarbiausi spektriniai skirtumai, tarp bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektrų, yra stebimi spektrinėje srityje, esančioje nuo 1183 cm^{-1} iki 930 cm^{-1}, kuri susijusi su bakterijų ir mielių ląstelėse esančiais angliavandeniais. Taip pat mielių ir bakterijų ATR IR sugerties spektruose yra stebimas spektro kontūro pokytis, spektriniame intervale, esančiame nuo 1360 cm^{-1} iki 1280 cm^{-1}. 1 pav. pateikiami skirtingų bakterijų rūšių, o 2 pav. skirtingų mielių rūšių bandinių ATR IR sugerties spektrai.



1 pav. Skirtingų bakterijų rūšių ATR IR sugerties spektrai



2 pav. Skirtingų mielių rūšių ATR IR sugerties spektrai

Tyrimo metu siekta nustatyti patikimiausią bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektrų identifikavimo metodą, tam tikslui pasiekti taikyti du skirtingi statistinės analizės metodai – hierarchinė klasterių analizė (angl. *hierarchical cluster analysis* – HCA) ir principinių komponentų analizė (angl. *principal component analysis* – PCA).

Atlikus 150 bandinių HCA nustatyta, kad mielių ATR IR sugertiers spektrai gali būti identifikuojami 100 % tikslumu, o bakterijų ATR IR sugerties spektrai – 89,9 % tikslumu. Neteisingai grupei priskirti 6 *Arthrobacter* sp. bakterijų ATR IR sugerties spektrai. Taikant PCA statistinės analizės metodą nustatyta, kad mielių ATR IR sugerties spektrai gali būti identifikuojami 100 % tikslumu, o bakterijų ATR IR sugerties spektrai 91,2 % tikslumu. Taikant PCA, kaip ir HCA, bakterijų ATR IR sugerties spektrų identifikavimo tikslumui įtaką daro neteisingai priskirti 5 *Arthrobacter* sp. bakterijų ATR IR sugerties spektrai.

Reikšminiai žodžiai: virpesinė spektroskopija, infraraudonosios sugerties spektroskopija, patogeniniai mikroorganizmai, bakterijos, mielės

Literatūra

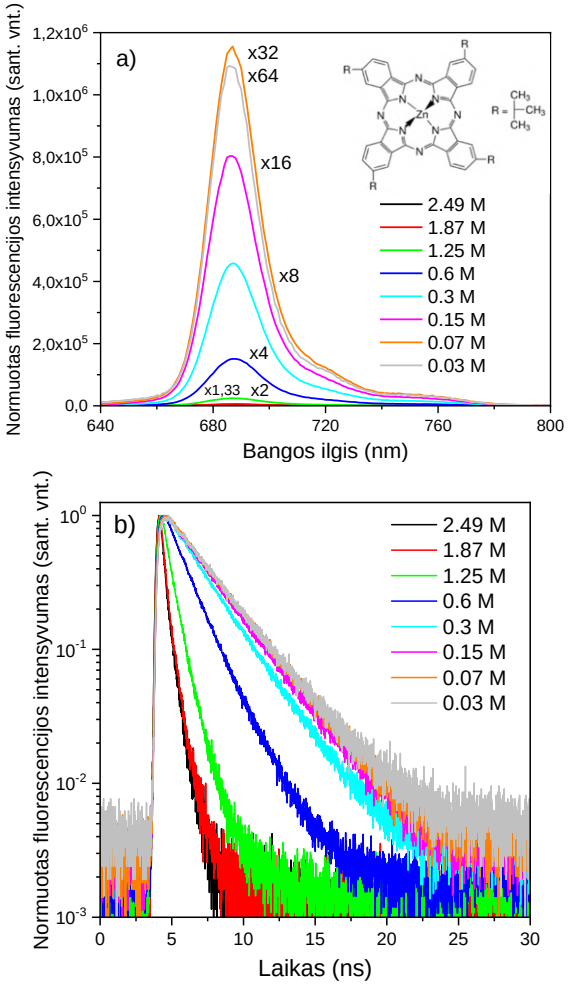
[1] M. Pigłowski, Int. J. Environ. Res. Public Health **16**, 477 (2019)
[2] M. Harz, P. Rösch, J. Popp, Cytometry **75A**, 104-113 (2009)
[3] B. Buszewski, A. Rogowska, P. Pomastowski, M. Złoch, V. Railean-Plugaru, J. AOAC Int **100**, 1607-1623 (2017)

Koncentracinio gesinimo matavimai plonose cinko ftalocianino plėvelėse

Concentration quenching measurements in thin films of Zinc-Phthalocyanine

Justė Tamošiūnaitė[1,2], Simona Streckaitė[2], Jevgenij Chmeliov[2,3], Andrius Gelžinis[2,3], Leonas Valkūnas[2,3]
[1]Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, 10257 Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
[3]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, 10222, Vilnius
juste.tamosiunaite@gmc.stud.vu.lt

Žymiai sumažėjęs fluorescencijos emisijos intensyvumas didėjant fluoroforų koncentracijai žinomas kaip koncentracinis gesinimas arba agregacijos sukeltas gesinimas [1]. Šis reiškinys sumažina fluorescencijos kvantinį našumą [2]. Koncentracinis gesinimas vyksta tiek organinėse, tiek neorganinėse molekulių sistemose nuo biologijos iki optoelektronikos [1, 3]. Jis gali turėti neigiamą įtaką optoelektronikos sistemų ar prietaisų veikimui.



1 pav. a) TB-ZnPC plonų plėvelių fluorescencijos spektrai normuoti į 2,49 M koncentraciją. Dešinėje pusėje TB-ZnPC struktūra;
b) Fluorescencijos relaksacijos kinetikos ties 690 nm.

Cinko ftalocianino molekulės yra plačiai taikomos medicinoje [4] bei optoelektornikoje [5] dėl jų intensyvios sugerties raudonoje regimosios šviesos srityje, pastebimai ilgų tripletinių gyvavimo trukmių ir singletinio deguonies gamybos savybių. TB-ZnPC molekulės yra puikios modelinės sistemos dėl savo panašumo į chlorofilo molekules [4, 5]. Šiame darbe aptariamas cinko 2,9,16,23-tetra-*tert*-butil-29H,31H-ftalocianino (TB-ZnPC) toluene koncentracinis gesinimas plonose plėvelėse, siekiant detaliai suprasti koncentracinio gesinimo efektą bei padėti pagrindus universalaus modelio sukūrimui.

1a pav. rodo, kad TB-ZnPC normuotuose fluorescencijos spektruose į 2,49 M koncentraciją aiškiai matomas sumažėjęs fluorescencijos intensyvumas ir stebimas agregacijos sukeltas gesinimas. Ta pati tendencija 1b pav. vaizduoja greitesnę 690 nm juostos fluorescencijos relaksacijos kinetiką, esant didelėms tiriamų plėvelių koncentracijoms. Mažų koncentracijų plėvelėse nėra agregatų, kurie lemtų koncentracinį gesinimą, tad kinetikų trukmės pastebimai ilgesnės.

Reikšminiai žodžiai: koncentracinis gesinimas, cinko ftalocianinas, molekulių agregatai, laikinės skyros fluorescencija.

Literatūra

[1] A. I. Burshtein, Concentration of noncoherent excitation in solutions, Sov. Phys. Usp. 27, 579-606 (1984).
[2] Eftink M.R. Fluorescence Quenching: Theory and Applications. In: Lakowicz J.R. (eds) Topics in Fluorescence Spectroscopy. Topics in Fluorescence Spectroscopy, vol 2. Springer, Boston, MA (2002).
[3] Y. Huang, J. Xing, Q. Gong, L.C. Chen, G. Liu, C. Yao, Z. Wang, H.L. Zhang, Z. Chen, Q. Zhang, Reducing aggregation caused quenching effect through co-assembly of PAH chromophores and molecular barriers, Nat. Commun., 10 (2019) 1–9.
[4] Allen, C. M.; Sharman, W. M.; Van Lier, J. E. J. Porphyrins Phthalocyanines (2001), 5, 161−169.
[5] M. Yüzeroğlu, G. Keser Karaoğlan, G. Gümrükçü Köse, A. Erdoğmuş, Synthesis of new zinc phthalocyanines including schiff base and halogen; photophysical, photochemical, and fluorescence quenching studies, J. Mol. Struct., 1238 (2021) 130423.

Naudingų junginių ekstrakcija iš akvakultūros nuotekose kultivuojamų mikrodumblių naudojant didelio stiprio impulsinio elektrinio lauko poveikį

Valuable compounds extraction from microalgae cultivated in aquaculture using high intensity pulsed electric fields

Gintarė Dalmantaitė[1,2], Kamilė Jonynaitė[2],
[1]Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
[2] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
gintare.dalmantaite@gmc.stud.vu.lt

Plečiantis akvakultūros industrijai, didėja jos nuotekų kiekiai. Vienas iš perspektyvių, tvarių jų valymo metodų yra bioremediacija – mikroorganizmų panaudojimas teršalų skaidymui. Bioremediacijai dažnai naudojami mikrodumbliai, iš kurių galima išskirti aukštos pridėtinės vertės junginius. Pavyzdžiui, aukšto slėgio homogenizacija yra efektyvus baltymų išskyrimo metodas. Tačiau šio proceso metu sumaišomos skirtingos frakcijos, todėl reikalingas papildomas gryninimo procesas. Dėl to ieškoma kitų efektyvesnių technologijų [1].

Vienas iš perspektyvių junginių išskyrimo iš mikrodumblių metodų yra impulsinis elektrinis laukas (angl. *PEF – pulsed electric field*). Šios technologijos veikimo mechanizmas pagrįstas ląstelės veikimu trumpais (µs-ms), stipriais (5-80 kV/cm) elektrinio lauko impulsais. PEF metodas pasižymi daugybe privalumų: selektyvumas, išsiskyrusių medžiagų grynumas, galimybė didinti pramonės apimtis [2].

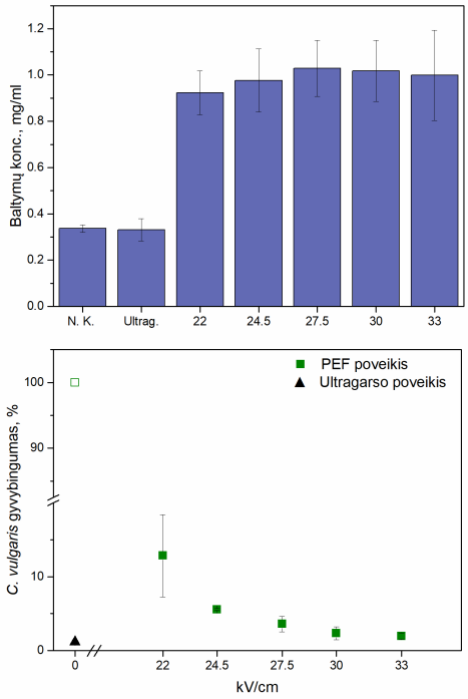
Kadangi mikrodumbliai turi labai tvirtą ląstelės sienelę, reikia pakankamai intensyvių elektrinio lauko impulsų jos pralaidumui padidinti. Tam perspektyvu naudoti didelio elektrinio lauko stiprio (15-80 kV/cm) PEF. Taip padidinus ląstelės sienelės, membranos pralaidumą, būtų galima išskirti aukštos pridėtinės vertės junginius iš mikrodumblių biomasės.

Išskiriant medžiagas PEF metodu, svarbu atsižvelgti į įvairius bandinio ir PEF parametrus. Pavyzdžiui, išskiriant baltymus, reikia optimizuoti biomasės koncentraciją, inkubacijos temperatūrą po PEF poveikio, pH, elektrinio lauko stiprį [3].

Bandomųjų tyrimų tikslas buvo nustatyti optimalius didelio stiprio PEF parametrus baltymų ekstrakcijai iš *Chlorella vulgaris* ir jų įtaką šių mikrodumblių gyvybingumui. PEF poveikis buvo taikomas naudojant 0,2 cm skersmens pratekančią kiuvetę (srauto greitis 2 ml/min). Bandiniai (koncentracija 0,02 g/ml, laidumas 1,4 mS/cm, pH 7,1) buvo veikiami 22- 30 kV/cm, 5 μs trukmės, 1 Hz dažnio impulsais, 10 minučių. Išskirtų baltymų kiekis nustatytas Bradford metodu.

Gauti rezultatai (1 pav.) parodė, kad didelio stiprio PEF padėjo išskirti 3 kartus daugiau baltymų iš mikrodumblių, palyginus su kontrole. Jų gyvybingumas sumažėjo 87 % – 98 %. Ekstrakcijos efektyvumui nustatyti reikia papildomų tyrimų su teigiama kontrole.

Šiuos rezultatus galima taikyti tvarios medžiagų išskyrimo iš mikrodumblių biomasės pramonės plėtrai. Šių mikroorganizmų gyvybingumo pokyčių nustatymas po PEF poveikio svarbus mikrodumblių pakartotinio panaudojimo galimybių įvertinimui. Taigi, didelio stiprio PEF yra potencialus industrinis metodas.



1 pav. *C. vulgaris* baltymų ekstrakcija ir gyvybingumo pokytis naudojant skirtingus elektrinio lauko stiprio parametrus

Reikšminiai žodžiai : impulsinis elektrinis laukas, mikrodumbliai, bioremediacija, ekstrakcija.

Literatūra

[1] Han, P., Lu, Q., Fan, L., & Zhou, W. (2019). A Review on the Use of Microalgae for Sustainable Aquaculture. *Applied Sciences*, *9*(11), 2377.

[2] Melchior, S., Calligaris, S., Bisson, G., & Manzocco, L. (2020). Understanding the impact of moderate-intensity pulsed electric fields (MIPEF) on structural and functional characteristics of pea, rice and gluten concentrates *Food and Bioprocess Technology*, *13*(12), 2145–2155.

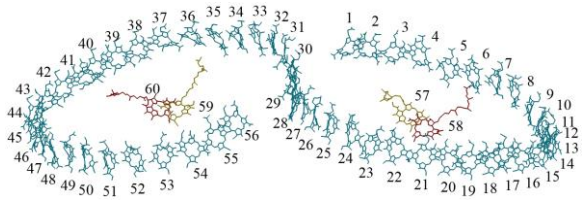
[3] Scherer, D., Krust, D., Frey, W., Mueller, G., Nick, P., & Gusbeth, C. (2019). Pulsed electric field (PEF)-assisted protein recovery from Chlorella vulgaris is mediated by an enzymatic process after cell death. *Algal Research*, *41*, 101536.

Sustiprinto sužadinimų gaudimo LH1-RC-PufX klasteriuose fenomenologija

Phenomenology of enhanced excitation trapping in clusters of LH1-RC-PufX

Gediminas Trinkūnas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
gediminas.trinkunas@ftmc.lt

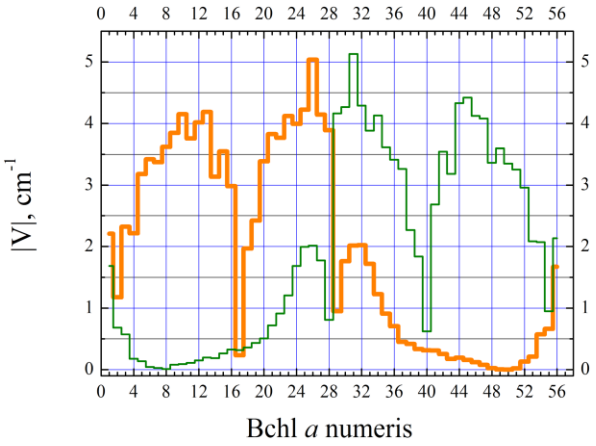
Fototrofinių bakterijų fotosintetinančios membranos dažniausiai yra sudarytos iš dviejų rūšių šviesą surenkančių kompleksų: kamieninių LH1 (sugerties maximumas ties 875 nm), žiedu juosiančių reakcinius centrus (RC) ir periferinių žiedinių LH2 (850 nm), kartu formuojančių energetinį „piltuvėlį“ į RC, kur įvyksta pirminis krūvio atskyrimas. Laukinio tipo *Rba. sphaeroides* bakterijų membranose kamieniniai kompleksai yra dimerų $(LH1\text{-}RC\text{-}PufX)_2$ pavidalo (žiūr. 1 pav.) ir yra kompaktiškai išsidėstę dimerų juostomis ar



1 pav. *Rba. sphaeroides* kamieninio dimero $(LH1\text{-}RC\text{-}PufX)_2$ bachteriochlorofilo (Bchl *a*) molekulių išsidėstymas (žiūr. baltymų duomenų bazės bylas (PDBID) 4JCB ir 4JC9). Žiedų centruose esančios specialiosios RC Bchl *a* molekulių poros 57-58 ir 59-60 yra pirminiai krūvio donorai.

pavieniui, apsupti LH2 kompleksais [1]. Polipeptidai PufX, užpildantys tarpus Bchl *a* molekulių grandinėje yra atsakingi už RC chinonų išsidėstymą elektrono pernašos grandinėje, o taip pat ir S pavidalo dimerų struktūrą, nors pasitaiko ir monomerų. Kamieninių kompleksų klasterių, o ypač dimerų juostų susidarymo tikslingumas išlieka neaiškus nuo pat jų atradimo [1].

Visai neseniai buvo atlikti palyginamieji sužadintų *Rba. spahaeroides* LH1-RC-PufX monomero ir dimero fluorescensijos kinetikos matavimai, kurie parodė, kad sužadinimai dimere yra sugaudomi beveik dvigubai greičiau nei monomere, nepriklausomai ar RC yra atviri ar uždari [2]. Šio pranešimo tikslas yra klasterizacijos efektą aprašyti paprastu fenomenologiniu atsitiktinio sužadinimų klaidžiojimo modeliu, panašiu į taikytą sužadinimų anihiliacijos aprašymui žiediniuose LH1 ir LH2 kompleksuose [3]. Pagrindinis tokio aprašymo privalumas yra tas, kad visos būtinos kinetinės konstantos yra pasitelkiamos iš ankstesnių eksperimentų [4, 5]. Remiantis $(LH1\text{-}RC\text{-}PufX)_2$ struktūra (1 pav.) suskaičiuotos žiedo Bchl *a* ir RC molekulių sąveikos (2 pav.) rodo, kad energijos pernaša tarp žiedo ir RC vyksta dviem kanalais, atitinkančiais sąveikos kreivių maksimumus, o vienas iš tų kanalų dėl labai trumpos sužadinimo šuolio LH1 žiede trukmės [3] yra bendras abiem RC. Tai leidžia sudaryti energijos pernašos trukmių $(LH1\text{-}RC\text{-}PufX)_N$ klasteryje hierarchiją. Iš jos seka, kad (mažiausiai iki N=6) visi RC komunikuoja su



2 pav. Dipol-dipolinės sąveikos tarp LH1 Bchl *a* molekulių ir RC poros žemesnės energijos būsenos. 57-58 pora atitinka storesnę, o 59-60 – plonesnę linijas.

vienu bendru Bchl *a* molekulių agregatu, kuriame sužadinimo pernašos vyksmai yra žymiai greitesni už pernašas tarp LH1 ir RC. Tokio klasterio vidutinė sužadinimo gyvavimo trukmė atvirų RC atveju lygi

$$\langle\tau\rangle = \tau_t/N + \tau_{RC}[1 + \tau_t/(\tau_d N)], \qquad (1)$$

kur τ_t, τ_d ir τ_{RC} yra sužadinimo pernašos LH1→RC, RC→LH1 ir krūvio atskyrimo RC vidutinės trukmės, o N yra RC skaičius. Gautoji išraiška (1) gerai dera su [2] darbo rezultais.

Pateikiama taip pat ir LH1-RC klasterių sužadinimo gesinimo analizė aukštesnių žadinimo intensyvumų atveju, kai randasi uždarų RC. Ji parodo, kad klasterizacija užtikrina aukštą bakterinės fotosintezės našumą prie įvairių apšvietimo sąlygų.

Reikšminiai žodžiai: fototrofinių bakterijų fotosintezė, šviesos surinkimas, LH1-RC-PufX

Literatūra

[1] S. Bahatyrova,R. N. Frese, C. A. Siebert, J. D. Olsen, K. O. van der Werf, R. van Grondelle, R. A. Niederman, P. A. Bullough, C. Otto, and C. N. Hunter. Nature 430, 1058 (2004).
[2] M. Chenchiliyan, K. Timpmann, E. Jalviste, P. G. Adams, C. N. Hunter, A. Freiberg. BBA 1857, 634 (2016).
[3] G. Trinkunas. J. Luminesc. 102-103, 532 (2003).
[4] Z. Katiliene, E. Katilius, and N. W. Woodbury. Biophys. J. 84, 3240 (2003).
[5] P. D. Dahlberg, P.-Ch. Ting, S. C. Massey, M. A. Allodi, E. C. Martin, C. N. Hunter & G. S. Engel. Nature Commun. 8, 988 (2017).

Aukso nanoklasterių, stabilizuotų JSA, susikaupimo efektyvumas ląstelėse

Bovine serum albumin stabilized gold nanoclusters' accumulation effectiveness in cells

Kornelija Buivydaitė[1,2], Greta Jarockytė[1,2], Vilius Poderys[1], Vitalijus Karabanovas[1,3], Ričardas Rotomskis[1,4]

[1] Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius
[2] Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[3] Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
[4] Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius

kornelija.buivydaite@gmc.stud.vu.lt

Pagrindiniai šiuolaikinio mokslo tikslai onkologijoje yra pagerinti ankstyvą vėžinių darinių diagnostiką bei padidinti gydymo efektyvumą. Ypatingas dėmesys yra skiriamas naujai besivystančiai medicinos sričiai – navikų teranostikai. Ieškoma nanodalelių, kurios galėtų būti naudojamos tiek kaip diagnostiniai žymekliai, tiek kaip fotovaistai. Tokios dalelės, kurios atlieka diagnostinę ir terapinę funkcijas, vadinamos teranostinėmis dalelėmis. Viena tokių medžiagų galėtų būti J. Xie grupės aprašyti aukso (Au) ir jaučio serumo albumino (JSA) nanoklasteriai – JSA–Au NK [1]. JSA–Au NK – ne vienerius metus yra tiriami kaip potencialūs fotovaistai bei fotoliuminescuojantys žymekliai diagnostikoje. Tačiau yra neaišku, kaip jie kaupiasi ląstelėse ir kaip yra šalinami

JSA–Au NK pasižymi ryškia fotoliuminescencija raudonojoje regimojo spektro srityje (λ_{max} = 680 nm). Raudonoji sritis patenka į žinomą audinių skaidrumo langą, todėl JSA–Au NK yra tinkami tiek vaizdinimui, tiek diagnostikai. Be to, švitinami regimąją šviesa – 405 nm spinduliuote – šie nanoklasteriai generuoja aktyvias deguonies formas, kurios parodo jų kaip fotovaistų potencialą [2].

Svarbu, kad šie nanoklasteriai vėliau būtų saugiai pašalinami iš organizmo. A. Cantelli ir kt. parodė, kad JSA–Au NK kaip tik linkę kauptis kepenyse ir inkstuose – organuose, kurie prisideda prie šalinimo [3]. Šio darbo tikslas buvo ištirti, kaip tokie NK susikaupia skirtingose šalinimo organų ląstelėse – inkstų embrioninėse HEK–293T bei kepenų vėžinėse HEP–G2 ląstelėse.

Tyrimo metu naudotas konfokalinis mikroskopas Nikon Eclipse Te2000–S, žadinta 404 nm ir 488 nm bangos ilgio lazeriais, matuota naudojant 621 – 720 nm juostinį pralaidumo filtrą. JSA-Au NK buvo susintetinti modifikuotu J. Xie aprašytu sintezės metodu [1]. Žadinant lazeriu ties 488 nm, šių nanoklasterių fluorescencija stebėta raudonojoje spektro srityje. Ląstelių branduoliai dažyti su Hoechst dažu, kurio fluorescencija sužadinus ties 404 nm stebėta mėlynojoje regimojo spektro dalyje (λ_{max} = 452 nm). JSA susikaupimui ištirti naudotas fluorescenciniu dažu Alexa488 konjuguotas JSA (JSA–Alexa488), kurio fluorescencija sužadinus ties 488 nm stebėta žaliojoje regimojo spektro dalyje (λ_{max} = 520 nm),

Pirmiausia, inkubuodami JSA konjuguotą suAlexa488 fluorescenciniu dažu, mes nustatėme, ar jaučio serumo albuminas patenka į ląsteles. Panaudojant konfokalinę mikroskopiją, buvo nustatyta, kad tiek vėžinėse HEP–G2, tiek embrioninėse HEK–293T ląstelėse šis baltymas susikaupė sėkmingai. Taigi, galėjome daryti išvadą, kad pats baltymas JSA–Au NK patekimo į ląstelę neturėtų apriboti. Vėliau buvo tiriamas JSA–Au NK susikaupimas HEK–293T bei HEP–G2 ląstelėse po 24 h inkubacijos. Rezultatai parodė, kad JSA–Au NK gerai kaupėsi HEK–293T (gana tolygiai ląstelių plote išsiskirstę JSA–Au NK), tačiau prastai HEP–G2 ląstelėse (stebimi nebent pavieniai didesni agregatai ląstelių pakraščiuose).

Buvo ištirta ir JSA–Au NK susikaupimo dinamika HEK–293T ląstelėse. Jos buvo inkubuotos su JSA–Au NK nuo 15 min iki 6 h. Pastebėta, kad iki 1 h susikaupimas labai mažais, tik pavienės ląstelės turi sukaupę NK, po 1 – 3 h jau matomas didesnis kiekis JSA–Au NK ląstelių ribose, o po 4 – 6 h dar daugiau JSA–Au NK patenka į ląsteles ir jau yra stebimas efektyvus susikaupimas.

Apibendrinant galima teigti, kad JSA–Au NK gerai susikaupia tik HEK–293T ląstelėse . Praėjus vos 4 – 6 h po inkubacijos šiose ląstelėse jau stebimas reikšmingas JSA–AU NK susikaupimas. Tuo tarpu HEP–G2 ląstelėse net po 24 h nebuvo stebimas JSA-Au NK susikaupimas.

Reikšminiai žodžiai: jaučio serumo albuminas, aukso nanoklasteriai, susikaupimas ląstelėse

Literatūra

[1] Xie J., Zheng Y., Ying J.Y. Protein-Directed Synthesis of Highly Fluorescent Gold Nanoclusters. J. Am. Chem. Soc.; 2009, 131, 888-889.
[2] Poderys V., Jarockyte G., Bagdonas S., Karabanovas V., Rotomskis R. Protein-stabilized gold nanoclusters for PDT: ROS and singlet oxygen generation. J. Photochem. Photobiol.; 2020, 204
[3] Cantelli A., Battistelli G., Guidetti G., Manzi J., Di Giosia M., Montalti M. Luminescent gold nanoclusters as biocompatible probes for optical imaging and theranostics. Dyes and Pigments; 2016, 135, 64-79

Nitellopsis obtusa pH juostų tyrimas fluorescencinės spektroskopijos metodu

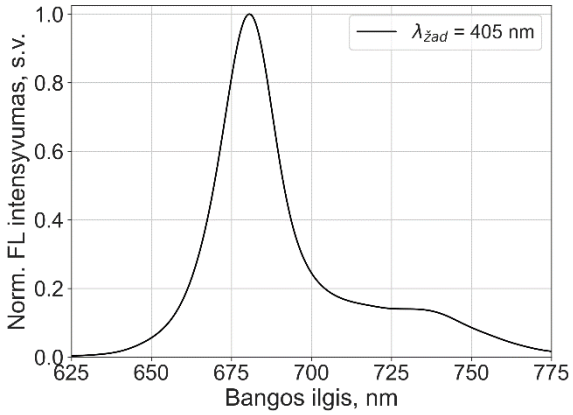
Investigation of pH banding in *Nitellopsis obtusa* via fluorescence spectroscopy

Aušrinė Navickaitė[1], Vilmantas Pupkis[1], Saulius Bagdonas[2]
[1]Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
ausrine.navickaite@gmc.stud.vu.lt

Fotosintezė yra pagrindinis deguonies ir maisto medžiagų šaltinis biosferoje, tačiau, nepaisant proceso svarbos, jos sąveika su įvairiais augalų fiziologiniais procesais dar nėra visiškai suprasta. *Characeae* šeimos dumbliai yra unikali modelinė sistema, leidžianti tirti organizmų fotosintetinį aktyvumą, kadangi šių dumblių tarpubamblių ląstelėms būdingos skirtingų pH verčių juostos, susidarančios terpėje aplink ląstelę. Šios sritys yra priklausomos nuo plazminės membranos pernašos sistemų, svarbių fotosintezės efektyvumui [1].

Šiame tyrime pH juostų susidarymas tirtas registruojant chlorofilo fluorescencijos spektrus. Signalai fiksuoti optine šviesolaidine sistema, bandinį žadinant 405 nm šviesos diodu. Matavimuose naudotos *Nitellopsis obtusa* tarpubamblių ląstelės, fluorescencija registruota visame bandinio ilgyje. Siekiant nustatyti išorinės terpės rūgštingumo poveikį gautų signalų parametrams, eksperimentų metu ląstelės patalpintos organinio stiklo kameroje, kuri pripildyta reikiamo pH (4, 7,2, 10) kontroliniu APW tirpalu.

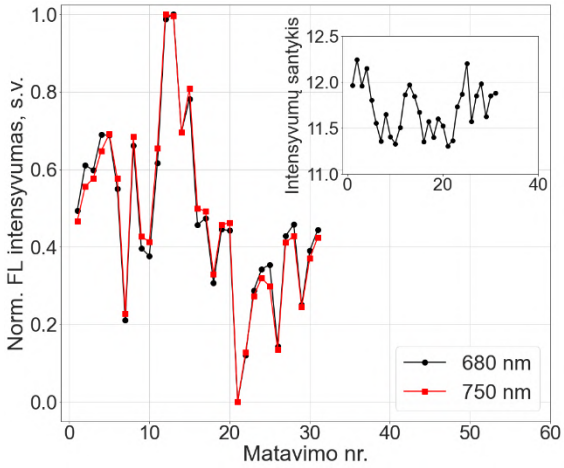
Registruoti fluorescencijos spektrai, kuriems būdingi du maksimumai: pagrindinis - ties 680 nm, antrasis - ties 739 nm (1 pav.). Pastebėta, kad šiuose taškuose fiksuojamas intensyvumas išilgai ląstelės yra kintantis, o verčių svyravimai stebimi nepriklausomai nuo išorinės terpės pH.



1 pav. *Nitellopsis obtusa* normuotas fluorescencijos (FL) spektras.

Spektro formos pokytis įvertintas apskaičiuojant intensyvumų santykius ties parinktais bangos ilgiais. Nustatyta, kad verčių, registruotų ties 680 nm ir 750 nm, santykis yra kintantis. Kitoks rezultatas gautas įvertinus intensyvumus ties 710 nm ir 750 nm. Šių parametrų santykis kito nežymiai, o skirtumai stebėti analizuojant ankstesnį santykį nebuvo išlikę.

680 nm ir 750 nm santykių vertės taip pat leido įvertinti ryšį tarp šio parametro pokyčių ir intensyvumo skirtumų išilgai ląstelės. 2 pav. pateikiami rezultatai, gauti signalą registruojant ne buferiniame APW tirpale. Pastebėta, kad intensyvumų pokyčiai buvo susiję su spektro formos pokyčiais.



2 pav. 680 nm ir 750 nm bangos ilgių normuoti fluorescencijos (FL) intensyvumai išilgai ląstelės ir jų santykio kitimo kreivė.

Tyrimo rezultatai leidžia teigti, kad fotosintetinis aktyvumas išilgai *Nitellopsis obtusa* tarpubamblio ląstelės yra kintantis, o šie skirtumai gali būti susiję su pH juostų susidarymu. Pasirinktas optinis, neinvazinis tyrimo metodas yra pakankamai jautrus detektuoti fiziologinius pokyčius, todėl detalesni fluorescencijos tyrimai leistų geriau įvertinti pH juostų ir fotosintetinių procesų ryšį.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, fluorescencinė spektroskopija, pH juostos.

Literatūra

[1] A. A. Bulychev, A. A. Cherkashin, A. B. Rubin, W. J. Vredenberg, V. S. Zykov, and S. C. Müller, 'Comparative study on photosynthetic activity of chloroplasts in acid and alkaline zones of Chara corallina', *Bioelectrochemistry Amst. Neth.*, vol. 53, no. 2, pp. 225–232, 2001.

Baltymų kinazių įtaka plyšinių jungčių jautrumui farmakologinėmis medžiagomis

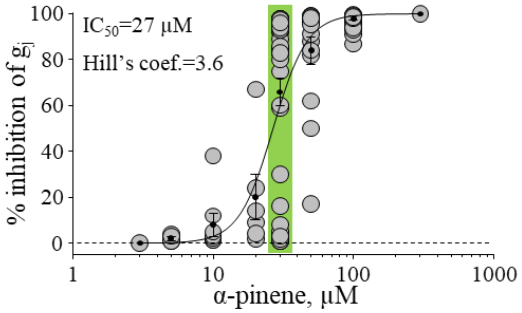
Regulation of gap junction chemical gating by protein kinases

Rokas Mickus, Vytautas Raškevičius, Gintarė Jančiukė, Vytenis Arvydas Skeberdis
Lietuvos sveikatos mokslų universitetas, Kardiologijos institutas, Sukilėlių pr. 15, LT-50162, Kaunas
Rokas.Mickus@lsmu.lt

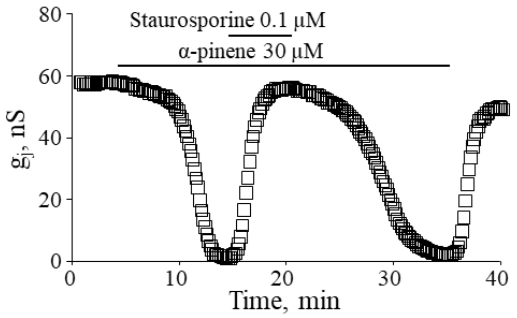
Fiziologiniai ir patologiniai procesai, tokie kaip homeostazė, embriogenezė, vystymasis, naviko formavimasis ir ląstelių judėjimas priklauso nuo ląstelių tarpusavio ryšio sinchronizavimo. Plyšinės jungtys (PJ) – tai tarpląsteliniai baltyminiai kanalai, užtikrinantys jonų mainus, elektrinę sąveiką tarp ląstelių, antrinių signalinių molekulių ir mažų (iki 1 kDa) metabolitų pernašą bei kiekvienos ląstelės makromolekulinį savitumą. PJ kanalai yra sudaryti iš dviejų puskanalių, o kiekvieną puskanalį sudaro šeši koneksinų (Cx) subvienetai. Cx randami daugumoje organizme esančių ląstelių – tiek vystymosi metu, tiek suaugusiame organizme. Cx nėra suagusiųjų skeleto raumenyse ir laisvai judančiose ląstelėse, kurios neturi glaudaus kontakto su kitomis ląstelėmis, pvz., raudonieji kraujo kūneliai. Cx genų šeimą sudaro 21 narys, turintis skirtingas reguliavimo savybes. Kiekvienas puskanalis turi greituosius ir lėtuosius vartus, kurie jautrūs įtampai, tačiau tik lėtieji vartai yra valdomi cheminėmis medžiagomis. Pagrindiniai PJ laidumo ir vartų varstymosi reguliatoriai yra jungties įtampa, viduląstelinis pH, viduląstelinė dvivalenčių katijonų koncentracija (Ca^{2+}, Mg^{2+}), fosforinimas ir cheminiai moduliatoriai bei vaistai, kurie naudojami įvairioms ligoms, susijusioms su tarpląstelinio ryšio sutrikimais, gydyti, tokioms kaip širdies aritmija, epilepsija, insultas, navikai [1].

Neseniai atliktame tyrime žiurkių Novikoff hepatomos ląstelėse, ekspresuojančiose endogeninį Cx43, parodėme, kad aromatinių augalų eterinių aliejų sudedamosios dalys – monoterpenai sabinenas ir α-pinenas bei seskviterpenas α-kopaenas – yra galingi ir efektyvūs Cx43 PJ inhibitoriai, veikiantys lėtuosius PJ vartus [2]. Tęsdami tyrimus nustatėme, kad monoterpenas α-pinenas panašiai veikė ir Hela ląstelių, ekspresuojančių egzogeninį Cx43, PJ laidumą, tačiau dažnai ta pati medžiagos koncentracija sukeldavo labai skirtingą poveikį. Pvz., α-pineno koncentracijos, artimos IC_{50} (30 µM), poveikis svyravo nuo jokio poveikio iki pilno Cx43 PJ laidumo (g_j) blokavimo (1 pav.). Todėl iškėlėme hipotezę, kad α-pineno poveikis Cx43 PJ laidumui gali priklausyti nuo baltymų kinazių aktyvumo, kuris gali labai skirtis skirtingose ląstelės ciklo fazėse. Žinoma, kad Cx fosforinimas gali turėti įtakos PJ kanalų formavimuisi, degradacijai ir varstymuisi [3]. Tačiau mokslinėje literatūroje nėra duomenų, kad fosforinimas gali pakeisti PJ laidumą moduliuojančių vaistų potenciją ir/ar efektyvumą.

Norėdami ištirti hipotezę, kad α-pineno poveikio Cx43 PJ laidumui nevienodumas gali priklausyti nuo Cx43 fosforinimo, naudojome neselektyvų kinazių inhibitorių staurosporiną. Nustatėme, kad staurosporinas kontrolėje neturėjo jokio poveikio g_j, tačiau visiškai blokavo α-pineno slopinamąjį poveikį (2 pav.).



1 pav. α-pineno poveikio Cx43 PJ laidumui priklausomybė nuo koncentracijos. Žalia spalva paryškintas 30 µM α-pineno poveikis (n=39).



2 pav. α-pineno poveikio Cx43 PJ laidumui blokavimas staurosporinu.

Šį blokavimą buvo galima įveikti, panaudojant didesnes α-pineno koncentracijas, ką savo ruožtu galėjo blokuoti didesnės staurosporino koncentracijos, tačiau tik iki tam tikros aiškios ribos. Todėl padarėme išvadą, kad mūsų nustatytas naujas Cx43 PJ laidumo valdymo būdas yra susijęs su alosterine nuo fosforinimo priklausoma α-pineno poveikio fasilitacija. Tolimesniais tyrimais sieksime identifikuoti konkrečias baltymų kinazes, nuo kurių aktyvumo priklauso atrastas fenomenas.

Reikšminiai žodžiai: plyšinės jungtys, koneksinas 43, baltymų kinazės.

Literatūra

[1] Srinivas, M. (2009). Pharmacology of Connexin Channels. *Connexins*, 207–224.
[2] Mickus R *et al*. (2021) The effect of nutmeg essential oil constituents on Novikoff hepatoma cell viability and communication through Cx43 gap junctions. *Biomed Pharmacother*, 135:111229.
[3] Lampe PD, Lau AF. (2000) Regulation of gap junctions by phosphorylation of connexins. *Arch Biochem Biophys*, 384(2):205-15.

Aukštynkeičių nanodalelių ir mezenchiminių kamieninių ląstelių sinergija: tikslinės navikų teranostikos link

Synergy of upconverting nanoparticles and mesenchymal stem cells towards targeted tumor theranostics

Alėja Marija Daugėlaitė[1,2], Greta Jarockytė[1,2], Artiom Skripka[3], Vilius Poderys[1], Vitalijus Karabanovas[1], Fiorenzo Vetrone[3], Ričardas Rotomskis[1]
[1] Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius
[2] Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10257 Vilnius
[3] Centre Énergie, Matériaux et Télécommunications, Institut National de la Recherche Scientifique, Université du Québec, 1650 Boul. Lionel-Boulet, Varennes, QC, J3X 1S2, Canada
aleja.daugelaite@gmc.stud.vu.lt

Šiuo metu onkologijoje navikų gydymui dažniausiai yra taikomi įvairūs standartiniai metodai tokie kaip chemoterapija, radioterapija ar chirurginis naviko pašalinimas, tačiau šiems metodams trūksta specifiškumo, todėl yra pažeidžiamos ir sveikos audinių ląstelės. Vienas iš sprendimo būdų galėtų būti sparčiai besivystančios nanotechnologijos. Pastaruoju metu ypač didelis dėmesys skiriamas teranostinėms nanodalelėms, kurios pasižymi tiek terapinėmis, tiek diagnostinėmis savybėmis [1]. Tačiau nanodalėms patekus į organizmą jas veikia įvairūs mikroaplinkos veiksniai, pavyzdžiui, serumo baltymai, dėl sąveikos su jais gali pasikeisti dalelių stabilumas, taip pat dalelės gali būti greitai pašalintos iš kraujotakos sistemos ir nepasiekti tikslo. Neseniai parodyta, kad navikus pasiekia tik 0,7 % intraveniškai suleistų nanodalelių [2]. Šiai problemai spręsti galima pasitelkti mezenchimines kamienines ląsteles (MKL), kurios dėl savo savybių yra linkusios migruoti į navikinius audinius. Todėl inkubavus MKL *ex vivo* su nanodalelėmis, MKL galėtų tapti teranostinių nanodalelių „Trojos arkliais", apsaugančiais jas nuo aplinkos poveikio ir selektyviai pristatančiais nanodaleles į taikinį organizme.

Šiame darbe kaip potencialus teranostinis nanovaistas buvo tirtos retaisiais žemės metalų jonais legiruotos aukštynkeitės nanodalelės, kurios savo dangale turi įterptą fotosensibilizatorių – chloriną e_6 (Ce_6). Mūsų darbo tikslas buvo ištirti šių nanodalelių susikaupimą bei pasiskirstymą MKL, nustatyti ar nanodalelės yra biosuderinamos ir neturi tamsinio toksiškumo, įvertinti nanodalelių bei Ce_6 kompekso fotosensibilizacinį poveikį ląstelėms.

Šio tyrimo metu pirmiausiai buvo nustatytas aukštynkeičių nanodalelių stabilumas distiliuotame vandenyje, fosfatiniame buferyje (PBS), seruminėje ir beseruminėje terpėse, siekiant surasti tinkamiausia terpę MKL ir dalelių inkubacijai. Vėliau atlikti laktato dehidrogenazės (LDH) citotoksiškumo tyrimai, siekiant įvertinti aukštynkeičių nanodalelių tamsinį toksiškumą MKL. LDH yra citozolinis fermentas, kuris esant plazminės membranos pažeidimui yra išleidžiamas į terpę. Be to naudojant konfokalinį mikroskopą buvo parodytas aukštynkeičių nanodalelių viduląstelinis kaupimasis MKL bei vėžinėse ląstelių linijose MCF-7 ir MDA-MB-231.

Naudojant singuletinio deguonies jutiklį – SOSG (*angl. Singulet Oxygen Sensor Green reagent*) buvo nustatyta singuletinio deguonies generacija kiuvetėse švitinant 980 nm lazeriu. Galiausiai, siekiant gauti terapinį poveikį buvo ištirtas galimas aukštynkeičių nanodalelių fotodinaminės navikų terapijos efektyvumas *in vitro* ląstelių monosluoksniuose. Po poveikio 980 nm lazerio spinduliuote buvo atliktas ląstelių dažymas fluorescenciniais gyvybingumo dažais – kalceinu ir propidžio jodidu, kurie nudažo atitinkamai gyvas ir negyvas ląsteles. Taip pat ląstelių gyvybingumas po švitinimo buvo įvertintas kiekybiškai su LDH testu.

Tyrimų rezultatai parodė, kad žadinant 980 nm lazeriu yra pastebimas fototoksinis poveikis *in vitro* auginamoms ląstelėms.

Reikšminiai žodžiai: aukštynkeitės nanodalelės, dermos mezenchiminės kamieninės ląstelės, teranostika, fotodinaminė navikų terapija.

Literatūra

[1] N. Ahmed et al. Theranostic applications of nanoparticles in cancer. *Drug Discovery Today*, vol. 17, pp. 928-934, 2012
[2] Q. Dai et al. Quantifying the Ligand-Coated Nanoparticle Delivery to Cancer Cells in Solid Tumors. *ACS Nano*, vol. 12, pp. 8423–8435, 2018

Kraujo plazmos baltymais stabilizuoti aukso nanoklasteriai personalizuotai navikų teranostikai

Blood plasma stabilized gold nanoclusters for personalized tumor theranostics

Greta Jarockytė[1,2], Vilius Poderys[1], Vitalijus Karabanovas[1,3], Ričardas Rotomskis[1,4]
[1]Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406, Vilnius
[2]Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[3]Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
[4]Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius
greta.jarockyte@nvi.lt

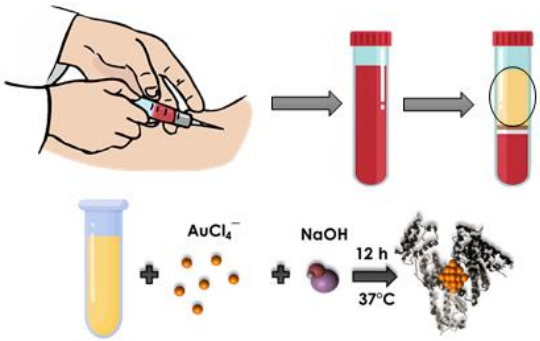
Navikų teranostika – tai yra mokslo sritis, tyrinėjanti medžiagas, kurios galėtų būti pritaikytos vėžio diagnostikai bei terapijai. Viena iš tyrimų krypčių siekia apjungti fluorescencinę diagnostiką bei fotosensibilizuotą navikų terapiją, panaudojant nanožymenys navikų teranostikai. Įvairios nanodalelės yra tyrinėjamos kaip potencialūs teranostiniai nanovaistai. Viena tokių nanomedžiagų galėtų būti aukso nanoklasteriai (Au NK) [1], kurie pasižymi fotoliuminescenciją raudonojoje – artimojoje infraraudonojoje srityje. Savo ankstesniuose darbuose parodėme, kad jaučio serumo albuminu padengti nanoklasteriai (JSA-Au NK) gali būti naudojami kaip fotosensibilizatoriai ir švitinami 405 nm spinduliuote generuoja aktyvias deguonies formas [2]. Šiandieninės medicinos tikslas parinkti geriausią paciento gydymo metodą, kuris būtų optimaliai pritaikytas pacientui. Todėl nauji vaistai ir gydymo bei diagnostikos metodikos parenkamos atsižvelgiant į konkretų pacientą ir jo savybes. Siekiant individualizuoti gydymą bei padidinti Au NK biosuderinamumą, sintezę galima atlikti žmogaus kraujo plazmoje arba serume, kurio pagrindinis komponentas yra įvairūs žmogaus serumo albuminai. Pirminiai tyrimai parodė, kad Au NK gali būti susintetinti žmogaus kraujo plazmoje, o gauti Au NK savo optinėmis savybėmis yra panašūs į anksčiau tirtus JSA-Au NK [2] ir gali būti panaudoti teranostikai

Šiame darbe buvo siekiama įvertinti teigiamo bei neigiamo rezus faktoriaus žmogaus kraujo plazmos baltymais stabilizuotų Au NK, kaip potencialių teranostinių nanovaistų, poveikį krūties vėžinėms ląstelėms.

Pirmiausia Nikon Eclipse Te2000–S konfokaliniu mikroskopu buvo ištirtas Au NK susikaupimas krūties MCF-7 ir MDA-MB-231 vėžinėse ląstelėse. Vėžinės ląstelės buvo inkubuojamos su Au NK 6 arba 24 val. Po inkubacijos gyvos ląstelės buvo vaizdinamos konfokaliniu mikroskopu, jas laikant inkubatoriuje, pritaikytame mikroskopijai (OkoLab, Pozzuoli, Italy), kuriame buvo palaikoma pastovi 37 °C temperatūra. Vėliau įvertintas Au NK tamsinis toksiškumas ląstelėms, matuojant išsiskyrusios laktato dehidrogenazės (LDH) kiekį po 24 val inkubacijos. 402 nm spinduliuote veikiamų Au NK poveikis buvo tiriamas dviem būdais: konfokalinės mikroskopijos būdu, naudojant fluorescencinius gyvybingumo dažus (kalceiną, kuris dažo tik gyvas ląsteles, ir propidžio jodidą, kuris dažo negyvas ląsteles), bei vertinant ląstelių gyvybingumą po poveikio pagal išsiskyrusio LDH kiekį bandiniuose.

Konfokalinės mikroskopijos duomenys parodė, kad žmogaus plazmos baltymais stabilizuoti Au NK kaupiasi MCF-7 ir MDA-MB-231 vėžinėse ląstelėse. Šiems Au NK būdingas endocitozinis kaupimasis, būdingas ir anksčiau minėtiems JSA-Au NK. Biosuderinamumo tyrimų metu buvo parodyta, kad plazmos baltymais stabilizuoti Au NK neturi tamsinio toksiškumo ir nedaro poveikio ląstelių gyvybingumui. Po 24 val inkubacijos su Au NK, apšvietus vėžines ląsteles su fototerapijai naudojama šviesa, nustatytas fototoksinis poveikis ląstelėms, kuris priklausė nuo švitinimo dozės.

Tyrimų rezultatai parodė, kad Au-NK galima susintetinti žmogaus kraujo plazmoje, jie kaupiasi vėžinėse ląstelėse bei pasižymi fotosensibilizacinėmis savybėmis ir gali ateityje būti pritaikyti personalizuotai vėžio teranostikai.



1 pav. Principinė schema, vaizduojanti Au NK sintezę, panaudojant žmogaus kraujo plazmą. Iš paciento yra paimamas nedidelis kraujo kiekis ir iš jos išskiriama kraujo plazma, kuri panaudojama Au NK sintezei. Tokie Au NK nesukelia imunines sistemos poveikio, yra sintetinami iš to paties paciento paimtos plazmos.

Reikšminiai žodžiai: nanomedicina, aukso nanoklasteriai, fotosensibilizuota navikų terapija, singutelinis deguonis, aktyviosios deguonies formos.

Literatūra

[1] J. Xie, Y. Zheng, J.Y. Ying. Protein-Directed Synthesis of Highly Fluorescent Gold Nanoclusters. J. Am. Chem. Soc.; 131,888—889 (2009).
[2] V. Poderys, G. Jarockyte, S. Bagdonas, V. Karabanovas, R. Rotomskis. Protein-stabilized gold nanoclusters for PDT: ROS and singlet oxygen generation. J. Photochem. Photobiol.; 204 (2020).

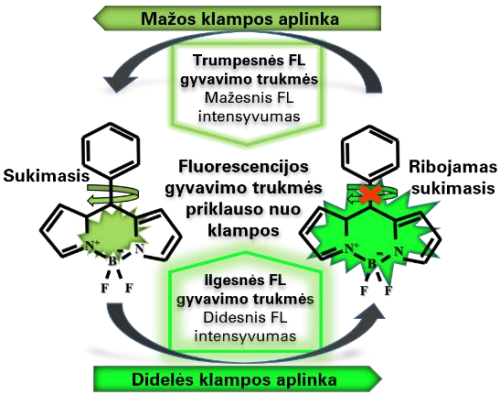
Molekulinio rotoriaus BODIPY-h taikymas mikroklampos nustatymui žmogaus odos mezenchiminėse kamieninėse ląstelėse ir jų diferencijuotose kultūrose

Application of BODIPY-h molecular rotor for determining microviscosity in human skin mesenchymal stem cells and their differentiated counterparts

Džiugas Jurgutis[1,2], Greta Jarockytė[1,2], Aurimas Vyšniauskas[3], Vitalijus Karabanovas[1,4], Ričardas Rotomskis[1,5]
[1]Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, P. Baublio g. 3b, LT-08406, Vilnius
[2]Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[3]Molekulinių darinių fizikos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
[4]Chemijos ir bioinžinerijos fakultetas, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
[5]Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius
dziugas.jurgutis@nvi.lt

Ląstelių diferenciacija lemia morfologinius, biocheminius ir biomechaninius viduląstelinius pakitimus. Vienas iš kertinių ląstelės biomechaninių parametrų – mikroklampa, kuri apsprendžia biomolekulių difuziją ir lemia ląstelių elgsenos pakitimus. Mikroklampos nustatymas prieš ir po diferenciacijos leistų geriau suprasti diferenciacijos mechanizmą ląstelių viduje bei tiksliau charakterizuoti kamienines ląsteles, pavyzdžiui, mezenchimines kamienines ląsteles (MKL), kurios geba diferencijuoti į riebalinio, kaulinio ir kremzlinio audinio ląsteles.

Mikroklampos nustatymą ląstelių organelėse įgalina molekuliniai rotoriai arba klampai jautrios fluorescencinės molekulės. Šiame darbe taikomas BODIPY-h (BDP-h) molekulinis rotorius, kurio jautrumas klampai patvirtintas ankstesniais tyrimais [1]. BDP-h veikimo mechanizmas (1 pav.) priklauso nuo molekulę supančios mikroaplinkos klampos: mažesnės klampos aplinkoje BDP-h fenilo funkcinė grupė suksis greičiau, vyks greitesnė relaksacija iš sužadintosios fluorescencinės būsenos nespinduliniu būdu ir bus fiksuojamos trumpesnės fluorescencijos gyvavimo trukmės. Didesnės klampos aplinkoje vyks atvirkštinis procesas. Kartu su molekuliniais rotoriais pasitelkiant fluorescencijos gyvavimo trukmės mikroskopiją (angl. trumpinys FLIM), įgalinamas viduląstelinių klampos „žemėlapių“ kūrimas [2].



1 pav. molekulinių rotorių veikimo mechanizmo schema. Paveiksle pavaizduotas darbe tiriamas BDP-h klampos jutiklis. FL – fluorescencija.

Tyrimo tikslas – nustatyti BDP-h molekulinio rotorio viduląstelinę lokalizaciją žmogaus odos MKL bei pritaikyti BDP-h diferencijuotų MKL mikroklampos nustatymui.

Tyrimo metu, pasitelkiant komercinius fluorescencinius organelių dažus (branduoliams – Hoechst 33258, mitochondrijoms – MitoTracker Red FM, lizosomoms – LysoTracker Deep Red, lipidinėms pūslelėms – Nile Red), įvertinta BDP-h lokalizacija gyvose MKL. MKL specifinė diferenciacija indukuota naudojant StemPro diferenciacijos rinkinius (Gibco, JAV). BDP-h fluorescencijos gyvavimo trukmės gyvose MKL ir jų diferencijuotose kultūrose nustatytos taikant FLIM su laike koreliuotų pavienių fotonų skaičiavimo metodika. Ląstelės vaizdintos su Nikon Eclipse TE2000-S C1 plus (Nikon, Japonija) skenuojančio lazerio konfokaliniu mikroskopu. Išmatuotos fluorescencijos gyvavimo trukmės paverstos į mikroklampos vertes naudojant BDP-h kalibracines kreives sudarytas skirtingos klampos tolueno ir ricinos aliejaus tirpaluose [1].

Nustatyta, kad BDP-h difunduoja pro ląstelių plazminę membraną ir susikaupia gyvų MKL lipidinėse pūslelėse ir citozolyje. Atlikus MKL specifinę diferenciaciją į riebalinio audinio ląsteles (adipocitus) nustatyta, kad BDP-h taip pat kaupiasi adipocitų lipidinėse pūslelėse. Vadinasi, BDP-h molekulinis rotorius gali būti taikomas gyvų ląstelių lipidinių pūslelių mikroklampos įvertinimui. FLIM matavimai parodė, kad tiek nediferencijuotose MKL, tiek adipocituose, BDP-h būdingas bieksponentinis fluorescencijos gesimas, kurio trumpoji komponentė atsiranda dėl BDP-h lokalizacijos lipidinėse pūslelėse.

Reikšminiai žodžiai: kamieninės ląstelės, ląstelių diferenciacija, mikroklampa, molekuliniai rotoriai, fluorescencijos gyvavimo trukmės mikroskopija.

Literatūra

[1] S. Toliautas, J. Dodonova, A. Žvirblis, I. Čiplys, A. Polita, A. Devižis, S. Tumkevičius, J. Šulskus, ir A. Vyšniauskas, Chem. – Eur. J. **25**, 10342 (2019).
[2] M. K. Kuimova, Phys. Chem. Chem. Phys. **14**, 12671 (2012).

Baltymų vainiko įtaka apkonvertuojančių nanodalelių kaupimuisi ląstelėse

Protein corona guidance for cellular uptake of upconverting nanoparticles

Evelina Voronovič[1,2,3], Artiom Skripka[4], Greta Jarockytė[1,2], Marija Ger[5], Dalius Kučiauskas[5], Algirdas Kaupinis[5], Mindaugas Valius[5], Fiorenzo Vetrone[4], Ričardas Rotomskis[1,6], Vitalijus Karabanovas[1,3]

[1]Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas, Baublio g. 3B, LT-08406
[2]Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[3]Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius
[4]Nacionalinis tyrimų institutas, Kvebeko universitetas, 1650 Boul. Lionel-Boulet, J3X 1S2, Kvebekas, Kanada
[5]Biochemijos institutas, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
[6]Biofotonikos grupė, Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, LT-10222, Vilnius
evelina.voronovic@nvi.lt

Apkonvertuojančios nanodalelės (APNA) tai naujos kartos nanodalelės (ND) plačiai tiriamos vaistų pernešimui, fotodinaminei terapijai, navikų *in vivo* vaizdinimui, nanotermometrijai ir kt. [1, 2]. Tam kad šios ND būtų pritaikytos nanomedicinoje jos turi gan ilgai cirkuliuoti kraujotakos sistemoje, taip pat išvengti fagocitinių ląstelių, kad APNA sėkmingai pasiektų tikslinę vietą organizme [1]. Suleidus į kraujotaką ND atsiduria baltymų apsuptyje, kurie aplink ND susiformuoja „baltymų vainiką“ (BV). Aplink ND susiformavęs BV nulemia patekimą ir susikaupimą ląstelėse ir audiniuose. Skirtingi ND paviršiaus dangalai gali keisti BV dydį ir sudėtį [3]. Taip pat priklausomai nuo ląstelių morfologijos skiriasi ND patekimas į ląsteles. Pirmiausia ND sąveikauja su ląstelės membrana, vėliau atsiduria ląstelės citoplazmoje. BV sudėtis turėtų nulemti, koks endocitozės mechanizmas bus naudojamas: fagocitozė, nuo kaveolino (KPE) ar klatrino priklausanti endocitozė (KLPE) ar makropinocitozė [3]. Tam tikrais atvejais BV gali trukdyti ND tinkamai patekti ar net lėtinti patekimą į ląsteles [4]. Norint sumažinti baltymų kiekį BV ir prailginti ND buvimo kraujotakoje laiką, ND yra padengiamos polietilenglikoliu (PEG), dekstranu ar polivinilpirolidonu (PVP) [5]. Bet kokiu atveju BV susidarymas yra neišvengiamas, tad išsamūs BV tyrimai yra labai reikalingi norint surasti labiausiai tinkamą ND paviršiaus modifikaciją biomedicininiam pritaikymui.

Šiame darbe buvo tiriama BV sudėtis bei jos įtaka APNA kaupimuisi žmogaus krūties vėžio ląstelėse (MCF-7 ir MDA-MB-231), vėžinių ląstelių membranos proteominė analizė. Darbe buvo tiriamos $LiYF_4$:Yb^{3+}, Tm^{3+} APNA dengtos skirtingais dangalais: citratu (cAPNA), SiO_2 (sAPNA) ir fosfolipidais (fAPNA). Tyrimo metu ištirtas APNA biosuderinamumas, kaupimasis vėžinėse ląstelėse ir APNA citotoksiškumas, bei nustatyti dalelių patekimo į ląsteles keliai. Tyrimo metu pastebėta, kad visos tirtos APNA pasižymi koloidiniu stabilumu terpėje, praturtintoje baltymais. Tai rodo, kad aplink ND susidaro BV, kuris stabilizuoja APNA. Be to, sAPNA į abiejų linijų ląsteles patenka makropinocitozės būdu, fosfolipidais dengtos APNA – nuo KPE būdu. Citratu dengtos APNA į MDA-MB-231 ląsteles patenka nuo KLPE būdu, o MCF-7 ląstelės šias APNA kaupia KPE būdu. BV analizės rezultatai leido mums suprasti, kurie baltymai gali būti „atsakingi“ už tam tikrą ND patekimo į ląsteles mechanizmą. sAPNA BV yra didžiausias lyginant su kitų padengimų APNA. Taip pat šių APNA BV esantis alfa-2-makroglobulinas ir koaguliacijos faktorius 5 lemia makropinocitozės patekimo kelią; fAPNA KPE būdu patenka dėl apolipoproteino A-I ir koaguliacijos faktoriaus V; cAPNA patekimą į ląsteles lemia su ciklaze susijęs baltymas 1. Atlikus ląstelės membranos proteomikos tyrimus, galime prieiti išvadą, kad gausus trombospondino-1 kiekis randamas MDA-MB-231 ląstelių membranoje lemia cAPNA patekimą į ląsteles KLPE būdu bei geresnį pačių cAPNA kaupimąsi ląstelėse lyginant su kitais dviem paviršių padengimais turinčiomis APNA.

Reikšminiai žodžiai: retųjų žemės metalų nanodalelės, baltymų vainikas, kaupimasis ląstelėse, endocitozė, apkonversija

Literatūra

[1] G. Jalani, V. Tam, F. Vetrone, M. Cerutti. JACS. 140, 10923-10931 (2018).
[2] A. Skripka, A. Benayas, R. Marin, P. Canton, E. Hemmer, F. Vetrone. Nanoscale 9, 3079-3085 (2017).
[3] V. Francia, K. Yang, S. Deville, C. Reker-Smit, I. Nelissen, A. Salvati. ACS Nano 13, 11107-11121 (2019).
[4] Y. Liu, Z. Wang, Y. Liu, G. Zhu, O. Jacobson, X. Fu, R. Bai, X. Lin, N. Lu, X. Yang, W. Fan, J. Song, Z. Wang, G. Yu, F. Zhang, H. Kalish, G. Niu, Z. Nie, X. Chen. ACS Nano. 11, 10539–10548 (2017).
[5] S. Schöttler, G. Becker, S. Winzen, T. Steinbach, K. Mohr, K. Landfester, V. Mailänder, F. R. Wurm. Nat. Nanotechnol. 11 , 372–377 (2016)

Klinikinio kaulų scintigrafijos protokolo optimizavimas ir vaizdų kvantifikavimas

Optimization and quantification of clinical bone scintigraphy protocol

Kirill Skovorodko[1,2]; Augustinas Bielinis[2]; Arūnas Gudelis[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
[2]Vilniaus universiteto ligoninė Santaros klinikos, Santariškių g. 2, LT-08661 Vilnius

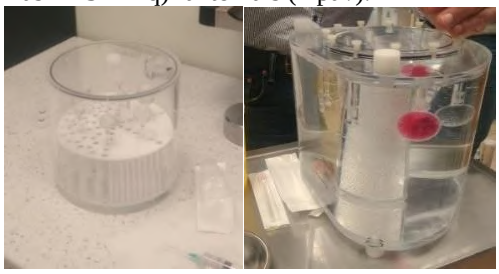
kirill.skovorodko@ftmc.lt

Branduolinėje medicinoje vienas dažniausiai atliekamų tyrimų yra kaulų scintigrafija, skirtas diagnozuoti ir įvertinti kaulinių metastazių išplitimą bei gydymo efektą, diagnozuoti „stress“ bei nepakankamumo lūžius, osteomielitą, Pedžeto ligą, sąnarių protezų išklibimą. Pacientams skiriamas radiofarmacinis preparatas - techneciu žymėtasis metilendifosfonatas (^{99m}Tc-MDP), kuris tirpalo pavidalu injekuojamas į veną. Standartiškai skiriamas ^{99m}Tc-MDP aktyvumas yra apie 500 - 700 MBq [1, 2]. Pacientui atliekamas planarinis skenavimas ir SPECT/CT (vieno fotono emisijos kompiuterinė tomografija ir kompiuterinė tomografija) praėjus 2 val. po injekcijos.

Siekiant išvengti pacientų nepagrįstos apšvitos ir vadovaujantis ALARA (angl. “as low as reasonably achievable”) principu, pacientų skenavimo protokolai turi būti optimizuoti, dozavimo ir SPECT įranga turi būti sukalibruota ir patikrinta.

Dozavimo tikslumas priklauso nuo rutininių ir periodinių patikrinimų su kalibraciniais šaltiniais ir palyginimo su antrinio etalono įranga. Ligoninėje naudojamų aktyvumo kalibratorių tikslumas buvo įvertintas atlikus palyginamuosius matavimus. Jų metu kalibratorių atsakas lygintas su antrinio dozės kalibratoriaus Capintec CRC-15R (kilnojamoji 4π γ jonizacinė kamera) Nr. 158488 atsaku. Kilnojamoji jonizacinė kamera susieta su stacionariąja jonizacine kamera Fidelis Nr. 06048, jos abi palyginimų būdu susietos su Čekijos Nacionalinio metrologijos instituto etalonu ir yra Lietuvos nacionalinio radionuklidų aktyvumo vieneto etalono dalis didelio aktyvumo srityje.

Skenavimui naudojamas GE NM/CT 870 CZT (kadmio cinko telūrido detektoriai) SPECT/CT įrenginys su volframo WEHR45 kolimatoriais. Gamintojo atstovas parinko skenavimo protokolus, tačiau atsižvelgiant į gydytojų pageidavimus, kaulų scintigrafijos protokolas buvo papildomai įvertintas, kvantifikuotas ir optimizuotas su Jaszczak (~400 MBq) ir NEMA-IEC (užpildytas 7:1 fono ir intarpų santykiu, bendras aktyvumas ~ 45 MBq) fantomais (1 pav).



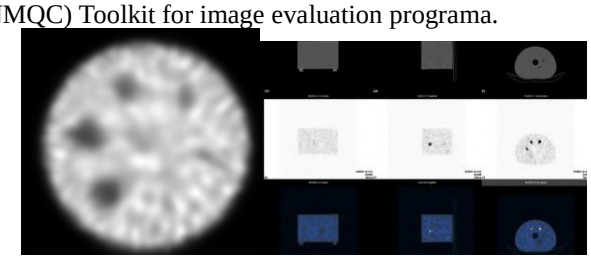
1 pav. Jaszczak (iš kairės) ir NEMA-IEC fantomai.

Tyrimui atlikti parengti SPECT protokolo skenavimo parametrai: SPECT vaizdai registruojami 360 laipsnių rotacijos kampu, kas 3 laipsnius, 11 sekundžių per projekciją, naudojant 1 karto padidinimą, renkant informaciją tarp projekcijų pasisukimo žingsnių, kiti parametrai nurodyti 1 lentelėje.

1 lentelė. Pagrindiniai matavimo ir vaizdų rekonstravimo parametrai.

Parametras	Reikšmė
Gaminys	GE NM/CT 870 CZT SPECT/CT
Kolimatorius	WEHR45
Matricos dydis	256x256
Detektoriai	Abu, 180° konfigūracija
Orbita	Nežiedinė
Energijos langas	± 7,5 %

Nuskenavus fantomus, gauti vaizdai (2 pav.) buvo rekonstruoti su OSEM ir FBP rekonstrukcijomis ir skirtingais filtrais (Gauss, Batterworth, Wienner, Metz). Vaizdai buvo vertinami vizualiai ir ImageJ (IAEA-NMQC) Toolkit for image evaluation programa.



2 pav. Jaszczak (iš kairės) ir NEMA-IEC vaizdų vertinimas.

Atlikti tyrimai parodė, jog optimizuojant kaulų scintigrafijos protokolą, reikia padidinti skenavimo laiką ir naudoti ± 10 % energijos langą, bei taikyti papildomus filtrus. Vaizdų kvantifikavimas leidžia tiksliau įvertinti navikų išplitimą ir atlikti dozimetrinius skaičiavimus.

Reikšminiai žodžiai: branduolinė medicina, radionuklidų aktyvumo matuokliai, kvantifikavimas.

Literatūra

[1] A. Bor. D. Kurt, S. Tastan, et al. Accuracy of Clinical Protocols in SPECT. J Nucl Med Technol; 40:259-264 doi:10.2967/jnmt.111.098715 (2012).
[2] T. Van Den. Wyngaert, K. Strobel, W. U. Kampen et al. The EANM practice guidelines for bone scintigraphy Eur J Nucl Med Mol Imaging 43:1723–1738. (2016).

Joninių skysčių ir jų mišinių BMR spektrai: įžvalgos iš KM/MD skaičiavimų

NMR spectra of ionic liquids and its mixtures: insight from QM/MD calculations

Dovilė Lengvinaitė
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, LT-10221, Vilnius
dovile.lengvinaite@ff.vu.lt

Kambario temperatūros joniniai skysčiai, tai organinės druskos, kurios išlieka skystos kambario ar artimoje temperatūroje. Šie skysčiai yra plačiai tyrinėjami dėl jų potencialaus pritaikymo įvairiose srityse, nes šie skysčiai pasižymi žemu garų slėgiu, dideliu elektriniu laidumu, mažu lakumu, stabilumu aukštoje temperatūroje, geromis tirpiklio savybėmis organinės ir neorganinės kilmės junginiams. Dar daugiau, skirtinga katijonų ir anijonų kombinacijų įvairovė šiuos skysčius padaro dar universalesnius, kurie dėl savo fizikinių ir cheminių savybių gali būti pritaikyti specifiniuose procesuose [1].

Gryni joniniai skysčiai yra retai aptinkami. Dėl savo hidroskopinių savybių, šie skysčiai labai lengvai ir stebėtinai greitai absorbuoja pastebimą kiekį vandens iš atmosferos [2]. Taip pat dėl naudingų išgaunamų savybių šie skysčiai yra dažnai maišomi su tradiciniais tirpikliais dėl ko atsiranda poreikis išsiaiškinti molekulinių tirpiklių poveikį joniniams skysčiams.

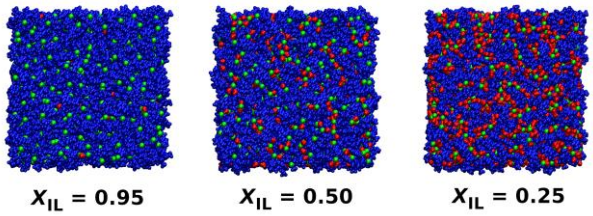
Šiame darbe buvo nagrinėjami 1-decil-3-metil-imidazolo chlorido [C10mim][Cl] joninio skysčio ^{1}H BMR spektrai esant labai mažoms jo koncentracijoms (10^{-5} molinių dalių) įvairaus poliškumo tirpikliuose: dichlorometane, acetonitrile ir vandenyje. Rezultatai atskleidė, kad katijono 2-os pozicijos protono cheminis poslinkis yra gana skirtingas visuose tirpikliuose ir atspindi besikeičiančią pusiausvyrą tarp kontaktinių joninių porų ir laisvų jonų. Atlikti molekulinės dinamikos modeliavimai ir KM/MD skaičiavimai parodė, kad 2-os pozicijos protono cheminį poslinkį pirmiausia nulemia vandenilinis ryšys su chloro anijonu, kai tuo tarpu tirpiklių įtaka yra mažesnė.

Palyginus eksperimentinius ir modeliuotus rezultatus, buvo pastebėta, kad kontaktinė joninė pora neišsiskaido į laisvus jonus mažai poliškame dichlorometano tirpiklyje. Nustatyta, kad maždaug 23% kontaktinių jonų porų išlieka acetonitrilo tirpiklyje, kai likusią dalį sudaro jau laisvi jonai. Vandeniniame tirpale joninės poros susiskaidymas į laisvus jonus, stebimas jau ankstyvojoje molekulinių dinamikos simuliacijų stadijoje [3].

Labai svarbią vietą tiek eksperimentiniuose tiek modeliavimo tyrimuose užima joninių skysčių ir vandens mišinių sistemos dėl ypač plataus tokių mišinių panaudojimo galimybės. Todėl šiame darbe taip pat buvo tiriamos 1-butil-3-metil-imidazolo chlorido [C4mim][Cl] joninio skysčio ir vandens mišinių sistemos (1 pav). Eksperimentiniai duomenys ^{1}H BMR spektro parodė, kad vandens protono cheminis poslinkis turi nemonotoninę priklausomybę nuo vandens koncentracijos [C4mim][Cl]/H_2O mišiniuose. Siekiant paaiškinti šį molekulinį mechanizmą, buvo taikytas klasikinis molekulinės dinamikos simuliacijos metodas. Taip pat taikant kombinuotą KM/MD metodą pagrįstą tankio funkcionalo teorija buvo apskaičiuoti BMR cheminiai poslinkiai.

Rezultatai atskleidė, kad stipriai vandeniliniu ryšiu susietų junginių plitimas tarp chloro anijonų ir vandens molekulių yra priežastis didėjančio vandens protonų cheminio poslinkio, kuomet vandens koncentracija mišinyje yra maža ir toliau mažėja. Modelis, taip pat, parodė, kad vandens protonų cheminis poslinkis, kai vandens ir joninio skysčio mišinyje vandens molekulės neturi tiesioginio vandenilinio ryšio su chloro anijonais yra pastebimai mažesnis nei grynajame vandenyje.

Šiame darbe, taip pat, buvo tirta gryno joninio skysčio ir jo mišinių su vandeniu struktūrinė analizė. Buvo pastebėta, kad gryno [C4mim][Cl] joninio skysčio ^{1}H BMR spektro rezultatai puikiai sutampa su eksperimentiniais duomenimis. Galiausiai, buvo stebima 2-oje pozicijoje imidazolo žiede esančio protono cheminio poslinkio priklausomybė nuo mišinio koncentracijos.



1 pav. Joninio skysčio ir vandens ([C4mim][Cl]/H_2O) mišinių vizualizacija esant skirtingoms joninio skysčio koncentracijoms.

Reikšminiai žodžiai: joniniai skysčiai, tirpikliai, klasikinės molekulinės dinamikos simuliacijos, KM/MD

Literatūra

[1] T. Helgaker, S. Coriani, P. Jørgensen, K. Kristensen, J. Olsen, K. Ruud., Chem. Rev. **112**, 543 (2012).
[2] Hayes, R.; Warr, G. G.; Atkin, R., Chem. Rev. **115**, 6357– 6426 (2015).
[3] Lengvinaite, D.; Klimavičius, V.; Balevicius, V.; Aidas, K., J. Phys. Chem. B **124**, 10776–10786 (2020).

Teoriniai ir skaitmeniniai magnetinio lauko poveikio amino rūgštims tyrimai

Theoretical and numerical studies of the impact of the magnetic field of radiation on amino acids

Teodora Kirova[1] and Jelena Tamulienė[2]
[1]Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Riga, LV-1004, Latvia
[2]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania
teo@lu.lv

Amino acids are the structural units of the proteins. By joining together, amino acids form peptides (short polymer chains) or polypeptides/proteins (longer polymer chains). The twenty amino acids encoded directly in the universal genetic code are standard/canonical amino acids. Non-protein amino acids also have important roles as metabolic intermediates, such as in biosynthesis or are used to synthesize other molecules. For example, tryptophan is a precursor of the neurotransmitter serotonin [1], serine plays a crutial role in the metabolism and signaling activities in living organisms [2], threonine is an important constituent of collagen, elastin, and enamel protein.

The interaction of molecules with radiation is a fundamental and very important process involved in various fields, e.g. in radiation biology. Shortly after the deposition of high-energy ionizing quanta into a biological medium, electrons with different energies are formed and are able to destroy biological molecules, such as DNA and proteins, and cause chromosome aberrations, leading to cancer, mutations, genetic transformations, etc. [3]. Due to this scientific and medical interest, many research groups have studied the structural changes of amino acids using electron ionization mass spectrometry, where the mass spectra are typically interpreted by theoretical calculations [4].

Motivated by the above, in this work we will investigate theoretically and numerically the effects of the magnetic field of radiation on the fragmentation of amino acids. The radiation field created by a moving change is given by:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left\{\frac{\hat{\mathbf{R}}}{(1-\hat{\mathbf{R}}\cdot\beta)^3 R}\times\frac{1}{c}\left[(\hat{\mathbf{R}}-\beta)\times\dot{\beta}\right]\right\} \tag{1}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c}\hat{\mathbf{R}}\times\mathbf{E}(\mathbf{r},t), \tag{2}$$

with $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$, and $\hat{\mathbf{R}}$ being mutually perpendicular. During the interaction of matter with the electromagnetic field, the atom/molecule is perturbed by both the electric and the magnetic field. The typical energy shift in the linear Stark effect is $\Delta E_S \sim e\varepsilon a_0 \sim e\varepsilon\hbar/mc\alpha$, while in the Zeeman effect it is $\Delta E_Z \sim eB\hbar/2m \sim e\varepsilon\hbar/2mc$. Since the effects of the electric field on matter are larger by a factor of $1/\alpha$ (α is the fine-structure constant), as a first approximation in our studies we will neglect the terms of the oscillating magnetic field in the Hamiltonian and leave only the ones including the electric field.

The effects of the magnetic field of the radiation will be accounted for only by using the method of anisotropic Gaussian type orbitals (AGTO), first introduced by Schmelcher and Cederbaum [5]. In this basis, the exponential factor of the basis functions has different decay constants along and perpendicular to the direction of the magnetic field. Such an anisotropy gives the flexibility to describe the elongation of electron orbitals and densities along the field direction. In cylindrical coordinates (ρ, z, ϕ), the jth AGTO basis function takes the form:

$$\chi_j(\rho,z,\phi) = N_j\rho^{n_{\rho_j}} z^{n_{z_j}} e^{-\alpha_j\rho^2-\beta_j z^2} e^{im_j\phi}, j = 1,2,3\ldots, \tag{3}$$

where $n_{\rho_j} = |m_j| + 2k_j$, $k_j = 0,1\ldots$ with $m_j = \ldots -2,-1,0,1,2\ldots$ and $n_{z_j} = \pi_{z_j} + 2l_j$, $l_j = 0,1\ldots$, with $\pi_{z_j} = 0,1$.

Eventhough Schmelcher and Cederbaum deduced all the required Hamiltonian matrix elements with respect to such AGTO basis functions, the optimal determination of the sets α_j and β_j was left largely as an open question. Later on, after detailed analysis and extensive numerical exploration, a significant technical advance of the AGTO basis sets was presented by Zhu and Trickey [6].

Following the procedure outlined in [6], we will first use light atoms as a testing ground for our theoretical model. Later on, various amino acids will be analyzed, including geometrical parameters of the initial molecule rearrangement. In the case of fragmentation, additional analysis will be performed in order to determine whether it is due to a simple bond cleavage or to more complex reactions involving molecular rearrangements.

This presentation 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).
Keywords: amino acids, electromagnetic radiation, Gaussian orbitals, molecular fragmentation

References

[1] K. V. Savelieva et al., PLoS One. 3(10), e3301 (2008).
[2] R. Ros et al., Trends Plant Sci., 19, 564 (2014).
[3] A. F. Fuciarelli and J. D. Zimbrick, Radiation Damage in DNA: Structure/Function Relationship at Early Times, (Battelle Press, Columbus OH, 1995).
[4] J. Tamuliene et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 279, 128 (2012); E. J. Borkowski et al., J. Mol. Struct. 1093, 49 (2015); S. Grimme, Angew. Chem. Int. Ed. 52, 6306 (2013).
[5] P. Schmelcher L. S. Cederbaum, Phys Rev A 37(3), 672 (1988).
[6] W. Zhu and S. B. Trickey, J Chem Phys 147, 244108 (2017).

Skersaryšintų arilpakeistų fluoreno darinių krūvio pernašos savybės

Charge transport properties in crosslinked aryl-substituted fluorene derivatives

Egidijus Kamarauskas[1], Aistė Jegorovė[2], Marytė Daškevičienė[2],Vytautas Getautis[2], Kristijonas Genevičius[1], Vygintas Jankauskas[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakuletas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius 10257
[2]Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, Kaunas 50254
egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt

Pastaruoju metu mažamolekulinės organinės krūvio pernašos medžiagos yra pastovaus dėmesio centre dėl galimybės organines medžiagas pritaikyti saulės elementuose, fotodetektoriuose, tranzistoriuose, lanksčioje elektronikoje, *etc*. Tačiau kartu šios organinės medžiagos pasižymi mažu atsparumu aplinkos sąlygoms, ypač deguonies ir vandens įtakai, taipogi mechaniniam poveikiui.

Siekiant padidinti organinių krūvio pernašos medžiagų tiek mechaninį atsparumą, tiek atsparumą aplinkos sąlygoms, taikomos įvairios technikos – nuo paprasčiausio izoliavimo apsauginiu sluoksniu iki bandymų skersaryšinti, kai medžiagos molekulės sudaro tarpusavyje papildomus ryšius (dažnai aukštoje temperatūroje), ir dėl tokių ryšių medžiagos sluoksnis tampa mechaniškai tvirtesnis, labiau atsparus aplinkos (deguonies ir vandens) poveikiui.

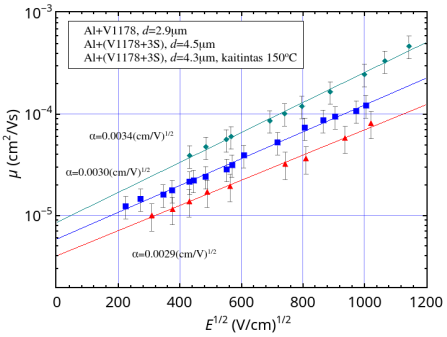
Tačiau įprastai skersaryšinimas vyksta aukštoje temperatūroje (>200°C), tad terminio proceso metu gali būti suardyti kiti sluoksniai (pvz. perovskitinės struktūros suyra 150°C temperatūroje), ir tai yra ribojantis veiksnys.

Vienas galimų sprendimų yra naudoti cheminius iniciatorius, kurie skersaryšinimo procesą inicijuoja esant daug žemesnėms temperatūroms. Visgi tai yra papildomas cheminis priedas, kuris daro įtaką gauto sluoksnio laidumui, krūvio pernašos procesams.

Šiame darbe mes sutelkėme dėmesį būtent į skresaryšimo iniciatorių įtakos krūvio pernašai nustatymui, tyrimams panaudodami organinius krūvį transportuojančius sluoksnius, pagamintus iš fluoreno darinių, turinčių dvi stireno funkcines grupes. Yra žinomas fluoreno darinys **V1145**, aprašytas [1]. Pagal diferencinės skenuojančios kalorimetrijos (DSK) tyrimus jo skersaryšinimo reakcija vyksta 190°C temperatūroje. Mūsų susintetintas darinys **V1178** su metilgrupėmis termiškai skersaryšinasi dar aukštesnėje - 220°C temperatūroje. Nors gaunami atsparūs skersaryšinti sluoksniai, gerai pernešantys skyles, bet dėl palyginti aukštų skersaryšinimo temperatūrų šių junginių panaudojimas organinėse neinvertuotose saulės celėse yra ribotas, nes neįmanoma suderinti su perovskitiniais sluoksniais dėl šių sluoksnių terminio atsparumo.

Mes tyrėme, kaip galima sumažinti skersaryšinimo temperatūrą, Vienas iš tokių būdų yra 4,4‘-tiobisbenzentiolio panaudojimas, kurį čia žymine **3S**. DSK tyrimai parodė, kad skersaryšinimo temperatūra ženkliai sumažėja, pvz., **V1178** skersaryšinimo temperatūra sumažėja iki 140°C.

Tyrėme, kokie vyksta krūvio pernašos savybių pokyčiai skersaryšinant **V1145** ir **V1178** su 4,4‘-tiobisbenzentioliu, maišant moliniu santykiu 1:1. Tyrimams naudojome XTOF metodą. Matavimai parodė, kad neskersaryšintame medžiagų mišinyje kiek išauga skylių pernašos dispersiškumas bei sumažėja jų judris. Atlikus skersaryšinimą pakaitinant stebimi tolesni krūvio pernašos pokyčiai. **V1178** tie pokyčiai yra nežymūs, kai **V1145** atveju labai stipriai išauga krūvio pernašos dispersiškumas, dėl kurio silpnesniuose elektriniuose laukuose judris tampa neišmatuojamu bei labai stipriai išauga judrio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio. Dėl tokios priklausomybės šio darinio panaudojimas saulės celėse būtų netikslingas. Tuo tarpu **V1178** darinyje skylių judris silpnuose elektriniuose laukuose lieka pakankamai aukštas (1 pav.). Matome , kad papildomų metilgrupių buvimas **V1178** molekulėje duoda teigiamą įtaką ją skersaryšinant su tiobisbenzentioliu. Gauti sluoksniai gali būti panaudoti saulės celėse.



1 pav. Skylių judrio μ priklausomybė nuo elektrinio lauko E grynoje, su priedu ir skersaryšintoje su priedu medžiagoje **V1178**.

Reikšminiai žodžiai: judris, skersaryšinimas, XTOF.

Literatūra

[1] Yun Zhang, Chun Kou, Junjie Zhang, Yahui Liu, Wenhua Li, Zhishan Bo and Ming Shao. *Crosslinked and dopant free hole transport materials for efficient and stable planar perovskite solar cells*. J. Mater. Chem. A, 2019, **7**, 5522.

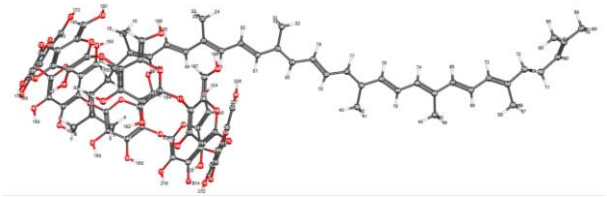
Likopeno molekulinių struktūrų ir spektrų modeliavimas tankio funkcionalų metodais superkompiuteriu

Lycopene structure and spectral properties study using DFT methods with supercomputer

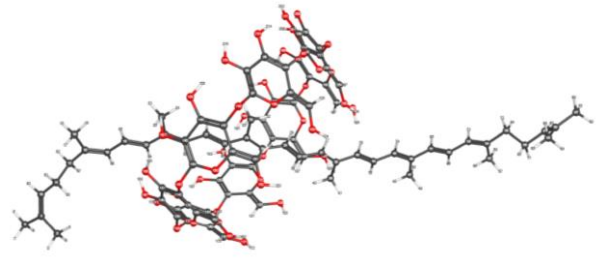
Oskaras Balkus[1], Laurynas Diska[1], Alma Bockuviene[2], Jolanta Sereikaitė[3], Mindaugas Mačernis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[3]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Molekulinės biotechnologijos laboratorija, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Karotinoidai yra labai plačiai gamtoje paplitusios molekulės. Šiuo metu jų gamtoje yra priskaičiuojama daugiau nei virš tūkstančio [1]. Didžiulė karotinoidų gausa ir skirtingos jų cheminės savybės kelia klausimus dėl biologinės jų funkcijos. Neabejojama, kad karotinoidai daro teigiamą įtaką žmogaus sveikatai, tačiau karotinoidai yra netirpūs vandenyje ir tai apsunkina jų potencialų panaudojimą vaistų ar papildų pramonėje. Vienas iš galimų šios problemos sprendimų yra tirpių molekulinių kompleksų sudarymas su kitomis molekulėmis [2].

Šiame darbe superkompiuteriu yra modeliuojami karotinoido likopeno ir farmacijoje žinomų molekulių – ciklodekstrinų [3] kompleksai, tiriamos šių kompleksų spektrinės savybės. Norėdami atlikti detalią molekulinių struktūrų analizę, pasitelkta tankio funkcionalo teorijos (DFT).



A



B

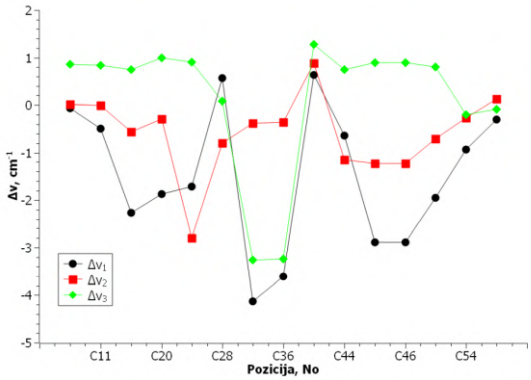
1 pav. γ-ciklodekstrino ir likopeno kompleksai gali susiformuoti kelių tipų, pvz. ties karotinoido pradžia (A) ar ties karotinoido viduriu (B).

Pirmiausia buvo optimizuojamos tiriamų monomerų α-, β-, γ-ciklodekstrinų ir likopeno geometrijos, pagal šiame darbe naudotą skaičiavimo metodiką DFT/B3LYP/cc-pVDZ. Vėliau suskaičiuojami jų Ramano spektrai.

Kitu etapu monomerai buvo grupuojami į kompleksus, dirbtinai padedant likopeną ciklodekstrino „viduje“ (1 pav.). Su kiekvienu ciklodekstrinu ir likopenu buvo sudaryta eilė struktūrų ir atrinkta nuo 12 iki 15 stabilių kompleksų tolimesniems tyrimams (1 pav.). Akivaizdu, kad kompleksai gali susiformuoti ties beveik bet kuria likopeno grandinėlės vieta. Panašūs rezultatai buvo gauti su betakaroteno struktūra anksčiau [3]. Panašūs rezultatai buvo gauti nagrinėjant kompleksus su α-, β-, γ-ciklodekstrinais.

Visiems ciklodekstrinų kompleksams buvo skaičiuojami Ramano spektrai. Tiriant šių struktūrų spektrus gauta, kad pagrindiniai Ramano spektro pikai ν_1, ν_2, ν_3 pasislenka, o šie poslinkiai priklauso nuo ciklodekstrino dydžio ir pozicijos likopeno atžvilgiu. Pagrindinių Ramano spektro dažnių poslinkių skirtumai lyginant su likopeno monomero Ramano spektru yra pavaizduoti 2 paveiksle.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.



2 pav. γ-ciklodekstrino ir likopeno kompleksas Ramano v1 linijos poslinkis

Reikšminiai žodžiai: karotinoidai, Ramano spektroskopija, kvantinė chemija.

Literatūra

[1] Junko Yabuzaki. Carotenoids Database: structures, chemical fingerprints, and distribution among organisms. Database, 2017, 02, 2017
[2] Phennapha Saokham, Chutimon Muankaew, Phatsawee Jansook, and Thorsteinn Loftsson. Solubility of cyclodextrins and drug/cyclodextrin complexes. Moleculaes, 23(5), 2018
[3] M. Macernis, A. Bockuviene, R. Gruskiene et. al., J. Mol. Str., **1226**, 129362, (2021).

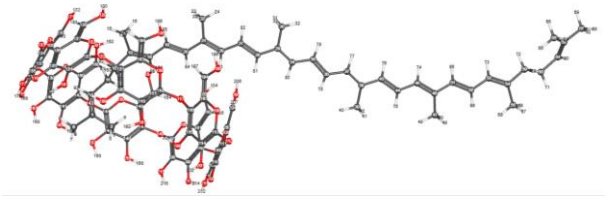
Likopeno molekulinių struktūrų ir spektrų modeliavimas tankio funkcionalų metodais superkompiuteriu

Lycopene structure and spectral properties study using DFT methods with supercomputer

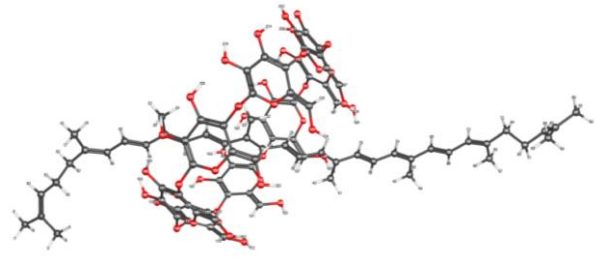
Oskaras Balkus[1], Laurynas Diska[1], Alma Bockuviene[2], Jolanta Sereikaitė[3], Mindaugas Mačernis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[3]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Molekulinės biotechnologijos laboratorija, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Karotinoidai yra labai plačiai gamtoje paplitusios molekulės. Šiuo metu jų gamtoje yra priskaičiuojama daugiau nei virš tūkstančio [1]. Didžiulė karotinoidų gausa ir skirtingos jų cheminės savybės kelia klausimus dėl biologinės jų funkcijos. Neabejojama, kad karotinoidai daro teigiamą įtaką žmogaus sveikatai, tačiau karotinoidai yra netirpūs vandenyje ir tai apsunkina jų potencialų panaudojimą vaistų ar papildų pramonėje. Vienas iš galimų šios problemos sprendimų yra tirpių molekulinių kompleksų sudarymas su kitomis molekulėmis [2].

Šiame darbe superkompiuteriu yra modeliuojami karotinoido likopeno ir farmacijoje žinomų molekulių – ciklodekstrinų [3] kompleksai, tiriamos šių kompleksų spektrinės savybės. Norėdami atlikti detalią molekulinių struktūrų analizę, pasitelkta tankio funkcionalo teorijos (DFT).



A



B

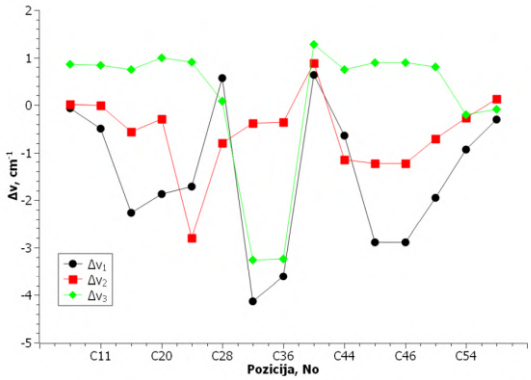
1 pav. γ-ciklodekstrino ir likopeno kompleksai gali susiformuoti kelių tipų, pvz. ties karotinoido pradžia (A) ar ties karotinoido viduriu (B).

Pirmiausia buvo optimizuojamos tiriamų monomerų α-, β-, γ-ciklodekstrinų ir likopeno geometrijos, pagal šiame darbe naudotą skaičiavimo metodiką DFT/B3LYP/cc-pVDZ. Vėliau suskaičiuojami jų Ramano spektrai.

Kitu etapu monomerai buvo grupuojami į kompleksus, dirbtinai padedant likopeną ciklodekstrino „viduje“ (1 pav.). Su kiekvienu ciklodekstrinu ir likopenu buvo sudaryta eilė struktūrų ir atrinkta nuo 12 iki 15 stabilių kompleksų tolimesniems tyrimams (1 pav.). Akivaizdu, kad kompleksai gali susiformuoti ties beveik bet kuria likopeno grandinėlės vieta. Panašūs rezultatai buvo gauti su betakaroteno struktūra anksčiau [3]. Panašūs rezultatai buvo gauti nagrinėjant kompleksus su α-, β-, γ-ciklodekstrinais.

Visiems ciklodekstrinų kompleksams buvo skaičiuojami Ramano spektrai. Tiriant šių struktūrų spektrus gauta, kad pagrindiniai Ramano spektro pikai ν_1, ν_2, ν_3 pasislenka, o šie poslinkiai priklauso nuo ciklodekstrino dydžio ir pozicijos likopeno atžvilgiu. Pagrindinių Ramano spektro dažnių poslinkių skirtumai lyginant su likopeno monomero Ramano spektru yra pavaizduoti 2 paveiksle.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.



2 pav. γ-ciklodekstrino ir likopeno kompleksas Ramano v1 linijos poslinkis

Reikšminiai žodžiai: karotinoidai, Ramano spektroskopija, kvantinė chemija.

Literatūra

[1] Junko Yabuzaki. Carotenoids Database: structures, chemical fingerprints, and distribution among organisms. Database, 2017, 02, 2017
[2] Phennapha Saokham, Chutimon Muankaew, Phatsawee Jansook, and Thorsteinn Loftsson. Solubility of cyclodextrins and drug/cyclodextrin complexes. Moleculaes, 23(5), 2018
[3] M. Macernis, A. Bockuviene, R. Gruskiene et. al., J. Mol. Str., **1226**, 129362, (2021).

Struktūrinė acetilsalicilo rūgšties ir jos šiluminės disociacijos produktų analizė pasinaudojant žemos temperatūros virpesine spektroskopija

Structural analysis of acetylsalicylic acid and its thermal dissociation products by low-temperature vibrational spectroscopy

Rasa Platakytė[1],Justinas Čeponkus[1], Claudine Crepin-Gilbert[2], Wutharath Chin[2], Julien Berthomier[2]
[1]Institute of Chemical Physics, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405, Orsay, France
rasa.platakyte@ff.vu.lt

Acetylsalicylic acid (ASA), more commonly known as aspirin, is a drug whose anti-inflammatory and pain-reducing properties have made it popular since its synthesis over a 100 years ago. ASA molecule is an aromatic compound with carboxy and ester groups at the ortho positions. It has several possible conformations, two of which could be observed in room temperature according to their energy (table 1).

Low temperature vibrational spectroscopy is a useful tool for structural analysis of a single molecule. Matrix isolation experiments have been previously performed for salicylic acid (SA) molecules[1]. As the vapor pressure of ASA is too low to make the mixture at room temperature, the sample has to be heated which means ASA molecules can easily thermally dissociate. During the course of this research, matrices such as nitrogen and argon were employed. Most recently, ASA was isolated in para-hydrogen matrix (figure 1). The para-hydrogen is obtained through a conversion process before each experiment and requires very low temperatures (in the range of 2 to 3 K). It forms a relatively "soft" matrix which allows large amplitude motions of the guest molecules.

Table 1. Calculated energies of three most stable acetylsalicylic acid conformers (B3LYP/6-311++G(3df,3pd))

Name	*E, H*	*ΔE, kJ/mol*	*% pop.*
1a	-648,936	0	82
2a	-648,935	3,9	16
2b	-648,928	22,8	0,008

ASA samples were heated to between 50 °C and 110 °C, searching for the optimal temperature to avoid thermal decomposition. The main thermal dissociation products of ASA are acetic acid (AA) and salicylic acid[2]. Acetylsalicylic acid also dissociates into salicylic acid in the presence of water.

In figure 1, infrared absorption spectra of ASA heated to different temperatures, and isolated in para-hydrogen matrix, are presented. When the sample is heated to the highest temperature (100 °C), the bands of AA can be clearly observed (the highest intensity band can be seen at 1780 cm^{-1}). As the sample heating temperature decreases, SA (1706 cm^{-1}) and ASA (1755 cm^{-1}) bands become more prevalent. If the concentration of thermal dissociation products is high, or after annealing, complex bands of ASA-decomposition products, as well as ASA-water, can dominate the spectra and complicate the analysis.

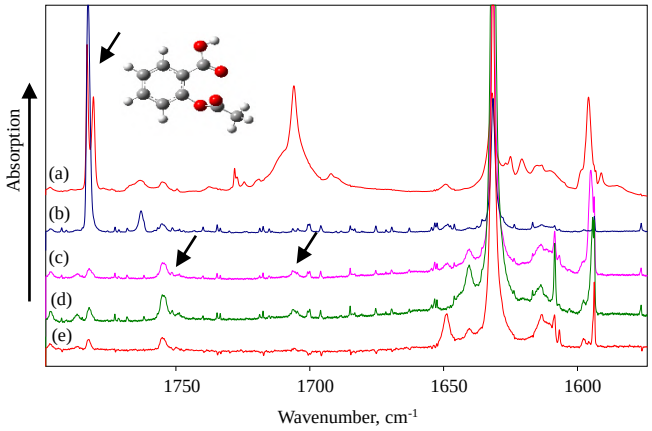


Fig. 1. Infrared absorption spectra of acetylsalicylic acid in para-hydrogen matrix. Sample heated to (a) 100 °C, (b) 70 °C, (c) 60 °C, (d) 55 °C and (e) 50 °C.

In order to better understand the structure of the molecule, irradiation and annealing experiments were also performed on the samples with best ASA to dissociation products ratio. The irradiation was performed with a tunable pulsed laser, at 300 nm, 290 nm and 270 nm. The biggest differences are observed after irradiation at 270 nm – the 1755 cm^{-1} band decreases in intensity, suggesting that ASA starts to disappear. However, there are several bands that grow in intensity, meaning it is possible that irradiation increases the concentration of higher energy conformer.

Keywords: vibrational spectroscopy, matrix isolation, conformers, NSAIDs.

This research was funded by Gilibert program grant agreement No. S-LZ-19–1 from the Research Council of Lithuania.

Literature

[1] M. Miyagawa, N. Akai, M. Nakata, *Chem. Phys. Letters*, **602** (2014).
[2] Y. Asakura Ribeiro, A.C.F. Caires, N. Boralle, M. Ionashiro, *Termochim. Acta*, **279** (1996).

Heliobakterijos reakcinio centro pigmentų sužadinimo energijų modeliavimas naudojant elektrostatinį modelį

Energy landscape and computational spectroscopy of heliobacterial reaction center obtained by electrostatic modeling

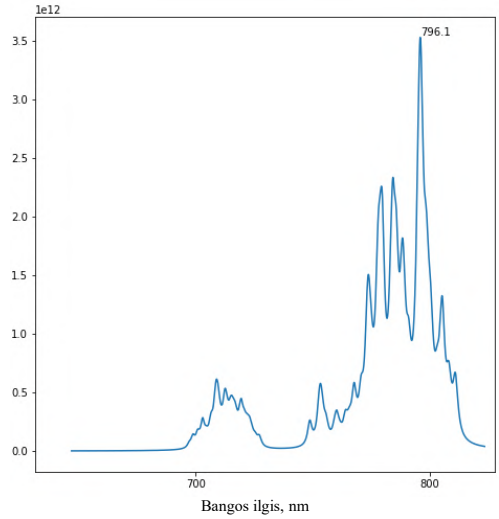
Kristina Zakutauskaitė, Mindaugas Mačernis, Darius Abramavičius
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
Cheminės Fizikos Institutas
kristina.zakutauskaite@gmail.com

Tikėina, jog “Heliobacterium modesticaldum” (hRC) reakcijos centras (RC) savo struktūra yra artimiausias senesniam prototipiniam fotosintetiniam reakciniam centrui ir dėl šios priežasties gali vaidinti svarbų vaidmenį atskleidžiant fotosintezės kilmę bei ankstyvąją evoliuciją. Manoma, jog šie reakciniai centrai kadaise išsivystė iš homodimerinio baltymo. Heliobakterijos- antra pagal dydį dažniausiai randamų fototropų grupių, vykdančių fotosintezę negaminant deguonies. Tai suteikia paspirtį tyrinėti hRC struktūrą bei funkcinius santykius pažangiais spektroskopiniais tyrimais bei teoriniais modeliais.

Mes patobulinome elektroninių sužadinimų sugerties spektro hRC 1-mo tipo reakcijos centro teorinį modelį naudodami pilną baltymo struktūrinę informaciją parametrizuojant Frenkelio eksitonų modelį.

Šiame atvirų kvantinių sistemų teoriniame darbe atliekama elektroninių sužadinimų teorinė analizė naudojant eksitoninį modelį. Rezultatai lyginami su lazerinės spektroskopijos eksperimentiniais duomenimis, nusakančiais šios fotosintetinės sitemos atsaką į įvairius šviesos signalus iš [1] bei [2]. Pradėjome nuo ankščiau publikuoto Itoh ir Kimura teorinio modelio [3], skirto tirti hRC sužadinimų dinamikai. Gautermano keturių orbitalių modelis pritaikomas apibūdinti pigmentų optiniams sužaidinimams įskaitant Qx (aukštesnės energijos) bei Qy (žemesnės energijos) molekulinius sužadinimus. Naudojant komplekso atomų išsidėstymą (gautą naudojant PDB duomenų bazę), atlikus sužadintų būsenų analizę (naudojant nuo laiko priklausomą tankio funkcionalo teoriją- TDDFT) bei dalinių krūvių informaciją (gautą PDB2PQR įrankiu), mes atnaujinome sistemos Hamiltonianą suskaičiavę pigmentų lokalių optinių sužadinimų energijas, eksitonines rezonansines sąveikas tarp pigmentų, bei suskaičiavome sugerties spektrą, remdamiesi nauju modeliu 1 pav.

Ankščiau naudoti šios fotosistemos teoriniai modeliai įskaitė tik žemesnės sužadinimo energijos šuolius- Qy, kurie dalyvauja fotosintetiniame saulės energijos surinkimo bei konversijos procesuose reakciniuose centruose. Kitą vertus, ankščiau ignoruota Qx sužadinimo būsena gali būti svarbi reakcinių centrų funkcinei struktūrinei analizei. Jos sužadinimo dipolinis momentas ženkliai mažesnis nei Qy taigi Qx šuolis yra labiau lokalus. Dėl šios priežasties Qx sužadinimų analizė gali padėti tirti individualių (bakterio)chlorofilų charakteristikas: individualias sužadinimo energijas, lokalias sąveikas su baltymu.



1 pav. hBC gugerties spektras, gautas naudojant elektrostatinį modelį

Reikšminiai žodžiai: atviros kvantinės sistemos, reakcinis centras, elektroniniai sužadinimai, elektrostatinis, sužadinimai.

Literatūra

[1] Neerken, S.; Aartsma, T. J.; Amesz, J. Pathways of Energy Transformation in Antenna Reaction Center Complexes of Heliobacillus mobilis. Biochemistry, 2000, 39, 3297-9904.

[2] Miyamoto, R.; Iwaki, M.; Mino, H.; Harada, J.; Itoh, S.; Oh-oka, H. ESR Signal of the Iron − Sulfur Center FX and Its Function in the Homodimeric Reaction Center of Heliobacterium modesticaldum. Biochemistry 2006, 45, 6306−6316.

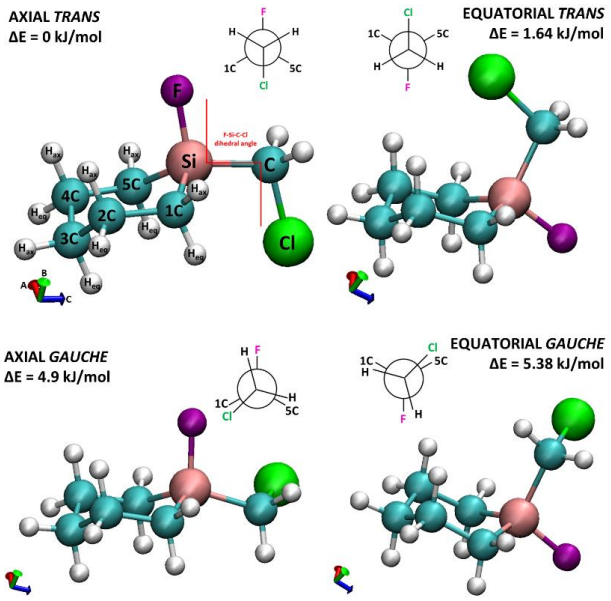
[3] A. Kimura and S. Itoh. Theoretical model of exciton states and ultrafast energy transfer in heliobacterial type i homodimeric reaction center, The Journal of Physical Chemistry, 2018, 11852-11859.

1-chloromethyl-1-fluorosilacyclohexane conformations and its rearrangements analysis by means of computational and vibrational study

Joanna Stocka[1], Rasa Platakytė[1], Justinas Čeponkus[1], Valdas Šablinskas[1], Gamil A. Guirgis[2], Paweł Rodziewicz[3]

[1] Chemical Physics Institute, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lithuania
[2] Department of Chemistry and Biochemistry, College of Charleston, Charleston, SC 29424, USA
[3] Institute of Chemistry, Jan Kochanowski University, 15G Świętokrzyska St., 25-406, Kielce, Poland
joana.stocka@gmail.com

Organosilicon compounds can be very useful in the field of surface science. Cyclic hydrocarbon films have good surface adhesion properties which are mostly related to a π electron orbital[1]. Substituting one carbon atom in the ring with a silicon atom enhances adhesion since it acts as hydrolytically sensitive center that can react with inorganic substrates such as glass to form stable covalent bonds[2]. 1-chloromethyl-1-fluorosilacyclohexane is a newly synthesized molecular compound with unknown structural parameters and conformational diversity.



Fiqure 1 Structures of four lowest energy conformers of 1-chloromethyl-1-fluorosilacyclohexane and the respective DFT/B3LYP relative energies. The F-Si-C-Cl dihedral angle change is shown as Newman projection. Internal axes are marked as: A (red), B (green), C (blue).

Several different vibrational spectroscopy methods were employed to analyse the properties of this molecule. Infrared and Raman spectra were recorded for the sample in liquid phase. Additionally, IR spectra were registered in gaseous phase and after isolating the molecule in argon and nitrogen matrices with and without a usage of hot nozzle technique. DFT calculations were performed utilizing B3LYP functional and augmented Dunning correlation-consistent valence double zeta basis set. The 1-fluoro-1-chlormethyl-silacyclohexane molecule can reveal twelve conformations out of which the chair-axial-trans one has the lowest energy. However, there are also three more chair type conformers that are stable enough to possibly be observed in experimental spectra.

keywords: IR, Raman, matrix isolation, conformational analysis, DFT

Literature

[1] H. Butt, K Graf, M. Kappl, Physics and Chemistry of Interfaces, Wiley, 2003
[2] J. Ceponkus, V. Sablinskas, V.Aleksa, M.Pucetaite, R.Platakyte, C.W.Reed, C.Cotter, G.Guirgis, Vibrational Spectroscopy, 81, 136-143, 2015

XIX a. ikonų gruntinio sluoksnio kiekybinė analizė taikant Ramano mikrospektroskopijos metodą

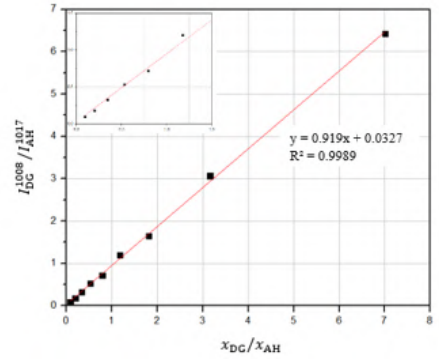
Quantitative analysis of 19th century icons' ground layers using Raman microspectroscopy.

Ieva Neimantaitė[1], Valdemaras Aleksa[2], Jurga Bagdzevičienė[3]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222, Vilnius
[2]Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius
valdemaras.aleksa@ff.vu.lt

Šiuo metu Vilniuje įsikūrusiame LDM Prano Gudyno restauravimo centre restauruojamos trys XIX a. ikonos: „Šventasis Simonas ir Šventasis Mikalojus“, „Viešpats visagalis“ ir „Dievo motina“. Restauruojant meno kūrinius labai svarbu tiek kokybiškai įvertinti medžiagas, tiek ir kiekybiškai tiksliai nustatyti sudedamųjų medžiagų proporcijas, kad gruntas būtų kiek įmanoma panašios sudėties ir savybių kaip naudotas originalo autoriaus. Siekiant tiksliai nustatyti ikonų gruntinio sluoksnio užpildo sudėtį, tyrimams panaudotas virpesinės spektroskopijos metodas – Ramano sklaidos mikrospektroskopija.

Ramano sklaidos spektrai registruoti naudojant S&I GmbH konfokalinį Ramano gardelinį spektrometrą su mikroskopu „MonoVista CRS“. Pasirinkta 785 nm bangų ilgio žadinančioji spinduliuotė, kurios galia 2,8 mW . Matavimai atlikti naudojant 1500 rėžių/mm difrakcinę gardelę, parinktas įėjimo plyšio plotis 100 µm, skiriamoji geba 2 cm^{-1}.

Pirminiuose ikonų gruntinio sluoksnio tyrimuose nustatyta, kad užpildus sudaro anhidritas II (β-$CaSO_4$) ar jo mišiniai su dihidračiu gipsu ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$). Siekiant nustatyti anhidrito II (AHII) bei dihidračio gipso (DG) kiekį ikonose, buvo paruošti mišiniai su skirtingais AHII ir DG kiekiais juose, bei užregistruotos šių bandinių DG Ramano sklaidos spektrinės juostos ties 1008 cm^{-1} (simetriniai valentiniai SO_4 virpesiai) ir AH II Ramano sklaidos spektrinės juostos ties 1017 cm^{-1} (simetriniai valentiniai SO_4 virpesiai) intensyvumų koncentracinės priklausomybės. Gauti rezultatai atitiko teoriją [1], kad Ramano sklaidos integrinis juostos intensyvumas yra proporcingas analitės koncentracijai mišinyje. Tuomet apskaičiuota integrinių intensyvumų santykio priklausomybė nuo dihidračio gipso ir anhidrito II koncentracijų santykio (x_{DG}/x_{AH}) mišiniuose (1 pav).



1 pav. Ramano sklaidos juostų intensyvumų santykio $I_{DG}^{1008}/I_{AH}^{1017}$ priklausomybė nuo x_{DG}/x_{AH} mišinyje.

Iš $I_{DG}^{1008}/I_{AH}^{1017}$ tiesinės priklausomybės nuo x_{DG}/x_{AH} nustatytas koeficientas K = 0,919 ir koreliacijos koeficientas R^2 = 0,9989, kurie tenkina kiekybinei analizei keliamus patikimumo reikalavimus

Remiantis literatūroje [2] aprašyta metodika, išvesta formulė (1), pagal kurią, laikant, kad $x_{DG} + x_{AH} = 1$, gali būti randama dihidračio gipso ir anhidrito dalis mišinyje:

$$\frac{I_{DG}^{1008}}{I_{AH}^{1017}} = 0{,}919 \times \frac{x_{DG}}{x_{AH}} . \quad (1)$$

Užregistruoti trijų restauruojamų ikonų gruntinio sluoksnio Ramano sklaidos spektrai simetrinių valentinių SO_4 virpesių srityje. Pagal (1) apskaičiuoti DG ir AHII kiekiai tirtų ikonų grunte. Nustatyta, kad gruntinio sluoksnio užpildą ikonoje „Šventasis Simonas ir Šventasis Mikalojus“ sudaro anhidritas II, o kitose dviejose ikonose („Viešpats visagalis“, „Dievo motina“) gruntinio sluoksnio užpildą sudaro dihidračio gipso ir anhidrito II mišinys: 63 % (DG) ir 33 % (AHII) ir atitinkamai 88 % (DG) ir 10 % (AHII). Vidutinė kvadratinė prognozavimo paklaidos (RMSEP) skaitinė vertė 3,9 %.

Reikšminiai žodžiai: gruntinis sluoksnis, kiekybinė analizė, anhidritas, dihidratis gipsas, Ramano mikrospektroskopija.

Literatūra

[1] M. J. Pelletier, "Quantitative Analysis Using Raman Spectrometry," Appl. Spectrosc. 57, 20A-42A (2003).
[2] Kontoyannis, C. et al. “Quantitative Analysis of Sulfated Calcium Carbonates Using Raman Spectroscopy and X-ray Powder Diffraction.” *Analyst* 122 (1997): 33-38.

Mėlyni karbazolo-naftiridino spinduoliai našiems organiniams TADF šviestukams

Carbazole-naphthyridine blue emitters for highly efficient TADF OLEDs

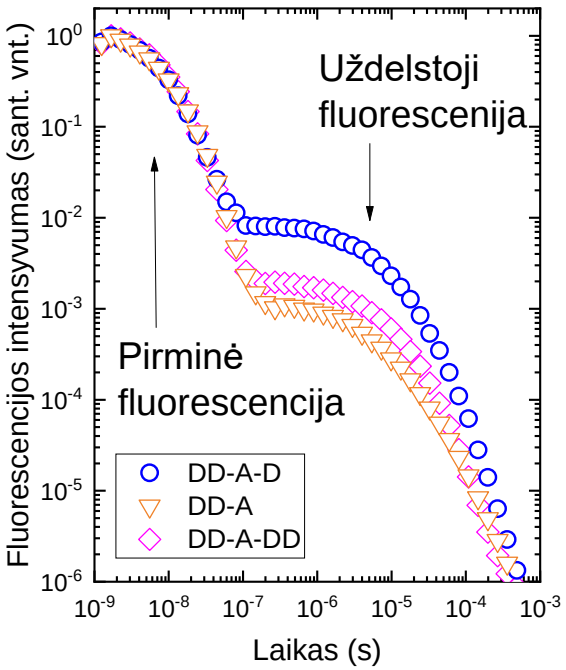
Gediminas Kreiza[1], Dovydas Banevičius[1], Rokas Klioštoraitis[1], Saulius Juršėnas[1], Tomas Javorskis[2], Vytenis Vaitkevičius[2], Edvinas Orentas[2], Karolis Kazlauskas[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Organinės chemijos katedra, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

gediminas.kreiza@ff.vu.lt

Šiluma aktyvuota uždelstąja fluorescencija (TADF) pasižymintys organiniai junginiai susilaukia vis daugiau dėmesio dėl galimybės būti panaudotiems aukšto našumo organinių šviestukų gamyboje [1]. Ypatinga TADF junginių molekulinė struktūra leidžia realizuoti itin mažus energijų tarpus tarp singuletinių ir tripletinių būsenų ir tuo būdu stipriai paspartinti šiluma aktyvuojamą atgalinės interkombinacinės konversijos (RISC) procesą. Efektyvus RISC yra nepaprastai svarbus, kadangi užtikrina nespindulinių tripletinių būsenų konversiją į spindulines singuletines būsenas. Tai leido pademonstruoti OLED prietaisus, kurių išorinis kvantinis našumas siekia 20% ir daugiau (kas reiškia, jog vidinis kvantinis našumas – 100%), nepanaudojant brangiųjų metalų pagrindu sukurtų fosforescencinių spinduolių [2].

Visgi RISC yra laikomas gana lėtu procesu, įprastai trunkančiu keliasdešimt mikrosekundžių. Tai, savo ruožtu, lemia ilgai trunkančią uždelstąją fluorescenciją, dažnai sukeliančią žalingas singlet-tripletinę (STA) arba triplet-tripletinę anihiliacijas (TTA) OLED prietaisuose, esant dideliam srovės tankiui [3]. Dėl pastarųjų procesų atsiranda stiprus prietaisų efektyvumo sumažėjimas ties didelėmis galiomis, kurių reikalauja praktinis OLED taikymas ekranuose ir apšvietime. Tai laikoma vienu iš pagrindinių TADF junginių trūkumu, ribojančiu jų komercializavimą.

Siekiant įvertinti galimybes valdyti RISC spartą organiniuose TADF spinduoliuose, šiame darbe buvo susintetinta nauja, molekulinės struktūros variacijomis pasižyminti, karbazolo donorus ir naftiridino akceptorių turinti junginių grupė. Šioje grupėje prie centrinio naftiridino akceptoriaus (A) buvo prijungtas arba tik vienas arba du vienodi dikarbazolo donorai (DD), arba vienas DD, o kitas karbazolo (D) fragmentas. Atlikus išsamią junginių fotofizikinių savybių analizę, nustatyta, kad dviejų skirtingų donorų (DD ir D) panaudojimas viename nesimetriniame junginyje sukuria palankias sąlygas greitam RISC pasiekti (iki $1{,}4\times10^{6}$ s^{-1}) dėl atsiradusių energetiškai artimų krūvio pernašos ir lokalių sužadintų tripletinių būsenų. Tai nulėmė trumpas uždelstosios fluorescencijos trukmes (7 µs, 1 pav.) ir aukštą nesimetrinio spinduolio fluorescenijos kvantinį našumą (73%). Pasiekti parametrai leido pagaminti mėlynus (476 nm) organinius TADF šviestukus, pasižyminčius ne tik itin aukštu išoriniu kvantiniu našumu (20%), bet ir nežymiu efektyvumo nuokryčiu ties praktiniam panaudojimui reikalingomis šviesio vertėmis.



1 pav. Tirtų karbazolo-naftiridino junginių struktūrinių variacijų fluorescencijos kinetikos DPEPO matricoje.

Reikšminiai žodžiai: šiluma aktyvuota uždelstoji fluorescencija, kinetika, organiniai šviestukai, atgalinė interkombinacinė konversija, TADF-OLED.

Literatūra

[1] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, and C. Adachi, Nature, **492**, 234-238 (2012).
[2] F. B. Dias, K. N. Bourdakos, V. Jankus, K. C. Moss, K. T. Kamtekar, V. Bhalla, J. Santos, M. R. Bryce and A. P. Monkman, Adv. Mater., **25**, 3707–3714 (2013).
[3] K. Masui, H. Nakanotani and C. Adachi, Org. Electron., **14**, 2721–2726 (2013).

Šviesolaidinė paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos (SERS) spektrų registravimo sistema

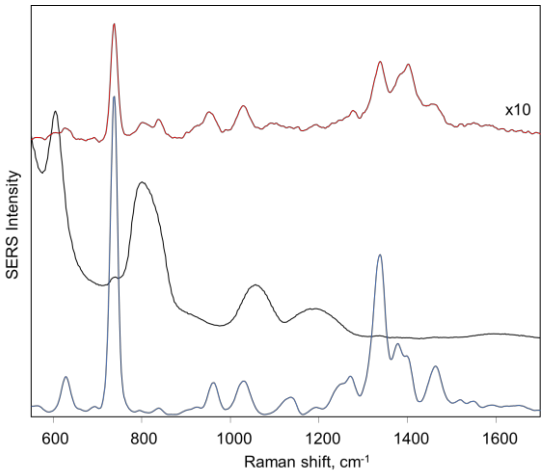
Optical Fiber-based Surface Enhanced Raman Scattering (SERS) Spectroscopic System

Marius Balodis, Sonata Adomavičiūtė-Grabusovė, Valdas Šablinskas
Vilniaus universitetas, fizikos fakultetas, cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
sonata.adomaviciute@ff.vu.lt

Šiuolaikinėje medicininėje diagnostikoje yra didžiulis naujų nedestrukcinių greitos kokybinės ir kiekybinės biologinių skysčių spektrinės cheminės analizės metodų poreikis.. Paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos (SERS) spektroskopija yra tinkamas diagnostinis metodas biomedicinoje, leidžiantis aptikti itin mažas medžiagos koncentracijas (siekiančias iki 10^{-15} mol/l). Šiais laikais naudojant klasikinę (*ex vivo*) SERS spektroskopiją galima atlikti biologinių skysčių ir audinių tyrimą [1], aptikti audinių defektus [2] ir nedideles neleistinų medžiagų koncentracijas (narkotikus, dopingą ir kt.) [3]. Tačiau standartiniai SERS spektriniai prietaisai netinka *in situ* ir *in vivo* spektriniams tyrimams. Klasikinių eksperimentų atveju SERS bandinys ruošiamas panaudojant metalo nanodalelių koloidinį tirpalą prieš jį patalpinant į spektrinį prietaisą. Tokie eksperimentai nėra nei pakankamai praktiški, nei biologiškai suderinami. Taigi šio tyrimo tikslas yra šviesolaidžių pagrindu sukurti SERS optinę sistemą, skirtą nuotoliniam biologinių audinių spektriniam tyrimui bei atlikti jos testavimą.

Mūsų darbe buvo suprojektuota dviejų šviesolaidžių sistema taip, kad veiktų kaip efektyvus SERS zondas su susilpnintu šviesolaidžių medžiagos Ramano spektru. Sistemoje yra panaudoti du šviesolaidžiai: 100 µm skersmens - Ramano sklaidos žadinimui ir 600 µm skersmens - spektrinio signalo surinkimui. Tokio zondo galimybės buvo išbandytos registruojant 1 mM adenino vandeninio tirpalo SERS spektrus. Buvo registruojami 2 mM adenino tirpalo 1:1 santykiu sumaišyto su sidabro nanodalelių koloidu SERS spektrai. Tokio tipo zondo parametrai buvo optimizuoti keičiant kampą ir atstumą tarp žadinančio ir surenkančio spinduliuotę šviesolaidžių. Intensyviausias adenino SERS signalas su nufiltruota fonine Ramano spinduliuote buvo gautas kai kampas tarp šviesolaidžių 120º-100º. Užregistruoti adenino tirpalo SERS spektrai nenaudojant šviesolaidžio (klasikinio eksperimento sąlygomis) ir SERS šviesolaidinio zondo optine sistema pavaizduoti 1 pav. Šviesolaidinio zondo sistemoje naudojant tik 600 µm skersmens šviesolaidį SERS žadinimui ir signalo surinkimui spektre stebima intensyvi foninė kvarcinio stiklo (t.y. šviesolaidžio medžiagos) Ramano spinduliuotė (1 pav. viduryje) kartu su intensyviausiomis adenino SERS spektrinėmis juostomis ties 738 cm^{-1} (žiedo kvėpavimo virpesys) ir ties 1347 cm^{-1} (žiedo virpesys). Naudojant dviejų šviesolaidžių sistemą absoliutus adenino SERS spektrinių juostų intensyvumas yra panašus kaip ir registravimo sistemos su vienu šviesolaidžiu atveju, tačiau ženkliai skiriasi foninės Ramano spinduliuotės lygis (1 pav. viršuje).

Naudojant dviejų šviesolaidžių sistemą galima užregistruoti adenino tirpalo SERS spektrus su labai silpna fonine šviesolaidžio Ramano spinduliuote. Tolesni tokios SERS sistemos jautrumo tyrimai bus atliekami su inkstų tarpląsteliniu skysčiu, nustatant spektrinius skirtumus tarp vėžinio ir sveiko inkstų audinių.



1 pav. Adenino tirpalo (1 mM) SERS spektrai, užregistruoti: be šviesolaidžio (apačioje), naudojant vieną 600 µm skersmens šviesolaidį (viduryje) ir naudojant du šviesolaidžius (viršuje).

Reikšminiai žodžiai: SERS, fiber SERS, optical fiber, SERS probe.

Literatūra

[1] Hering, K., Cialla, D., Ackermann, K. et al. SERS: a versatile tool in chemical and biochemical diagnostics. Anal Bioanal Chem 390, 113–124 (2008). https://doi.org/10.1007/s00216-007-1667-3

[2] Wang, Y., Kang, S., Khan, A. et al. Quantitative molecular phenotyping with topically applied SERS nanoparticles for intraoperative guidance of breast cancer lumpectomy. Sci Rep 6, 21242 (2016). https://doi.org/10.1038/srep21242

[3] Inscore, Frank, et al. "Detection of drugs of abuse in saliva by surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS)." Applied spectroscopy 65.9 (2011): 1004-1008.

Cinko-bakteriochlorofilo A' sąveikos tyrimai Chloroacidobacterium thermophilum reakcijų centruose naudojant EPR spektroskopiją

Elucidating the Role of Zinc-Bacteriochlorophyll A' in the Chloroacidobacterium thermophilum Reaction Centers Using EPR Spectroscopy

Vidmantas Kalendra[1,2], Philip Charles[2], Zhihui He[3], Juras Banys[1], Art van der Est[4], John H. Golbeck[5], Donald A. Bryant[3], K.V. Lakshmi[2]
[1]Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
[2]Departments of Chemistry and Physics, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY, USA
[3]Biochemistry and Molecular Biology, Pennsylvania State University, State College, PA, USA
[4]Chemistry, Brock University, St. Catharines, ON, Canada
[5]Biochemistry and Molecular Biology and Chemistry, Pennsylvania State University, State College, PA, USA
vidmantas.kalendra@ff.vu.lt

Chloracidobacterium (C.) thermophilum is a microaerophilic, chlorophototrophic species in the phylum Acidobacteria that uses homodimeric type-1 reaction centers (RC) to convert light energy into chemical energy using (bacterio)chlorophyll ((B)Chl) cofactors. Pigment analyses show that these RCs contain BChl a_P, Chl a_{PD}, and Zn^{2+}-BChl a_P' in the approximate ratio 7.1:5.4:1. However, the functional roles of these three different Chl species are not yet fully understood. It was recently demonstrated that Chl a_{PD} is the primary electron acceptor. Because Zn^{2+}-(B)Chl a_P' is present at low abundance, it was suggested that the primary electron donor might be a dimer of Zn^{2+}-BChl a_P' molecules. In this study, we utilize isotopic enrichment and electron paramagnetic resonance (EPR) high-resolution two-dimensional (2D) ^{14}N and ^{67}Zn hyperfine sublevel correlation (HYSCORE) spectroscopy to demonstrate that the primary donor cation, P_{840}^+, in the *C. thermophilum* RC is indeed a Zn^{2+}-BChl a_P' dimer. Density functional theory (DFT) calculations and the measured electron-nuclear hyperfine parameters of P_{840}^+ indicate that the electron spin density on P_{840}^+ is distributed nearly symmetrically over two Zn^{2+}-(B)Chl a_P' molecules as expected in a homodimeric RC. To our knowledge this is the only example of a photochemical RC in which the Chl molecules of the primary donor are metallated differently than those of the antenna.

The 2D ^{67}Zn HYSCORE spectroscopy measurements provide direct evidence that the excitonically coupled BChl dimer in the primary donor cation, P_{840}^+, is comprised of Zn-BChl a_P' molecules. Supporting this conclusion, (1) the maximal light induced bleaching at 840nm, (2) the relatively narrow line width of the continues wave (CW) EPR signal of P_{840}^+, (3) the smaller ^{14}N hyperfine coupling constants of the ring nitrogen atoms in comparison with monomeric Chl^+ and (4) DFT calculations showing a distributed electron density in a dimeric Zn^{2+}-BChl g_F' cation model all indicate that the charge density should be highly delocalized over a strongly excitonically coupled BChl dimer in the primary donor cation, P_{840}^+, of *C. thermophilum*. This is the first example of a photochemical RC in which the (B)Chl molecules in the primary donor are metallated differently than the other (B)Chls in the RC and antenna. In other respects, these unusual *C. thermophilum* RCs are nevertheless similar to other homodimeric type-1 RCs, as the spin density in P_{840}^+ is distributed symmetrically over the two Chls of the dimer. This work also demonstrates the utility of 2D ^{67}Zn HYSCORE spectroscopy for the study of zinc sites in paramagnetic systems. By the direct detection of ^{67}Zn hyperfine and quadrupolar couplings in a paramagnetic excited state of a ^{67}Zn labelled reaction center, we anticipate that in the future 2D ^{67}Zn HYSCORE spectroscopy will play an important role in the study of ^{67}Zn-enriched metalloproteins. Furthermore, a combination of 2D ^{67}Zn HYSCORE data and DFT calculations has the potential to be used as a tool to characterize Zn-containing paramagnetic systems with low ^{67}Zn concentrations. Overall, this study is a noteworthy contribution toward probing the relationship between ^{67}Zn hyperfine and quadrupolar interaction tensors and molecular structure in a paramagnetic system and provides excellent opportunities for the application of 2D ^{67}Zn HYSCORE in the investigation of zinc binding sites in a wide variety of bioinorganic systems.

Keywords: electron paramagnetic resonance, oxygen-evolving complex, photosystem-II, zinc-complexes.

References

[1] P. Charles, V. Kalendra, Z. He, M.H. Khatami, J.H. Golbeck, A. van der Est, K.V. Lakshmi and D.A. Bryant, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 6457 (2020).

Naujas metodas itin mažai anglies turinčių medžiagų grafitizavimui su automatizuota grafitizavimo sistema AGE-3

A novel approach to graphitization of small samples (<200 µg C) with automated graphitization system AGE-3

Laurynas Butkus[1], Žilvinas Ežerinskis[1], Justina Šapolaitė[1], Inga Garbarienė[1], Andrius Garbaras[1], Laurynas Bučinskas[1], Algirdas Pabedinskas[1], Vidmantas Remeikis[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
laurynas.butkus@ftmc.lt

Greitintuvo masių spektrometrija (angl. *Accelerator Mass Spectrometry*, AMS) įgalino atlikti radioanglies (^{14}C) analizę itin mažuose bandiniuose, kuriuose anglies kiekis gali neviršyti 1 mg. Moderniuose bandiniuose, turinčiuose 1 mg anglies, yra maždaug apie 6×10^7 radioanglies atomų. Dėl to, bandinio kiekis, reikalingas ^{14}C analizei atlikti, teoriškai gali būti žymiai mažesnis nei 1 mg C. Tačiau didžiausia problema, kuri kyla grafitizuojant mažiau nei <200 µg C turinčius bandinius su automatizuota grafitizavimo sistema (AGE-3), yra ta, jog esant tokiems anglies kiekiams nepilnai įvyksta grafitizacijos reakcija.

Daugelis radioanglies laboratorijų atlieka įvairius patobulinimus siekiant dar labiau sumažinti AMS matavimams reikalingą anglies kiekį net mažiau nei 50 µg C [1]. Norint maksimizuoti gaunamo grafito kiekį yra tobulinamas pats grafitizacijos procesas (pvz., optimizuojamas grafitizavimo sistemos tūris, reakcijos temperatūra, katalizatoriaus kiekiai bei kiti sistemos parametrai) [2]. Be to, atliekami įvairūs pakeitimai greitintuvo masių spektrometro jonų šaltinyje (pvz., keičiama šaltinio geometrija) [3].

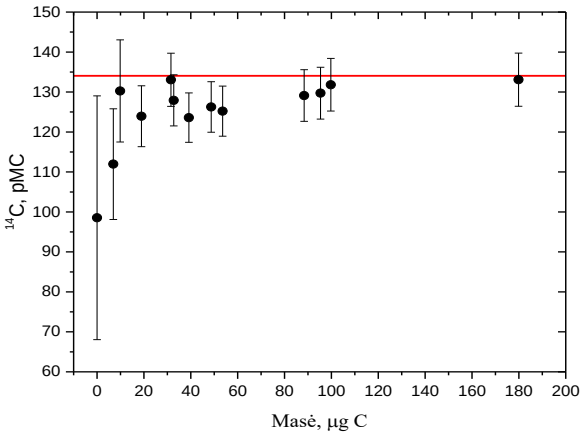
Tokių mažų bandinių problemą taip pat galima spręsti į mažo anglies kiekio bandinį pridedant tam tikrą kiekį žinomos ^{14}C koncentracijos medžiagos bei pasinaudojant masės balanso lygtimi (1) apskaičiuoti, kokia radioanglies koncentracija yra bandinyje:

$$m_x pMC_x = m_s pMC_s + m_d pMC_d \qquad (1)$$

Čia *m* yra masės, *pMC* – radioanglies koncentracijos vertės, o indeksai x, s ir d atitinkamai reiškia mišinį, bandinį ir priedą. Norint įvertinti metodo pritaikomumo ribas kaip bandinys buvo naudojama OXII pamatinė medžiaga (oksalo rūgštis), kurios ^{14}C vertė yra lygi 134,06 pMC. Kaip priedas buvo pasirinkta IAEA-C7 pamatinė medžiaga, kurios ^{14}C vertė yra lygi 49,53 pMC.

Grafitizavimas buvo atliekamas naudojantis automatizuota grafitizavimo sistema AGE-3 (Ionplus AG), kurią sudaro grafitizatorius, sujungtas su elementiniu analizatoriumi. AGE-3 sistemoje yra galimybė atskirai sudeginti bandinį ir priedą, o pasinaudojant ceolitine gaudykle sukombinuoti skirtingų deginimų metu susidariusias CO_2 dujas. Tikslūs anglies kiekiai pačiame bandinyje ir priede yra nustatomi elementiniu analizatoriumi.

Šiame tyrime buvo sugrafitizuota 13 bandinių (OXII), kuriuose anglies kiekis svyruoja nuo 5 iki 180 µg (1 pav.).



1 pav. Mažų bandinių (<200 µg C) ^{14}C verčių priklausomybė nuo anglies kiekio bandiniuose

1 pav. galima pastebėti, kad šiuo metodu paruoštų OXII bandinių (kuriuose yra daugiau nei 80 µg C) ^{14}C vertės paklaidų ribose atitinka nominalią OXII ^{14}C vertę, kuri 1 pav. pažymėta raudona linija. Mažiau nei 80 µg C turinčių bandinių radioanglies koncentracijos vertės yra pasislinkusios į mažesnę pusę, dėl to galima teigti, jog šis metodas yra tinkamas bandiniams, kuriuose yra ne mažiau nei 80 µg C.

Šis metodas yra puiki alternatyva labai mažai (<200 µg) anglies turinčių bandinių paruošimui ^{14}C analizei. Ypač jeigu viso bandinio neužtektų standartinei analizei atlikti nemodifikuojant turimos įrangos.

Reikšminiai žodžiai: radioanglis, ^{14}C, masės balanso lygtis.

Literatūra

[1] M. de Rooij, J. van der Plicht, and H. A. J. Meijer. "Sample dilution for AMS 14C analysis of small samples (30–150 µg C)." Radiocarbon 50.3 (2008): 413-436.
[2] J. Genberg et al. "Development of graphitization of µg-sized samples at Lund University." Radiocarbon 52.3 (2010): 1270-1276.
[3] J. Southon and G. M. Santos. "Life with MC-SNICS. Part II: Further ion source development at the Keck carbon cycle AMS facility." Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B Beam Interact. Mater. Atoms 259.1 (2007): 88-93.

Netiesinės singuletų anihiliacijos modeliavimas molekulinėje gardelėje

Modeling of singlet–singlet annihiliation in molecular lattice

Gabrielė Rankelytė[1,2], Jevgenij Chmeliov[1,2]
[1]Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius
[2]Molekulinių darinių fizikos skyrius, Fizinių ir technologijos moklsų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
gabriele.rankelyte@ff.stud.vu.lt

Eksitonų singuletų anihiliacija yra dažnai molekulinėse sistemose pasireiškiantis procesas. Užtikrinti eksperimentines sąlygas, kurios padėtų išvengti anihiliacijos, gali būti sudėtinga: naudojant mažo intensyvumo spinduliuotę, mažėja registruojamo signalo ir triukšmo santykis, o matavimo laiko ilginimas siekiant mažinti triukšmą ne visoms molekulinėms sistemoms yra tinkamas ar lengvai įgyvendinamas sprendimas. Todėl dažnai yra būtina atsižvelgti į anihiliacijos reiškinį modeliuojant molekulines sistemas.

Paprasčiausias anihiliacijos modelis išreiškiamas lygtimi:

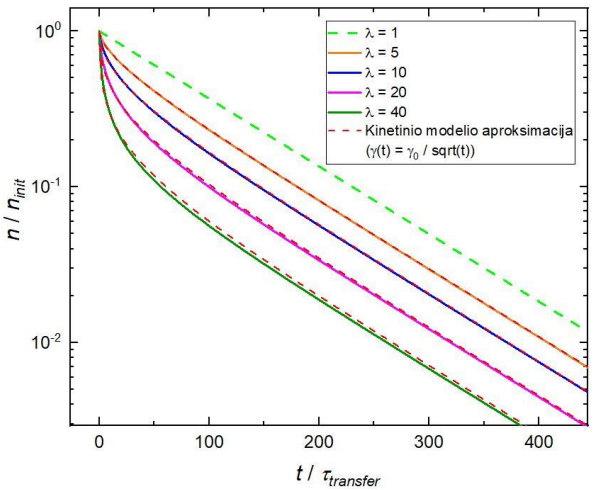
$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = -\gamma n^2, \qquad (1)$$

kurioje $n(t)$ yra vidutinis sistemoje išlikusių sužadinimų skaičius laiko momentu t, o γ yra anihiliacijos sparta. Šiame modelyje agregato dydis, sužadinimo pernašos sparta ir pradinis sužadinimų skaičius agregate yra laikomi dideliais dydžiais, todėl į pradinio sužadinimo skaičiaus diskretiškumą galima neatsižvelgti. Norint empiriškai įskaityti baigtinio dydžio pernašos spartą, anihiliacijos sparta γ yra laikoma nuo laiko priklausančia funkcija $\gamma(t)$, kuri vėlesniais laiko momentais yra proporcinga laipsniniam dėsniui [1]. Tikslesnė tokio modelio modifikacija – statistikinis modelis. Jis laiko pradinį sužadinimų skaičių diskrečiu dydžiu, tačiau agregatas vis tiek laikomas viena supermolekule, kurios energijos lygmenys aprašomi Pauli pagrindinių kinetinių lygčių sistema [2].

Tam, kad pernašos spartą ir diskretų sužadinimų skaičių būtų galima laikyti baigtiniais dydžiais, anihiliaciją molekuliniame agregate buvo pasirinkta modeliuoti naudojant Monte Karlo metodą ir tolydžiojo laiko atsitiktinio klaidžiojimo algoritmą. Modeliuojant suskaičiuojamas vieno milijono atsitiktinių kinetikų vidurkis naudojant diskretų pradinį sužadinimų skaičių gardelėje. Laikant, kad pradinis sužadinimų skaičius gardelėje aprašomas Puasono skirstiniu, gaunama kinetika su vidutiniu pradiniu sužadinimų skaičiumi. Tokios kinetikos suskaičiuojamos keičiant relaksacijos spartos dydį, Puasono skirstinio vidurkį bei molekulinio agregato dydį. Siekiant surasti labiausiai prie Monte Karlo metodu gautos kinetikos tinkantį laikinės funkcijos $\gamma(t)$ pavidalą, gautos kreivės yra aproksimuojamos statistikiniu bei kinetiniu (2) modeliais:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = -\gamma(t)n^2 - k_{\mathrm{rel}}n. \qquad (2)$$

Čia k_{rel} yra sužadinimo relaksacijos sparta.



1 pav. Sužadinimų skaičiaus kinetika vienmatėje molekulinėje gardelėje (λ – Puasono skirstinio vidurkis, molekulinės gardelės dydis – N = 100 mazgų). Gardelėje likus vienam sužadinimui, gesimas tampa eksponentinis dėl tiesinės relaksacijos (relaksacijos sparta yra $k_{\mathrm{rel}} = 10^{-2}\, k_{\mathrm{transfer}}$. Dydžiai τ_{transfer} ir k_{transfer} yra atitinkamai pernašos trukmė ir sparta).

Reikšminiai žodžiai: anihiliacija, kinetika, kinetinis modelis, statistikinis modelis.

Literatūra

[1] H. van Amerongen, L. Valkunas, R. van Grondelle. *Photosynthetic Excitons* (Singapore, World Scientific, 2000).

[2] V. Barzda, V. Gulbinas, R. Kananavicius, V. Cervinskas, H. van Amerongen, R. van Grondelle, L Valkunas, *Singlet-Singlet Annihilation Kinetics in Aggregates and Trimers of LHCII*, Biophys. J. **80**, 2409–2421 (2001).

^{137}Cs ir ^{239,240}Pu aktyvumo koncentracijų pasiskirstymo sausų bei pelkėtų dirvožemių vertikaliuose profiliuose tyrimas

Distribution of ^{137}Cs and ^{239,240}Pu activity concentrations in profiles of waterlogged and non-boggy soils

Laima Kazakevičiūtė-Jakučiūnienė, Evaldas Maceika, Rūta Druteikienė, Zita Žukauskaitė, Nikolaj Tarasiuk, Šarūnas Buivydas, Rasa Gvozdaitė

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
laima.kazakeviciute@ftmc.lt

Radioaktyvieji cezio ir plutonio izotopai natūraliai gamtinėje aplinkoje neegzistuoja. Jie atsiranda kaip branduolinio ginklo bandymų atmosferoje, branduolinio kuro perdirbimo gamyklų veiklos ir branduolinių įmonių avarijų padarinys. Šie izotopai yra ilgalaikės radioaktyviosios taršos atstovai dėl savo pusėjimo trukmės ($^{137}CsT_{1/2}$ ~ 30 m.; $^{239}PuT_{1/2}$ - 2,4 x 10^4 m., $^{240}PuT_{1/2}$ – 6,6 x 10^3 m., ^{238}Pu $T_{1/2}$ – 87,8 m.).

^{137}Cs ir Plutonio izotopai gali būti aptikti paviršiniame dirvožemio sluoksnyje, surišti su dirvožemio komponentais, prasiskverbiančiais į gilesnius dirvožemio sluoksnius. Radionuklidų judėjimo greitis dirvoje priklauso nuo daugelio veiksnių, tokių kaip cheminė radionuklidų forma, cheminė dirvožemio sudėtis, fizinės ir cheminės sąlygos, atmosferos kritulių kiekis, augalija ir jos rūšys, mikroorganizmų ir mažų mikroorganizmų aktyvumas, gyvūnų veikla (sliekai), taip pat žmogaus veikla. Yra paskelbta daug darbų apie vertikalų radionuklidų pasiskirstymą sausame ir nepelkėtame dirvožemyje [1–5], o užmirkusiame ir pelkėtame dirvožemyje paskelbtų darbų yra labai mažai.

Šio tyrimo tikslas buvo ištirti vertikalius ^{137}Cs, ^{239,240}Pu ir ^{238}Pu aktyvumo koncentracijos profilius sausame ir ežero vandeniu užliejamame dirvožemyje, palyginti plutonio aktyvumo koncentracijų pasiskirstymą tirtuose profiliuose su ^{137}Cs pasiskirstymu ir, remiantis eksperimentiniais duomenimis, nustatyti Pu izotopų ir ^{137}Cs kilmę tirtuose dirvožemiuose.

Šiems tyrimams atlikti buvo paimtos užliejamo ir sauso dirvožemio kolonėlės skirtingose Lietuvos vietose šalia trijų ežerų (Juodžio (N54°46'54",E25°26'54"), Paršelio (N54°05'0",E24°41'45") ir Bedugnio (N54°11'12",E24°09'14")) krantų. Laboratorijoje kolonėlių bandiniai buvo suskirstyti 1 cm storio vertikaliais sluoksniais. Kiekviename sluoksnyje pagal gama spektrometrinius matavimus įvertintos ^{137}Cs aktyvumo koncentracijos, o atlikus radiocheminę bandinių analizę ir alfa-spektrometrinius matavimus, nustatytos ^{238}Pu ir ^{239,240}Pu aktyvumo koncentracijos.

Tyrimai parodė, kad užliejamų dirvožemių radioaktyvi apkrova ežerų pakrantėse gali būti tiek didesnė tiek ir mažesnė nei sauso dirvožemio. Jo vertė daugiausia priklauso nuo radioaktyviųjų iškritų nusėdimo bei užsilaikymo ant ežero kranto paviršiaus sąlygų, tokių kaip vandens sluoksnio buvimas dirvožemio paviršiuje, nusėdimo metu vyraujančių vėjų krypties ir vadinamųjų „karštųjų dėmių“ susidarymo galimybės krante. Vertikalūs ^{238}Pu/^{239,240}Pu aktyvumo rodiklių profiliai akivaizdžiai parodė, kad tirtose mėginių ėmimo vietose prie Juodžio, Paršelio ir Bedugnio ežerų plutonis yra globalinių iškritų kilmės. Radionuklidų vertikalieji profiliai tirtose dirvose parodė, kad jų pasiskirstymui būdingos viena ar kelios ryškios aktyvumo smailės. Antrinių smailių išsidėstymą pagal jų gylį dirvožemyje ir jų kiekį galima sieti su daugiau ar mažiau didesniu radionuklidų judrumu. Taigi, radionuklidai užmirkusioje dirvoje (pelkėtoje senojo kanalo vietoje) šalia Juodžio ežero turi didžiausią judrumą. Pagal vertikalius ^{137}Cs/^{239,240}Pu aktyvumo koncentracijos santykio rodiklius tirtose dirvožemio kolonėlėse Černobylio AE avarijos kilmės radioceziui būdingas padidėjęs migracijos gebėjimas užliejamame Juodžio ežero, Paršelio ežero ir sausame dirvožemyje prie Bedugnio ežero nepaisant to, kad šiuose dirvožemiuose yra molio priemaišų. Ir atvirkščiai, molio medžiagų buvimas užliejamoje dirvoje prie Bedugnio ežero žymiai apribojo radiocezio migracijos galimybes. Stipresnę cezio sorbciją prie molio mineralų lėmė dirvožemio porų vandenyje susidariusios sąstingio sąlygos.

Molio priemaišos užmirkusioje dirvoje neturėjo įtakos plutonio judrumui. Sausame dirvožemyje esančiame prie Bedugnio ežero plutonio judrumas yra šiek tiek sumažėjęs. Taigi galima daryti išvadą, kad sausame ir užliejamame dirvožemiuose pasireiškiantys veiksniai prie Bedugnio ežero atvirkščiai veikia plutonio ir radiocezio judrumą.

Toliau tęsiami sauso ir užliejamo dirvožemio tyrimai vertinant radionuklidų sąveikų skirtumus su tiriamųjų dirvožemių komponentais.

Reikšminiai žodžiai: Plutonis, radiocezis, užliejamas dirvožemis, dirvožemio organinės medžiagos

Literatūra

[1] J. E. Brown, P. A. McDonald, J. E. Parker Rae, J. Environ. Radioact. 43, 259- 275 (1999).

[2] P. Carbol, D. Solatie, N. Erdmann, T. Nyle´n, M. Betti,. J. Environ. Radioact. 68, 27–46 (2003).

[3] G. Jia, C. Testa, D. Desideri, F. Guerra, M. A. Meli, C. Roselli, M. E. Belli Health. Phys. 77(1), 52-61 (1999)

[4] E. Łokas, J. W. Mietelski, M. E. Ketterer, K. Kleszcz, P. Wachniew, S. Michalska, M. Miecznik,. Appl. Geochem. 28, 100–108 (2013).

[5] T. Matsunaga, S. Nagao, Humic Substances Research 5(6), 19-33 (2009).

Koncentracinio gesimo modeliavimas dvimatėse sistemose

Modeling of concentration quenching in two-dimensional systems

Sandra Barysaitė[1,2], Andrius Gelžinis[1,2], Jevgenij Chmeliov[1,2], Leonas Valkūnas[1,2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
sandra.barysaite@gmail.com

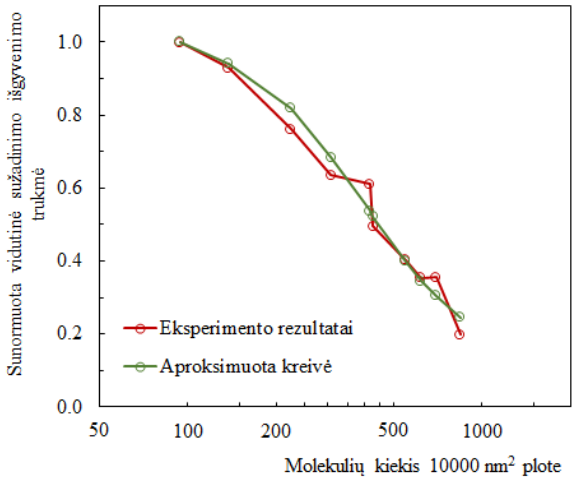
Koncentraciniu gesimu vadinamas reiškinys, kai fluorescencijos kvantinė išeiga mažėja didėjant molekulių koncentracijai tirpaluose. Pavyzdžiui, koncentracinį gesimą galima stebėti chlorofilų tirpaluose [1]. Šis reiškinys buvo tiriamas jau nuo praėjusio amžiaus vidurio, tačiau jo kilmė ir veikimas nėra iki galo aiškūs. Manoma, kad jis vyksta tuomet, kai plokščios molekulės agreguojasi lygiagrečiai viena virš kitos ir taip susidaro H tipo agregatai, kurių žemiausia sužadinta būsena yra tamsinė. Vis dėlto, toks paaiškinimas netinka dvimačių sistemų koncentracinio gesimo apibūdinimui, kadangi tokiu atveju visos molekulės yra vienoje plokštumoje. Verta paminėti, jog dirbtinėse sistemose fluorescencija dažniausiai yra žymiai labiau gesinama, palyginus su tokios pačios koncentracijos natūraliomis fotosintetinėmis sistemomis.

Šiame darbe koncentracinis gesimas dvimatėse sistemose buvo modeliuotas remiantis neseniai sukurtu modeliu, aprašančiu koncentracinį gesimą trimatėse sistemose [2]. Molekulės išdėstomos plokštumoje pasinaudojant tolygiuoju pasiskirstymu. Plokštumos plotas yra fiksuotas dydis, o molekulių kiekis jame laisvai keičiamas – taip gaunamos įvairios koncentracijos. Sužadinimo gesimo prie didesnių koncentracijų paaiškinimui buvo įvestos gaudyklės – molekulės, į kurias patekęs sužadinimas nebegali ištrūkti. Jos susiformuoja ten, kur molekulės yra arčiau viena kitos, nei tam tikras atstumas R_{trap}. Pradiniu laiko momentu sužadinimo aptikimo tikimybė buvo paskirstyta tolygiai visose molekulėse, kurios nėra gaudyklės. Bendros sužadinimo aptikimo sistemoje tikimybės laikinė priklausomybė buvo gauta sprendžiant kinetinių lygčių sistemą, kai pernašos spartos tarp molekulių gaunamos pagal Fiorsterio lygtį:

$$K_{ij} = \frac{1}{\tau}\frac{\kappa_{ij}^2}{\langle\kappa_{ij}^2\rangle_{or}}\left(\frac{R_F}{R_{ij}}\right)^6; \qquad (1)$$

čia parametras τ yra spinduliavimo laikas, κ_{ij} – orientacinis parametras, R_F – Fiorsterio radiusas, R_{ij} – atstumas tarp i-osios ir j-osios molekulių. Suintegravus bendrąją tikimybę, gaunama sužadinimo išgyvenimo trukmė. Skaičiavimai kartojami daug kartų ir imamas jų vidurkis.

Šis modelis buvo naudojamas teoriškai aprašant matavimų rezultatus dvimatėje sistemoje – chlorofilų viensluoksnyje [3]. Buvo sprendžiamas optimizavimo uždavinys – ieškomos optimalios laisvų parametrų R_{trap} ir R_F vertės, su kuriomis teorinių skaičiavimų rezultatai labiausiai sutampa su eksperimento duomenimis. Tai buvo atliekama ieškant mažiausio vidutinio kvadratinio nuokrypio tarp eksperimentinių ir teorinių verčių. Rezultatai pateikti 1 pav. ir bus pristatomi plačiau konferencijos metu.



1 pav. Vidutinės sužadinimo išgyvenimo trukmės priklausomybė nuo molekulių koncentracijos, kai parametrų vertės yra tokios: R_{trap} = 3.15 nm, R_F = 5.21 nm; teorinės kreivės palyginimas su eksperimentine kreive.

Reikšminiai žodžiai: koncentracinis gesimas, elektroninis sužadinimas, fluorescencijos kvantinė išeiga.

Literatūra

[1] G. Beddard, G. Porter, *Nature* **260**, 366-367 (1976).
[2] W.-J. Shi, J. Barber, Y. Zhao, *The Journal of Physical Chemistry B* **117** (15), 3976-3982 (2013).
[3] M. L. Agrawal, J.-P. Chauvet, L.K. Patterson, *The Journal of Physical Chemistry* **89** (14), 2979-2982 (1985).

Relaksacijos trukmių pasiskirstymu paremta pilnutinės varžos spektrų analizė

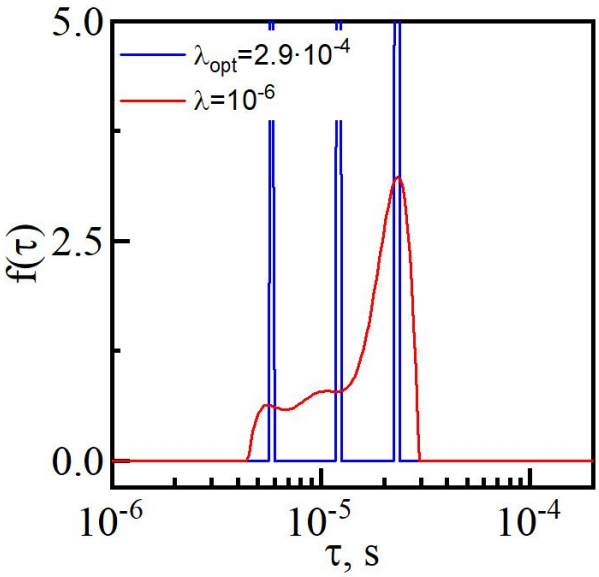
DRT based analysis of broadband impedance data

Edvardas Kazakevičius[1], Algimantas Kežionis[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
edvardas.kazakevičius@ff.vu.lt

Pranešime bus nagrinėjami pilnutinės varžos spektroskopijos (EIS) duomenų pateikimas relaksacijos trukmių pasiskirstymo (DRT) forma ir atitinkamos tikimybės tankio funkcijos (PDF) radimas.

DRT metodas yra pranašesnis už įprastinį ekvivalenčių grandinių metodą, nes gali geriau išskirti dalinai persiklojančius relaksacijos procesus. Paprastai plačiajuostės EIS matavimo paklaidos nėra aprašomos normaliuoju skirstiniu ir todėl negali būti modeliuojamos baltuoju Gauso triukšmu. Ši aplinkybė yra labai svarbi, nes DRT metodas yra labai jautrus matavimo paklaidoms. Parodyta, kad atsižvelgus į matavimo paklaidų kitimą visame dažnių diapazone galima pagerinti DRT funkcijos kokybę. DRT funkcijai apskaičiuoti buvo parašyta Python aplikacija ir metodas pritaikytas realiai išmatuotų kietųjų elektrolitų ir RC grandinių spektrų analizei (1 pav.) [1].

Atskiro relaksacijos proceso DRT funkcijos forma paprastai yra artima Gauso varpo kreivei logaritminėje laiko skalėje. Deja, tokio tipo PDF vargu ar kada nors patenkinamai aprašo laidžiosios joninės sistemos spektrines charakteristikas. Pranešime bus nagrinėjamos sudėtingesnės PDF funkcijos, turinčios daugiau nepriklausomų parametrų.



1 pav. DRT funkcijos: suskaičiuotos trejoms nuosekliai sujungtoms RC grandinėms, naudojant dvi skaičiavimo koeficiento λ vertes.

Reikšminiai žodžiai: pilnutinė varža, relaksacijos trukmė, pasiskirstymas, skirstinys, elektrolitas.

Literatūra

[1] A. Kežionis, E. Kazakevičius, Electrochimica Acta **349** 136379 (2020).

Metodo įvertinti nitroaromatinių junginių standartinį vienelektroninės redukcijos potencialą vandeninėje terpėje modifikacija

Modified approach for evaluation of standard single-electron reduction potential of nitroaromatic compounds in aqueous medium

Jelena Tamulienė[1], Narimantas Čėnas[2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al 3. LT-10257, Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas, Saulėtekio al. 7, LT-10257, Vilnius
Jelena.Tamuliene@tfai.vu.lt

Nitroaromatinių junginių ($ArNO_2$) citotoksinį/terapinį aktyvumą dažnai nulemia laisvųjų radikalų susidarymas fermentinės redukcijos metu ir po to vykstantis oksidacinis stresas. $ArNO_2$ aktyvumas (E^1_7) vandeninėje terpėje didėja, didėjant vienelektronės redukcijos potencialui ($ArNO_2/ArNO_2$-. redokso poros potencialas) ([1] ir nuorodos jame.). Dažniausiai $ArNO_2$ E^1_7 vertės nustatomos naudojant impulsinę radiolizę, kuriai atlikti reikalinga sudėtinga įranga. Kai kada ši komplikuota eksperimentinė analizė tampa dar sudėtingesne dėl nepakankamo tiriamų junginių tirpumo vandenyje arba šalutinių laisvųjų radikalų reakcijų. Todėl šiuo metu yra plačiai naudojami teoriniai metodai tam, kad numatyti vieno elektrono redukcijos potencialą. Vienas iš tokių metodų yra Borno-Haberio ciklas, kuriame, vertinant E^1_7, yra atsižvelgiama į numanomo (teoriškai sumodeliuoto) tirpiklio įtaką [2,3]. Tačiau šiuo metodu gauti teorinių tyrimų rezultatai nėra pakankamai tikslūs, jų rezultatai nesutampa su junginių vandeninėje terpėja eksperimentiniais matavimų rezultatais. Be to reikia atsižvelgti į tai, kad teoriniuose tyrimuose tirpiklio įtaka vertinama taikant poliarizuojamo kontinuumo modelį (*polarizable continuum model*), tad neatsižvelgiama į tai, kad dėl neigiamų jonų susidarymo vandeninėse terpėse gali susidaryti nestabilūs junginiai dėl dipolinės ar Van der Valso sąveikos.

Atsižvelgdami į aukščiau minėtų metodų taikomų E^1_7 vertinimui trūkumus, mes atlikome 12 mono- ir dinitrobenzenų teorinius tyrimus modifikuotu Born-Haber ciklo metodu. Teoriškai buvo tirtas ne nitroaromatinis junginys, o jo darinys su vandens molekule(-ėmis). Skaičiavimai atlikti B3LYP/cc-pVTZ tankio funkcionalo artinyje. Į vandens įtaką taip pat atsižvelgta, skaičiavimus atliekant PCM metodu. Tyrimams buvo naudojama Gaussian09 programa. Gautos teorinės vertės buvo lyginamos su eksperimentiškai matuotomis.

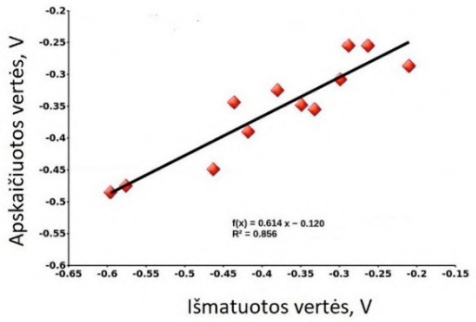
Mes nustatėme, kad:

apskaičiuotos E^1_7 vertės tikslumas priklauso nuo to, koks yra vandens molekulių skaičius junginyje, t.y. tik tinkamai parinkus vandens molekulių skaičių, teoriškai apskaičiuotos ir išmatuotos vertės sutampa;

stabiliausiuose nitroaromatinių junginių-vandens molekulių junginiuose, dažniausiai dvi vandens molekulės išsidėsto prie -NO_2 grupės;

vandens molekulių skaičiaus pasirinkimas priklauso nuo tiriamo junginio dipolinio momento projekcijų Dekarto koordinatėse verčių, kai jo orientacija yra parenkama taip, kad viena iš jo simetrijos ašių sutampa su x koordinate. Tad jei tik vienos dipolinio momento projekcijos į x, y ir z ašis vertė nėra lygi nuliui, tai nitroaromatinio junginio su vandens molekulėmis darinyje turi būti dvi vandens molekulės.

Apskaičiuotos ir išmatuotos E^1_7 vertės yra pateiktos 1 pav.



1 pav. Išmatuotos ir apskaičiuotos E^1_7 vertės,

Naudojant mūsų siūlomą nitroaromatinių junginių vandeninėse terpėse E^1_7 vertinimo būdą, galima 86% tikslumu prognozuoti ekspeimentinius rezultatus.

Reikšminiai žodžiai: standartinis potencialas, vandeninė terpė, nitroaromatiniai junginiai.

Literatūra

[1] Čėnas N, Nemeikaitė-Čėnienė A, Sergedienė E, Nivinskas H, Anusevičius Ž, Šarlauskas J,
Quantitative structure-activity relationships in enzymatic single-electron reduction of nitroaromatic explosives: implications for their cytotoxicity. Biochim. Biophys. Acta 1528 (2001), pp. 31-38.
[2] Roy LE, Jakubikova E, Batista ER, Accurate Calculation of Redox Potentials Using Density Functional Methods, Associate Directorate for Theory, Simulation, and Computation (ADTSC) LA-UR-09-01756, www.lanl.gov/orgs/adtsc/publications.php
[3] Sviatenko LM, Gorb L, Hill CF , Leszczynski J. Theoretical study of ionization and one - electron oxidation potentials of N - heterocyclic compounds, J. Comput. Chem. 34 (2013), pp. 1094–1100 https://doi.org/10.1002/jcc.23228

Tyrimai yra remiami Europos struktūrinių fondų lėšomis (Measure No. 09.33-LMT-K-712, projekto No. DOTSUT-34/09.3.3.-LMT-K712-01-0058/LSS-600000-58).

Grimus-Neufeld modelio naujienos

News from the Grimus-Neufeld model

Simonas Draukšas, Vytautas Dūdėnas, Thomas Gajdosik, Andrius Juodagalvis, Darius Jurčiukonis
Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
tgajdosik@yahoo.com

The Grimus-Neufeld model (GN) [1] combines both mechanisms of neutrino mass generation, the seesaw mechanism [2] and the radiative generation of masses [1], and extends the Standard Model (SM) of particle physics in a minimal way by adding only a single Majorana fermion and one Higgs doublet.

Though the GN was proposed 30 years ago, not much was published about the model, apart from the contributions of our group [3], with the renormalization of neutrino masses [4] and the inclusion [5] into the automated programs SPheno [6] or FlexibleSUSY [7] as the last published step. The first result of the doctoral research of Simonas Draukšas is a new scheme to define mass counterterms for fermions [8]. The latest findings of Vytautas Dūdėnas analyse the needed counterterms for the scalar sector of a model with spontaneously broken gauge symmetry and study their gauge dependence [9].

In the research of his postdoc project Vytautas Dūdėnas spotted an overlooked area in the parameter space of the GN model that inspires us to a new direction in the active research. With lowering the seesaw scale below the electro weak scale the model still seems to allow a phenomenologically observed neutrino sector, meaning that one can find model parameters that give the observed [10] neutrino mass differences and mixing angles. Vytautas research already shows hints, that the reproduction of the neutrino data does not really restrict the parameter space of the Higgs sector: nearly any general Two Higgs Doublet model can serve as the Higgs sector of the GN.

The Grimus-Lavoura approximation (GLA) [11] seems to work, although the assumption that the Majorana mass is much larger than the scalar masses of the theory is inverted. Simas Jankauskas will check this question as his task for the bachelor thesis. In principle GLA is an essential ingredient in the model, as when this approximation is applicable, the model cannot be reduced to the cases of either only seesaw or only radiative masses. Only in the mixed case the model offers a new viewpoint for the interpretation of the experimental data.

The new mass range for the heavy neutrino, which is in the language of neutrino physics a sterile neutrino, opens the question whether this neutrino can be a Dark Matter candidate and if it has any influence in early cosmology. Aurimas Vitkus works on this question for his Master thesis.

In the context of the stability of radiative corrections, which is embedded in the full renormalisation of the model, the low fermioninc scale gives hopes, that the fine tuning of the Higgs potential parameters can be avoided. Although fine tuning is mostly an argument about the aesthetics of the theory, it gives the feedback, that there should be probably a better, more efficient parametrisation of the model, if the values of the bare parameters look unnatural. This aspect connects again to Vytautas last publication [9]. Zooming out of the details, one can look at the general behaviour of the Grimus-Neufeld model and analyse it in the context of the renormalisation group. This is the task of Rokas Garbačauskas for his Master thesis.

Reikšminiai žodžiai: neutrinos, seesaw mechanism, radiative masses

Literatūra

[1] W. Grimus and H. Neufeld, Nucl. Phys. B **325** (1989) 18.
[2] J. Schechter and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D **22** (1980) 2227. doi:10.1103/PhysRevD.22.2227
[3] D. Jurciukonis, T. Gajdosik, A. Juodagalvis and T. Sabonis, PoS ICHEP **2012** (2013) 372 [arXiv:1212.5370]. D. Jurciukonis, T. Gajdosik, A. Juodagalvis and T. Sabonis, Acta Phys. Polon. Supp. **6** (2013) 675 [arXiv:1212.6912]. T. Gajdosik, A. Juodagalvis, D. Jurciukonis and T. Sabonis, Acta Phys. Polon. B **44** (2013) 11, 2347 [arXiv:1310.2476 [hep-ph]]. D. Jurciukonis, T. Gajdosik and A. Juodagalvis, arXiv:1410.4443 [hep-ph]. T. Gajdosik, D. Jurčiukonis and A. Juodagalvis, Nucl. Part. Phys. Proc. **260** (2015) 257. doi:10.1016/j.nuclphysbps.2015.02.053 D. Jurciukonis, T. Gajdosik and A. Juodagalvis, arXiv:1507.03459 [hep-ph]. T. Gajdosik, A. Juodagalvis, D. Jurčiukonis and T. Sabonis, Acta Phys. Polon. B **46** (2015) 11, 2323. doi:10.5506/APhysPolB.46.2323 V. Dūdėnas, T. Gajdosik, A. Juodagalvis and D. Jurčiukonis, Acta Phys. Polon. B **48** (2017) 2235. doi:10.5506/APhysPolB.48.2235 D. Jurčiukonis, T. Gajdosik and A. Juodagalvis, JHEP **11** (2019), 146 doi:10.1007/JHEP11(2019)146 [arXiv:1909.00752 [hep-ph]].
[4] V. Dūdėnas and T. Gajdosik, Acta Phys. Polon. B **48** (2017) 2243. doi:10.5506/APhysPolB.48.2243 Dmitrij Chomčik, Master of Science Thesis (2017). V. Dūdėnas and T. Gajdosik, Phys. Rev. D **98** (2018) no.3, 035034 doi:10.1103/PhysRevD.98.035034 [arXiv:1806.04675 [hep-ph]].
[5] Simonas Draukšas, VU Bachelor Thesis (2018). S. Draukšas, V. Dūdėnas, T. Gajdosik, A. Juodagalvis, P. Juodsnukis and D. Jurčiukonis, Symmetry **11** (2019) no.11, 1418 doi:10.3390/sym11111418
[6] W. Porod, Comput. Phys. Commun. **153** (2003) 275 doi:10.1016/S0010-4655(03)00222-4 [hep-ph/0301101]. W. Porod and F. Staub, Comput. Phys. Commun. **183** (2012) 2458 doi:10.1016/j.cpc.2012.05.021 [arXiv:1104.1573 [hep-ph]].
[7] P. Athron, J. h. Park, D. Stöckinger and A. Voigt, Comput. Phys. Commun. **190** (2015) 139 doi:10.1016/j.cpc.2014.12.020 [arXiv:1406.2319 [hep-ph]]. P. Athron, M. Bach, D. Harries, T. Kwasnitza, J. h. Park, D. Stöckinger, A. Voigt and J. Ziebell, Comput. Phys. Commun. **230** (2018) 145 doi:10.1016/j.cpc.2018.04.016 [arXiv:1710.03760 [hep-ph]].
[8] S. Draukšas, [arXiv:2107.09361 [hep-ph]].
[9] V. Dūdėnas and M. Löschner, Phys. Rev. D **103** (2021) no.7, 076010 doi:10.1103/PhysRevD.103.076010 [arXiv:2010.15076 [hep-ph]].
[10] P. F. de Salas, D. V. Forero, C. A. Ternes, M. Tortola and J. W. F. Valle, Phys. Lett. B **782** (2018) 633 doi:10.1016/j.physletb.2018.06.019 [arXiv:1708.01186 [hep-ph]].
[11] W. Grimus and L. Lavoura, Phys. Lett. B **546** (2002) 86 [hep-ph/0207229].

Kvadrupolinis operatorius ortogonalioje Bargmann-Moshinsky SU(3) grupės bazėje

Quadrupole operator in orthogonal Bargmann-Moshinsky basis of SU(3) group

Algirdas Deveikis[1], Alexander Gusev[2], Sergue Vinitsky[2]
[1]Vytauto Didžiojo universitetas, Informatikos fakultetas, Vileikos g. 8, LT-44404 Kaunas
[2]Joint Institute for Nuclear Research, St. Joliot - Curie 6, Dubna , MR, 141980, Russia
algirdas.deveikis@vdu.lt

Kvadrupolinis momentas yra viena svarbiausių atomo branduolio charakteristikų. Teoriniu požiūriu, kvadrupolinio momento operatorius gali būti traktuojamas kaip SU(3) grupės generatorius [1]. Didelio masto fizikinių dydžių tenzorinių operatorių skaičiavimams būtini efektyvūs nekanoninių SU(3) ⊃ SO(3) ⊃ SO(2) redukcijos bazių konstravimo algoritmai ir neredukuotinių operatorių matricų sudarymo metodai. Šiame darbe, kvadrupolinio momento operatoriaus matricos skaičiavimui naudojamas vienas efektyviausių Bargmann-Moshinsky (BM) bazės [2] ortonormavimo algoritmų [3]. Kvadrupolinio momento operatoriaus skaičiavimai realizuoti Wolfram Mathematica sistemoje ir gali būti atlikti kaip simboliškai, taip ir norimu skaitmeninu tikslumu.

Nekanoninė BM bazė atitinkanti pogrupių grandinę SU(3) ⊃ SO(3) ⊃ SO(2) yra klasifikuojama atitinkamų grupių kvantiniais skaičiais λ, μ, L ir M. Bendru atveju, vienareikšmiškam ekvivalentinių neredukuotinių SO(3) grupės atvaizdų L identifikavimui SU(3) neredukuotiniame atvaizdavime λ, μ yra įvedamas papildomas indeksas α. Efektyviam nekanoninių SU(3) bazių taikymui, šios bazės turi būti ortonormuojamos tokio tipo papildomo indekso atžvilgiu. BM bazės atveju, ortonormavimo procedūros sudarymui galima pasinaudoti išskirtinai efektyviu persiklojimo integralų skaičiavimo metodu [4].

Kvadrupolinio momento operatoriaus matricos skaičiavimui naudojamas pasiūlytas [5] metodas įgalinantis išreikšti nulinės kvadrupolinio momento operatoriaus komponentės poveikį neortonormuotiems BM vektoriams:

$$Q_0^{(2)} \left|{}^{(\lambda,\mu)_B}_{\alpha,L,L}\right\rangle = \sum_{\substack{k=0,1,2\\ s=0,\pm1}} a_s^{(k)} \left|{}^{(\lambda,\mu)_B}_{\alpha+s,L+k,L}\right\rangle, \qquad (1)$$

čia $a_s^{(k)}$ yra žinomi koeficientai. Šių koeficientų ir BM bazės ortonormavimo matricos pagalba galima sudaryti matricinius elementus $q_{ijk}^{(\lambda,\mu)}(L)$, kuriais galima išreikšti neredukuotinius kvadrupolinio operatoriaus matricinius elemetus:

$$\left\langle {}^{(\mu,\lambda)_B}_{j,L+k} \left\| Q^{(2)} \right\| {}^{(\mu,\lambda)_B}_{i,L} \right\rangle = \frac{(-1)^k\sqrt{2L+1}}{(L+kL20|LL)} q_{ijk}^{(\lambda,\mu)}(L), \qquad (2)$$

čia dešinės išraiškos pusės vardiklyje yra Clebsch-Gordan koeficientas. Kvadrupolinio momento operatoriaus matricos dimensija duotoms λ, μ vertėms gali būti apskaičiuota naudojant formulę:

$$D = \frac{1}{2}(\lambda+1)(\mu+1)(\lambda+\mu+2). \qquad (3)$$

Išvystytas metodas buvo tiriamas skaičiuojant kvadrupolinio momento operatoriaus matricas kompiuteriu PC Intel i7-36030QM, CPU 2.40 GHz, RAM 8 GB, 64-bit Windows 8. Iliustracijai, 1 lentelėje pateikiami vienos kvadrupolinio momento operatoriaus komponentės matricos simbolinių ir skaitmeninių skaičiavimų trukmės rezultatai esant, esant skirtingoms μ ir λ vertėms. Matome, kad simboliniai (tikslūs) skaičiavimai trunka ilgiau nei skaitmeniniai, vienok ir šiuo atveju pasiekiamos gana aukštos μ ir λ vertės.

1 lentelė. $Q_2^{(2)}$ matricos simbolinių ir skaitmeninių skaičiavimų trukmės *t*, esant skirtingoms μ ir λ vertėms.

(λ, μ)	*D*	*t* (simb.)	*t* (skait.)
(3, 2)	42	1,6 sek.	1,3 sek.
(7, 6)	420	1 min. 48 sek.	1 min. 24 sek.
(10, 9)	1155	14 min. 37 sek.	8 min. 48 sek.
(13,12)	2457	1 val. 2 min. 19 sek.	35 min.

Išvystytas kvadrupolinio momento operatoriaus matricų skaičiavimo metodas buvo tikrinamas apskaičiuojant gautų matricų pagalba žinomas kvadratinio SU(3) Kazimiro operatoriaus

$$C_2\big(SU(3)\big) = Q\cdot Q + 3L\cdot L \qquad (4)$$

tikrines vertes:

$$E_{\lambda\mu} = 4(\lambda^2+\mu^2+\lambda\mu+3\lambda+3\mu). \qquad (3)$$

Pateikiamas kvadrupolinio momento operatoriaus matricų skaičiavimo metodas gali būti taikomas sudarant Hamiltono matricas atomo branduolio modeliuose turinčiuose tetraedrinę ir oktaedrinę simetriją, kurių tyrimai aktyviai atliekami pastaruoju metu. Tai leistų apskaičiuoti nagrinėjamų kvantinių sistemų spektrines charakteristikas (ypatingai rezonansų aplinkoje) ir tirti jų analitines savybes apsprendžiamas dominuojančių branduolio simetrijų.

Reikšminiai žodžiai: kvadrupolinis operatorius, orto normuota nekanoninė bazė, SU(3) grupė.

Literatūra

[1] M. Moshinsky, Yu.F. Smirnov, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics* (Netherlands: HAP, 1996).
[2] V. Bargmann , M. Moshinsky , Nucl. Phys. **23**, 177 (1961).
[3] A. Deveikis, A. Gusev, V. Gerdt, S. Vinitsky, A. Gozdz, and A. Pedrak, Lect. Notes Computer Sci. **11077**, 131 (2018).
[4] S. Ališauskas, P. Raychev, and P. Raychev , J. Phys. G. **7**, 1213 (1981).
[5] G.N. Afanasjev, S.A. Avramov, and R. Roussev , Sov. J. Nucl. Phys. **16**, 53 (1973).

Ce^{3+} jono energijos spektro ir radiacinių šuolių teorinis tyrimas

Theoretical study of energy spectra and radiative transitions of Ce^{3+} ion

Pavel Rynkun[1], Gediminas Gaigalas[1], Laima Radžiūtė[1], Smaranika Banerjee[2], Masaomi Tanaka[2], and Daiji Kato[3,4]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Astronomical Institute, Tohoku University, Aoba, Sendai 980-8578, Japan
[3]National Institute for Fusion Science, 322-6 Oroshi-cho, Toki 509-5292, Japan
[4]Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University, Kasuga, Fukuoka 816-8580, Japan
pavel.rynkun@tfai.vu.lt

Observations of gravitational waves from the neutron star merger GW170817 and its electromagnetic counterpart (AT2017gfo) opened a new route to study the origin of heavy elements in the Universe.

Observed properties of AT2017gfo at ultraviolet, optical, and infrared wavelengths are found to be consistent with theoretically expected "kilonova", thermal emission powered by radioactive decays of newly synthesized *r*-process elements. This agreement indicates that *r*-process synthesis takes place in the neutron star merger.

The properties of kilonovae are mainly determined by the chemical compositions in the ejected material as well as its mass and velocity. In particular, lanthanide elements play important role in shaping the light curve and spectra of a kilonova, as these elements have high opacities. To have a better link between the emission properties of a kilonova and nucleosynthesis, it is important to establish accurate atomic opacities. As it is difficult to derive experimental data for the opacity.

In this work, *ab-initio* atomic calculations for triply ionized Ce (Ce^{3+}) were performed. GRASP2018 [1] package, based on the multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock and relativistic configuration interaction methods, as well as HULLAC [2] code based on a parametric potential method were used to compute energy spectra and transition data.

Energy spectrum is calculated for the 225 levels for the Ce^{3+} ion. Energy levels are compared with recommended values from the NIST Atomic Spectra Database (ASD) [3] and other available works. The comparison of computed (with GRASP2018 and HULLAC codes) energy levels and other theoretical studies [4,5] with the NIST data giving the difference (in cm^{-1}) $\Delta E = E_{NIST} - E_{calc}$ is presented in Table 1.

As we can see from the Table, computed energies of GRASP2018 agree well with recommended values from the NIST ASD. The rms deviations obtained for energy levels of the $[Kr]4d^{10}5s^25p^6nl$ configurations from the NIST data are 1270 cm^{-1}. The HULLAC energy levels in comparison with the NIST data are too high, and the rms deviations from the NIST data are 5780 cm^{-1}. When comparing the results of other theoretical investigations [4] and [5] with the NIST ASD, the rms deviations are 2160 cm^{-1} and 2240 cm^{-1}, respectively; those authors investigated only low-lying levels.

The NIST ASD specifies one energy value (225625 cm^{-1}) for the two unresolved levels of the $[Kr]4d^{10}5s^25p^65g$ configuration. When comparing this energy level with other works, the level with the lower energy was compared. In the case of GRASP2018 results, the lower energy belongs to the level with J=7/2, while in the case of HULLAC, the lower level has - J=9/2.

The accuracy of the wave functions and transition parameters is evaluated by analyzing the dependencies of the line strength S on the gauge parameter G. The computed transition data are compared with other theoretical computations, too. The evaluation of transition data in details would be presented during the conference.

Table 1. Comparison of energy levels from the present work and other theoretical studies with NIST ASD [3] (deviations in cm^{-1}).

Level	[3]	GRASP	HULLAC	[4]	[5]
$4f\ ^2F^o_{7/2}$	2253	200	172	39	66
$5d\ ^2D_{3/2}$	49737	2084	-361	2174	2202
$5d\ ^2D_{5/2}$	52226	2063	-300	2080	2260
$6s\ ^2S_{1/2}$	86602	571	-6651	2024	2596
$6p\ ^2P^o_{1/2}$	122585	776	-6661	2104	2571
$6p\ ^2P^o_{3/2}$	127292	896	-6278	2156	2591
$6d\ ^2D_{5/2}$	177198	962	-6250	2126	
$6d\ ^2D_{3/2}$	178913	3418	-4550	3121	
$7s\ ^2S_{1/2}$	183502	564	-5077	2326	
$5f\ ^2F^o_{5/2}$	184545	632	-8115		
$5f\ ^2F^o_{7/2}$	184746	579	-7885		
$7d\ ^2D_{3/2}$	221661	198	-6565		
$7d\ ^2D_{5/2}$	221838	-114	-6782		
$8s\ ^2S_{1/2}$	225128	-9	-5990		
$5g\ ^2G_{7/2,9/2}$	225625	159	-5724		

Keywords: energy spectra, transition data, opacity.

References

[1] C. Froese Fischer, G. Gaigalas, P. Jönsson, and J. Bieroń, Computer Physics Communications **237**, 184 (2019).
[2] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **71**, 169, (2001).
[3] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team. 2020, NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.8), [Online]. Available: https://physics.nist.gov/asd [2021, January 24]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
[4] I. M. Savukov, W. R. Johnson, U. I. Safronova, and M. S. Safronova, Phys. Rev. A **67**, 042504 (2003).
[5] M. S. Safronova, U. I. Safronova, and C. W. Clark, Phys. Rev. A **91**, 022504 (2015).

Post-kognityvinio mokymo metodo taikymas fizikos pamokose KSJMC

Application of post-cognitive teaching method in physics lessons in KSJMC

Saulius Jonas Martinaitis
Kauno suaugusiųjų ir jaunimo mokymo centras, Sandėliu g. 7, LT-45223, Kaunas
s.martinaitis@ksjmc.lt

Kauno suaugusiųjų ir jaunimo mokymo centre jau kelerius metus sėkmingai taikoma post-kognityvinio mokymo(si) metodika. Šia stilistika dėstomi visi mokomi dalykai. Teorija grindžiama tinkamu informacijos apdorojimu.

Daugelis moksleivių kiekvieną dieną skaito, nagrinėja įvairius tekstus, tačiau ne visada teisingai juos supranta. Ypač daug sunkumų iškyla suvokiant teksto pagrindinę mintį. Gyvenant šiuolaikinėje visuomenėje informacijos kiekiai itin dideli, todėl labai svarbu gebėti išsigryninti reikalingus duomenis ir mokėti juos įvertinti.

Post-kognityvinės mokymo(si) teorijos pagrindinis tikslas – lavinti įgūdžius, kurie reikalingi struktūruojant tekstą ir pateikiant argumentuotas išvadas. Siekiant, kad procesas būtų sklandus, reikalingi įgūdžiai ugdomi visų dalykų pamokose.

Post-kognityvinė metodika apima penkias pagrindines dalis:

1) medžiagos struktūravimas;
2) greiti išmokimo metodai;
3) žinių pasitikrinimas dirbant porose;
4) tikslaus ir aiškaus teksto rašymas (rašymo šablonai);
5) atlikto darbo kritinis įsivertinimas.

Post-kognityvinio mokymo(si) metodas tinka įvairaus amžiaus moksleiviams. Tai skatina moksleivius mąstytis kritiškai, analizuojant ir sisteminant įgytas žinias.

Pirmame etape pateikiami pavyzdžiai, kaip struktūruojama medžiaga. Moksleiviai supratę, kaip tai daroma, naudodamiesi pateiktais struktūravimo šablonais patys struktūruoja naują tekstą.

Antrame etape – moksleiviai rašo tekstą pagal šabloną, kuris taikomas greito išmokimo metode. Pavyzdžiui: „Sukurk istoriją. Pamatyk ją“, „Pupelės auginimas“ ir t. t. Remdamiesi parengtais šablonais moksleiviai mokosi analizuoti, sisteminti medžiagą, o taip pat lavinamas jų kūrybiškumas.

Didelis dėmesys skiriamas kritiniam mąstymui. Itin svarbu mokėti dirbti komandoje, gebėti analizuoti komandinį darbą, išreikšti savo nuomonę, teikti pasiūlymus. Tad trečiame etape moksleiviai susiskirsto poromis ir tokiu būdu dalinasi savo parengtais tekstais, užduoda vieni kitiems klausimus iš nagrinėjamos medžiagos, apmąsto atsakymus.

Sekančiame etape, naudodamiesi tikslaus rašymo šablonu, moksleiviai sukonkretina įsisavinamą medžiagą, išryškina pagrindinę mintį, pabaigoje apibendrina ir padaro išvadas.

Paskutiniame etape moksleiviai kritiškai įsivertina savo atliktą darbą, apmąsto, kas pavyko, ką galima padaryti geriau ir pan.

Post-kognityviniu mokymu siekiama lavinti suvokimą, atmintį, logiką (samprotavimą), kritinį mąstymą. Toks mokymasis sumažina stresą ruošiantis egzaminams, stiprina motyvaciją mokytis toliau. Svarbu ir tai, kad negaištamas laikas ilgiems aiškinimams ir pasakojimams. Moksleiviai gali kaupti savo pasiektus rezultatus (portfelį). Pasiekimų portfelis susideda iš įvairių skyrių, pavyzdžiui, bendrosios kompetencijos, papildomos kompetencijos, akademinės kompetencijos, lyderystės kompetencijos, kūrybos kompetencijos ir t. t. Suprantant, kad moksleiviai negali suvokti to, ko nežino, pirmiausiai dėmesys skiriame išmokimui, vėliau – supratimui.

Mokymuisi naudojami išmokimo metodai, kurie padeda lengvai įsiminti mokomąją medžiagą. Įsisavinus pradines žinias, likusią pamokos dalį galima skirti analitinio, kritinio ir kūrybinio mąstymo lavinimui, taikant kitus post-kognityvinio mokymo sistemos etapus.

Post-kognityvinio mokymo sistema pagerina mokymo(si) rezultatus, o pagerėjimas išlieka ilgą laiką. Sistema ypač efektyvi mokiniams, kurie turi žemesnius ir vidutinius pasiekimo rodiklius. Ir nors pradžioje mokytojams, norintiems kitaip organizuoti veiklą pamokoje, reikia ganėtinai daug laiko skirti medžiagos sustruktūravimui, išmokimo, kūrybos metodų įsisavinimui, tačiau vėliau, taikant post-kognityvinį mokymąsi, laiko ir pastangų išeikvojama mažiau. Parengtą struktūruotą medžiagą galima nuolat tobulinti. Moksleiviai sėkmingai prisitaiko prie šios sistemos, domisi, aktyviai dirba ir patiria sėkmę pamokoje.

Reikšminiai žodžiai: informacijos apdorojimas, teksto struktūravimas, rašymo šablonai, greito išmokimo metodai.

Literatūra

[1] T. Lagūnavičius, 35 išmokimo metodai – naujoji edukologija. 76 p. (Kaunas, Technologijos, 2013).
[2] Mokykla – „Supermarketas“ arba socialinio teisingumo mokykla, 74 p. (Kaunas, Technologijos, 2014).
[3] Post-kognityvinio mokymo sistema: kaip išmokyti mokinius mąstyti ir spręsti problemas, 30 p. (Kaunas, Technologijos, 2018).
[4] Neuroedukologinio mokymo sistema: kaip mokyti atsižvelgiant į centrinės nervų sistemos veiklą, 48 p. (Kaunas, Technologijos, 2018).

STEAM – metodas ugdyti ir tobulinti mokinių gebėjimus fizikos srityje

STEAM is a Method to Develop and Improve Pupils Abilities in Physics

Artūras Jukna[1], Aušra Kynienė[2], Lina Bagdžiūnaitė-Litvinaitienė[3,4], Ernesta Smalinskė[4], Romualda Lazauskaitė[5], Dalia Lėckaitė[6]

[1]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fundamentinių mokslų fakultetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[3]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Aplinkos inžinerijos fakultetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius
[4]Vilniaus Gedimino technikos universiteto inžinerijos licėjus, Antakalnio g. 120, LT-10200 Vilnius
[5]Vytauto Didžiojo universitetas, Švietimo akademija, T. Ševčenkos g. 31, LT-03111 Vilnius
[6]Nacionalinė švietimo agentūra, Bendrųjų reikalų departamentas, K. Kalinausko g. 7, 03107 Vilnius
arturas.jukna@vilniustech.lt

Lietuvos mokyklų mokiniai šiandien vis dar stokoja mokslinės informacijos analizavimo, jos interpretavimo ir vertinimo įgūdžių. Gamtos mokslų srityje mokinių lavinimo galimybės Lietuvos didmiesčių mokyklose ir mažesnių miestų/kaimų mokyklose ryškiai skiriasi. Mokyklose trūksta aukštos kvalifikacijos gamtos mokslų mokytojų ir pamokoms skirtų mokymo priemonių, užtikrinančių gamtamokslinį mokinių raštingumą. Integralaus dalyko „Gamtos pažinimas“ pirmosios pamokos vedamos jau nuo pradinių klasių. Vėlesnėse, 5-6 klasėse mokiniai studijuoja dalyką „Gamta ir žmogus“, o nuo 7-os klasės mokosi fizikos. 2019 m. Lietuvos švietimo aprūpinimo centras (ŠAC) prie Lietuvos švietimo, mokslo ir sporto ministerijos (ŠMSM), vykdydamas ES SF projektą „*Mokyklų aprūpinimas gamtos ir technologinių mokslų priemonėmis*“ (projekto kodas Nr. 09.1.3-CPVA-V-704-02-0001), gamtamokslinėmis mokymo priemonėmis aprūpino 672 pradinio ugdymo mokyklas ir 533 mokyklas, vykdančias pagrindinio ugdymo (I pakopos) programas (iš visų 1089 Lietuvos mokyklų). Nors šiandien bendrojo lavinimo mokyklose mokosi per 320 tūkst. mokinių, o aukštojo mokslo institucijose studijuoja per 111 tūkst. studentų, tačiau (Lietuvos statistiniais 2018 m. duomenimis [1]) tik 32,2 % dalis Lietuvos gyventojų turi aukšto lygio išsilavinimą, 51,8 % - vidutinio ir net 16 % žemo lygio (*t. y.* be pradinio išsilavinimo) išsilavinimą.

Fizikos dalyko žinias Lietuvos mokyklose padeda gilinti Vilniuje, Kaune ir Klaipėdoje kuriami metodiniai STEAM atviros prieigos centrai, o Alytuje, Marijampolėje, Panevėžyje, Šiauliuose, Tauragėje, Telšiuose ir Utenoje – 7 regioniniai STEAM atviros prieigos centrai (čia STEAM žymi Science, Technology, Engineering, Art ir Mathematics mokslų sritis). Juose numatyta vykdyti formaliojo mokinių ugdymo ir neformaliojo švietimo veiklas, tobulinti mokytojų kvalifikaciją, populiarinti STEAM veiklas gamtamokslinėse biologijos-chemijos, fizikos-inžinerijos, robotikos-IT srityse. Atvykusieji į regioninius centrus mokiniai, lydimi mokytojų, eksperimentiškai tirs gamtos reiškinius, susijusius su šviesos savybių inžinerija ir jos sąveikos su medžiaga prigimtimi. Kiekvienam darbui reikalingos priemonės, darbų dalykiniai bei metodiniai aprašai parengti 7-8, 9-10 ir 11-12 klasių mokiniams, mokytojams ir centro instruktoriams, kurie instruktuos mokinius ir/ar jų mokytojus eksperimentų technikos/įrangos, jų metodinės dalies ir gautų rezultatų pateikimo/apipavidalinimo klausimais. Eksperimentatoriaus įgūdžius fizikos srityje mokiniai formuos naudodami modernias eksperimentines priemones, tokias kaip spektrometras, registruojantis ir analizuojantis šviesos intensyvumą ir charakteristikas regimos šviesos bangų ilgių ruože, sklindančios iš poliarizuotos ir nepoliarizuotos šviesos šaltinių (darbas „*Vaivorykštė delne: šviesos spalvų sandaros analizė ir praktinis taikymas*“, „*Nespalvotų objektų spalvų prigimtis*“). Išradingumo ir kūrybiškumo savianalizę mokiniai atliks darbe „*Labirintu per veidrodžių karalystę*“, kuriame naudojant plokščiuosius veidrodžius, ant laboratorinio stalo fiksuotame plote konstruos ilgiausius šviesos labirintus, o darbe „*Pažvelk atidžiau į žvaigždėtą dangų*“ – spektrometru tirs žvaigždžių spektrus, aptikdami „raudonąjį“ ir mėlynąjį“ spektrų poslinkius ir susipažindami su tiriamų Žvaigždžių chemine sudėtimi. Ištyrę šviesos lūžio dėsnius skystyje, supiltame į tuščiavidurę prizmę (darbas „*Optinis liežuvis*“), mokiniai susipažins su ypač egzotiniu šviesos savybių pritaikymu praktikoje kurdami „optinį liežuvį“, kuriuo nustatomas gliukozės/fruktozės/sacharozės kiekis tirpaluose. Išmokę valdyti šilumos sklidimo kryptį, jie konstruos šilumai/šalčiui nepralaidžius namus (darbas „*Šiltas namas*“), pasitelkdami medžiagų šilumos laidumo ir šiluminio plėtimosi tyrimų įrangas bei šilumos sklidimo jomis teorinio modeliavimo programą. Centre pradėtus mokslinius tyrimus mokiniai tęs mokykloje, analizuodami gautus rezultatus ir preliminarias išvadas. Daugiau informacijos apie eksperimentines priemones ir tyrimų metodikas pateikta moksliniame stendiniame pranešime.

STEAM centrai sudarys galimybę mokiniams eksperimentuoti, glaudžiai integruojant tarpusavyje ne tik fizikos, bet ir kitų gamtos mokslų temas. STEAM veiklos - tai papildoma motyvacija mokytis gamtamokslinius dalykus ir siekti aukštesnių mokymosi rezultatų.

Reikšminiai žodžiai: STEAM, regioninis STEAM centras, fizikos dalyko mokymo priemonės, optika.

Literatūra

[1] https://osp.stat.gov.lt/lietuvos-statistikos-metrastis/lsm-2019/gyventojai-ir-socialine-statistika/svietimas.

Nuotolinio mokymo galimybių tyrimas fizikos pamokose

Exploring the possibilities of distance teaching in teaching physics

Edita Palaimienė[1], Vidita Urbonienė[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius
edita.palaimiene@ff.vu.lt

Dėl neseniai įvykusios ir vykstančios pasaulinės pandeminės krizės dauguma mokyklų buvo priverstos netikėtai pakeisti savo nusistovėjusį pamokų vedimo būdą. Nuotolinis mokymas atsirado visuose švietimo įstaigų lygmenyse, įskaitant pradines, vidurines ir aukštąsias mokyklas. Vis dėl to situacija yra tokia sudėtinga, kad mokyklos visų pirma teikia pirmenybę asmeniniam ugdymui dėl nepakankamai besimokančiojo mokymosi savarankiškumo ir dažnos vidinės motyvacijos stokos [1]. Be to, komunikacija ir grįžtamojo ryšio teikimas taip pat atrodo gana sudėtingas procesas [2]. Nuotolinio mokymo kursai paprastai planuojami iš anksto, jie yra specialiai skirti tikslinei grupei, juose naudojamos kruopščiai parinktos internetinio bendravimo taisyklės ir priemonės [3]. Tačiau COVID-19 pandemijos kartu su visų mokyklų uždarymu įvyko greitai ir nepaliko vietos mokytojams pasiruošti naujoms mokymo ir mokymosi sąlygoms.

Pagrindinis šio tyrimo tikslas yra parodyti pandeminės situacijos padarinius iš fizikos mokytojų perspektyvos vedant nuotolines fizikos pamokas. Didžiausias dėmesys yra skiriama nuotolinio mokymo priemonėms ir galimybėms, kuriomis mokytojai galėjo naudoti po uždarymo iš savo namų, naudodami tik ribotus techninius išteklius.

Tyrime apie nuotolinėse fizikos pamokas, kuriame dalyvaują tikslinė fizikos mokytojų grupė, buvo atliktas pirmą kartą. Pasirinkta tyrimo metodika – apklausa. Tyrimas buvo atliktas tarp visų Lietuvos Fizikos mokytojų vykdant anoniminę apklausą, kurioje dalyvavo 86 fizikos mokytojai (anketa išsiųsta buvo 317 respondentų), kurių buvo paprašyta atsakyti į klausimus apie nuotolinio mokymo technologijas ir priemones.

Buvo nustatytos nuotolinių fizikos pamokų problemos ir jų sprendimo galimybės, kurios įvardijamos, kad mokytojams tiesiog trūksta kalbinių žinių ir nemokamų prieigų prie programų. Taip pat, kad fizikos mokytojai norėtų pamokose naudoti inovatyvius metodus: virtualias laboratorijas, mobilias programėles, simuliacines aplinkas. Reikia nuodugniai apgalvoti fizikos mokytojo darbą nuotolinėse fizikos pamokose.

Išanalizavus nuotolinių fizikos pamokų aspektus atliekant mokytojų apklausą, paaiškėjo, kad Lietuvos mokytojai buvo nepasiruošę nuotoliniam mokymui. Didžiausia problema, kuria įžvelgiu, kad fizikos mokytojai nesidalina sukaupta informacija. Nėra jokios bendros informacinės sistemos, kad fizikos mokytojai galėtų pasidalinti demonstracijomis, taikomomis ir pasiteisinusiomis darbo metodikomis, patarti vieni kitiems.

Įvertintinus nuotolinių fizikos pamokų ypatumus ir darbo metodus, paaiškėjo, kad fizikos mokytojai, siekiant gerinti nuotolinių fizikos pamokų mokymo kokybę, įvardijo užduočių ir mokymo proceso diferencijavimą, autentiškų šaltinių panaudojimą ir savarankiško mokymosi organizavimui bei savarankiškumo mokymąsi skatinimą, todėl rekomenduojama šias priemones naudoti.

Reikšminiai žodžiai: COVID-19, fizikos mokytojai, anketa.

Literatūra

[1] Tough, A.. The adult's learning projects; a fresh approach to theory and practice in adult learning. Toronto: Ontario Institute for Studies in Education. P. 207, (1979).

[2] Cápay M.; Balogh Z.; Boledovičová M.; Mesárošová M. (2011) Interpretation of Questionnaire Survey Results in Comparison with Usage Analysis in E-Learning System for Healthcare. In: Cherifi H.; Zain J.M.; El-Qawasmeh E. (eds) Digital Information and Communication Technology and Its Applications. DICTAP. Communications in Computer and Information Science 167. Berlin: Springer. P. 504-516 (2011).

[3] Natalia L. Selivanova; Irina A. Tagunova.. Education in the Internet Age. SHS Web of Conferences 9, 01062, (2016).

Struktūrinių fazinių virsmų hibridiniuose perovskituose ir giminingose medžiagose EPR tyrimai

EPR of structural phase transitions in hybrid perovskites and related materials

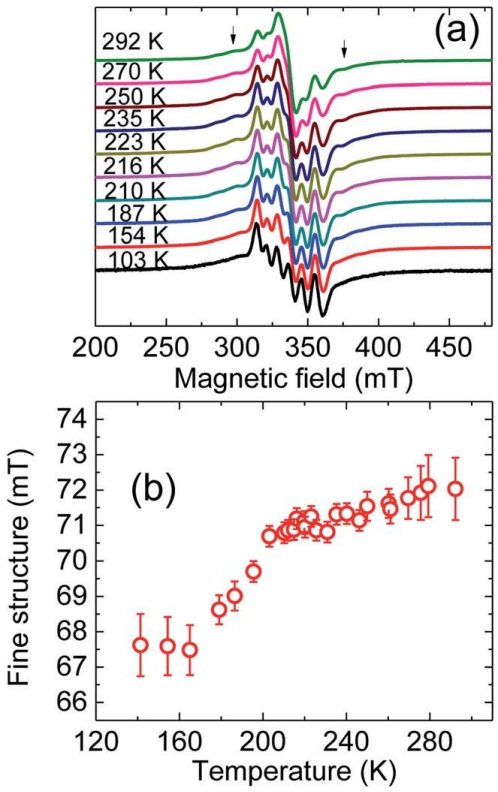
Gediminas Usevičius[1], Vidmantas Kalendra[1], Miroslaw Mączka[2], Jūras Banys[1], Dominik Kubicki[3], Mantas Šimėnas[1]
[1]Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania
[2]Polish Academy of Sciences, Institute of Low Temperature and Structure Research, PL-50-950 Wroclaw 2, Poland
[3]Institute of Chemical Sciences and Engineering, School of Basic Sciences, Ecole Polytechnique F´ed´erale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland
gediminas.usevicius@ff.vu.lt

Hibridinės ir panašios struktūros perovskitinės medžiagos yra sulaukusios didelės mokslo bendruomenės susidomėjimo dėl įdomių fizikinių ir cheminių savybių ir galimo jų pritaikymo dujų absorbcijai, efektyvių saulės elementų gamybai, multiferoinės atminties elementams.

Perovskitinės medžiagos turi molekulinę formulę AMX_3, kur A yra katijonas, M - metalo centras, o X - organinės arba neorganinės kilmės jungiamoji molekulė/jonas. Dauguma šių medžiagų pasižymi struktūriniais faziniais virsmais, kurių metu pastebimas įvairių fizikinių parametrų pokyčiai ir medžiagos karkaso deformacija [1,2].

Vienas iš metodu efektyviai charakterizuoti struktūrinius fazinius virsmus yra pastoviosios veikos elektronų paramagnetinio rezonanso (CW EPR) spektroskopija. CW EPR spektroskopija yra tiriama lokali paramagnetinio centro aplinka, o tai leidžia užfiksuoti mikroskopinių fizikinių parametrų pokyčius (pvz. gardelės deformaciją) bei tvarkos parametro kitimą fazinių virsmų metu. Dauguma hibridinių ir bei kitų perovskitinę struktūrą turinčių medžiagų neturi paramagnetinių centrų, todėl, norint jas tirti EPR metodu, reikalinga tiriamasias medžiagas šiais centrais praturtinti.

Šiame darbe yra pristatomas būdas detektuoti ir tirti struktūrinius fazinius virsmus perovskitinėse medžiagose - $CsPbBr_3$, $[(CH_3)_2NH_2]_2KCr(CN)_6$, $[(C_3H_7)_4N][Cd(N(CN)_2)_3]$, naudojantis CW EPR spektroskopija. $CsPbBr_3$:Mn CW EPR spektro priklausomybės nuo temperatūros analizė parodo anomalų smulkiosios sandaros pokytį (1b pav.) esant ~200 K, indikuojančia lokalius struktūrinius pokyčius paramagnetinio centro aplinkoje.



1 pav. (a) $CsPbBr_3$:Mn CW EPR spektro priklausomybė nuo temperatūros. Rodyklės žymi smulkiosios sandaros linijas, kuriomis buvo įvertinta smulkiosios sandaros priklausomybė nuo temperatūros (b) [1].

Reikšminiai žodžiai: EPR, faziniai virsmai, hibridinės medžiagos.

Literatūra

[1] Š. Svirskas, S. Balčiūnas, M. Šimėnas, G. Usevičius, M. Kinka, M. Velička, D. Kubicki, M.E. Castillo, A. Karabanov, V.V. Shvartsman and M. de Rosário Soares, Jour. Mat. Chem. A, **8**(28): 14015-14022, (2020).
[2] M. Maczka, M. Ptak, A. Gagor, A. Sieradzki, P. Peksa, G. Usevicius, M. Šimenas, F. F. Leite and W. Paraguassu. Jour. Mat. Chem. C, **7** (8): 2408–2420, (2019).

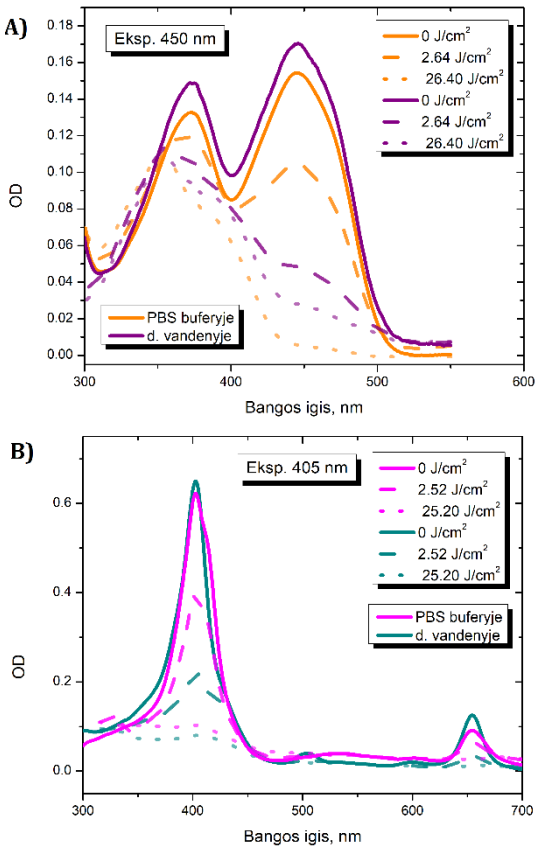
FOTOAKTYVIŲ JUNGINIŲ RIBOFLAVINO IR CHLOROFILINO FOTOSTABILUMO TYRIMAI

PHOTOSTABILITY STUDIES OF THE PHOTOSTACTIVE COMPOUNDS RIBOFLAVIN AND CHLOROPHILINE

Rugilė Bareikaitė[1], Irina Buchovec[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
rugile.bareikaite@ff.stud.vu.lt

Mikrobų atsparumas antibiotikams darosi vis didesnė pasaulinio masto problema. Antimikrobinė fotodinaminė terapija (aFTD) tai šiuolaikiška biofotoninė technologija, kuri gali būti perspektyvi alternatyva antibiotikamsos kovojant su antibiotikams atspariais mikrobais. Jos esmę sudaro fotoaktyvaus junginio (fotosensibilizatoriaus (FS)) ir šviesos sąveika, kurios dėka deguonies turinčioje aplinkoje sukeliamos fotooksidacinės reakcijos. Šių reakcijų metu susidaro reaktyvios deguonies formos, kurios sužaloja bakterijų ląsteles ir jos miršta [1]. Kad aFTD butu efektyvi, reikia pasirinkti atitinkamus FS [2]. Šitas darbas yra koncentruotas į natūralios kilmės vandenyje tirpius fotoaktivius junginius: riboflaviną (RIB) ir natrio chlorofilina (Na-Chl). Šviesai jautrus RIB, dar žinomas, kaip vitaminas B_2, yra neutralų krūvį turintis junginys,kuris yrarandamas maisto produktuose ir dažnai naudojamas, kaip maistinis dažiklis E 101. Apšviestas RIB gali sukelti stiprų citotoksiškumą ir selektyviai pažeisti bakterijas. Na-Chl yra žinomas kaip šviesai jautrus, neigiamai įkrautas maisto dažiklis (E 140(ii)), kuris yra pusiau sintetinis porfirinas, išskirtas iš chlorofilo šarminės hidrolizės būdu. Šis FS po apšvietos taip pat išskiria reaktyvias deguonies rūšis, turinčias antimikrobinį poveikį.

Vertinant FS savybes yra labai svarbu atkreipti dėmesį į jo fotostabilumą. Apšvietimo metu įvyko RIF ir Na-Chl suyrimas, t.y sumažėjo jų sugeriamos šviesos kiekis. Abiejų FS absorbcijos spektrų pokyčiai priklausė nuo taikomos apšvietos dozės, švitinant RIF ir Na-Chl optimaliai sužadinančiais bangos ilgiais (atitinkamai 450 nm ir 405 nm) ir naudojamo tirpiklio. (Pav.1). Eksperimentų metu buvo atlikti matavimai RIB ir Na-Chl ištirpdžius distiliuotame vandenyje (pH 6,5) ir 0,01 mol/L Fosfatino buferio druskos tirpale (PBS) (pH 7,4). Pirmiausiai buvo atlikta RIB ir Na-Chl sugerties spektrų analizė, tirpalus 14 dienų laikant tamsoje,+6ºC temperatūroje. Buvo nustatyta, kad ir RIB, ir Na-Chl išlieka stabilūs ir tinkami aFDT eksperimentams. Tai pat iš gautų rezultatų buvo pastebėta, kad abu FS yra fotostabilesni 0,01 PBS buferyje.1 A pav. matyti, kad distiliuotame vandenyje tirpinto RIB absorbcijos spektro maksimumas po 2.64 J/cm^2 apšvietos 450 nm šviesa buvo 0,05 OD, o ištirpinto PBS buferyje - 0,10 OD. 1B) pav. yra pavaizduotas Na-Chl absorbcijos spektras po apšvitinimo 405 nm šviesa. Iš gautų duomenų, galima daryti išvadą, kad Na-Chl kaip ir RIF yra stabilesnis PBS buferyje negu distiliuotame vandenyje: po 2.52 J/cm^2 apšvietos maksimumai atitinkamai buvo 0,4 OD ir 0,2 OD. Taip pat buvo išanalizuotas abiejų FS stabilumas mišinyje, kur RIF koncentracija buvo $1{,}5\times10^{-5}$mol/L, o Na-Chl $1{,}5\times10^{-5}$mol/L Mišinį laikant +6ºC temperatūroje, tamsoje., buvo pastebėta, kad jis išlieka stabilus ne mažiau 14 dienų. Apibendrinant, RIB ir Na-Chl yra perspektyvūs natūralios kilmės FS, kurie gali būti plačiai taikomi aFDT.



1 pav. $1{,}1\times10^{-5}$mol/L RIB (A) ir $1{,}1\times10^{-5}$mol/L Na-Chl (B) fotostabilumo spektrai po apšvitinimo su 450nm ir 405nm šviesa (350 W/m^2).

Reikšminiai žodžiai: Antimikrobinė fotodinaminė terapija, fotosensibilizatoriai, apšvieta.

Literatūra

[1] CALIN, M. A., & Parasca, S. V. (2008). Light sources for photodynamic inactivation of bacteria. Lasers in Medical Science, 24(3), 453–460. doi:10.1007/s10103-008-0588-5
[2] Buchovec, I et al., (2020). Antimicrobial Photoinactivation Approach Based on Natural Agents for Control of Bacteria Biofilms in Spacecraft. International journal of molecular sciences, 21(18).

Skulptūrinių plonų sluoksnių pagrindu suformuoti silicio oksido veidrodžiai didelės galios lazeriams

Sculptured thin film based all-silica mirrors for high power lasers

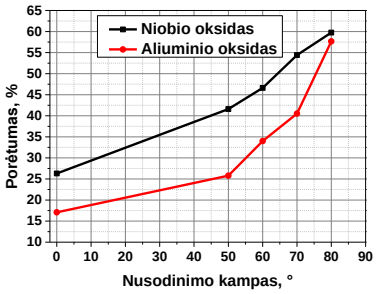
Lukas Ramalis[1], Ugnė Norkutė[1], Rytis Buzelis[1] ir Tomas Tolenis[1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
[2]ELI Beamlines, Čekijos mokslų akademijos fizikos institutas, Za Radnicí 835, Dolní Břežany, Čekija
lukas.ramalis@ftmc.lt

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

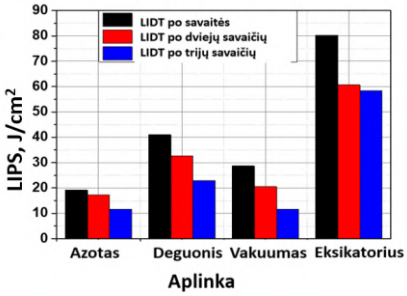
Optiniai dangai sąveikaujant su didelės energijos nanosekundiniais lazeriniais impulsais, medžiagoje susidaro įtempiai dėl terminio plėtimosi, kas gali tapti pažeidimo priežastimi. Taigi šiame darbe yra tiriami porėti nanostruktūrizuoti sluoksniai, kurie pasižymi mažomis vidinių įtempių vertėmis. Kita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

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

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



1 pav. Porėtumo priklausomybė nuo garinimo kampo skirtingoms medžiagoms



2 pav. Lazerio indukuotos pažaidos slenksčio matavimų rezultatai skirtingose aplinkose

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

Reikšminiai žodžiai: skulptūrinės dangos, Brego veidrodis, garinimo kampu technologija, lazerio-indukuotas pažaidos slenkstis.

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

Literatūra

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

Didelės galios mikrobangų impulsų rezistorinio jutiklio matavimo sąsaja

Measuring interface for high microwave pulse power resistive sensor

Justina Žemgulytė[1], Paulius Ragulis[1], Rimantas Simniškis[1], Žilvinas Kancleris[1]

[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
justina.zemgulyte@ftmc.lt

Tobulėjant šiuolaikiniams elektronikos komponentams ir vystantis mikrobangų šaltinių technologijoms yra svarbu tiksliai ir preciziškai išmatuoti didelės galios mikrobangų galingumą. Vis daugiau sertifikuotų matavimų yra atliekama beaidėse kamerose, kurios imituoja elektromagnetinių bangų sklidimą atviroje erdvėje.

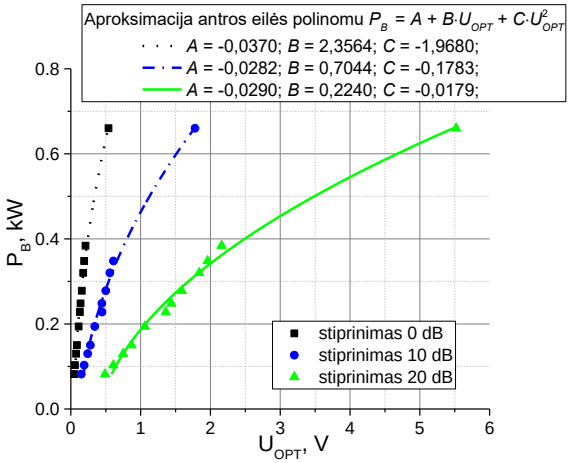
Vienas iš būdų leidžiančių išmatuoti didelės galios mikrobangų impulsus yra rezistorinis jutiklis, kurio veikimas remiasi karštųjų elektronų efektu [1]. Pagrindinis rezistorinio jutiklio elementas yra puslaidininkinis kristalas, kuris keičia savo varžą priklausomai nuo jį veikiančios mikrobangų galios. Per elementą teka nuolatinė srovė, todėl varžai keičiantis gauname įtampos lygio kitimą jutiklio išėjime. Jei jutiklio signalas yra perduodamas metaliniu laidu, jutiklio taikymas matavimams atviroje erdvėje yra ribotas dėl galimai atsirasiančių elektromagnetinės bangos atspindžių mažinančių matavimo tikslumą. Todėl vietoje metalinės koaksialinės linijos duomenims perduoti mes panaudojome dialektrinį optinį kabelį.

Optinis siųstuvas sustiprina rezistorinio jutiklio generuojamą įtampą ir paverčia ją į srovę, kuria maitinamas šviesos elementas sujungtas su optine skaidula. Įėjimo signalo stiprinimas reikalingas tam atvejui, kai matuojamų mikrobangų galia labai maža ir jutiklio išėjime yra mažas įtampos lygis. Tikslesniam stiprinimo parametrų parinkimui buvo panaudotas skaitmeninis potenciometras. Parašytas kodas Arduino UNO mikrovaldikliui, kuris gali didinti arba mažinti potenciometro varžą per nurodytą žingsnių skaičių (žingsnio dydis ~75 Ω). Įtampos į srovę keitimas pasiektas naudojant Howlando tiltelį. Eksperimentiškai buvo išmatuota tiltelio išėjimo srovės priklausomybė nuo įėjimo įtampos. Ji pasirodė tiesiška ir tai leido panaudoti šį tiltelį informacijos perdavimui.

Šviesos srautas siunčiamas optine skaidula į optinį imtuvą Thorlabs PDA55, kur jis paverčiamas atgal į srovės signalą ir yra sustiprinamas. Sustiprintas signalas matuojamas PicoScope 6403B oscilografu, kuriam papildomai sukurta vartotojo sąsaja, skirta išmatuotai įtampai perskaičiuoti į mikrobangų galią.

Sukurta optinė duomenų perdavimo ir matavimo sistema buvo eksperimentiškai išbandyta matuojant mikrobangas nuo 0,1 iki 0,6 kW, kai impulso pasikartojimo dažnis – 12,5 Hz, o impulso trukmė – 6 μs. Nustatyta, kad sukurta sistema veikia optimaliai, kol matuojamų didelės galios mikrobangų impulsų galingumas neviršija 0,5 kW.

Eksperimente išmatuotos rezistorinio jutiklio įtampos buvo perskaičiuotos į galią (pagal rezistorinio jutiklio jautrio koeficientą) ir nubraižyta optinio imtuvo išėjimo įtampos priklausomybė nuo mikrobangų impulsų galios (Žr. 1 pav. taškai). Turint matavimo taškus jų vertės buvo aproksimuotos antros eilės polinomu naudojant mažiausių kvadratų metodą. Aproksimavimo metu nustatytos koeficientų A, B ir C reikšmės, esant skirtingam išėjimo signalo stiprinimui yra pateiktos 1 pav.



1 pav. Antros eilės polinomu aproksimuotos optinio imtuvo išėjimo įtampos priklausomybė nuo elektromagnetinių bangų galios bangolaidyje, esant skirtingam išėjimo signalo stiprinimui

Labiau praplėtus galimą perduodamo signalo diapazoną, sukurta optinė duomenų perdavimo sistema gali padėti sumažinti paklaidas, atsirandančias dėl elektromagnetines bangas atspindinčių koaksialinių kabelių atliekant didelės galios mikrobangų matavimus beaidėje kameroje.

Reikšminiai žodžiai: Rezistorinis jutiklis, mikrobangų impulsų galia, Howlando tiltelis, optinė duomenų perdavimo sistema, beaidė kamera.

Literatūra

[1] M. Dagys, Ž. Kancleris, R. Simniškis, E. Schamiloglu, and F. J. Agee, "The resistive sensor: A device for high-power microwave pulsed measurements," *IEEE Antennas Propag. Mag.*, vol. 43, no. 5, pp. 64–79, 2001, doi: 10.1109/74.979368.

[2] "The FOA Reference For Fiber Optics - Fiber Optic Data Links -." https://www.thefoa.org/tech/ref/appln/datalink.html (accessed May 05, 2021).

Chlorella vulgaris dumblių apšvita plazma

Treatment of *Chlorella vulgaris* by plasma

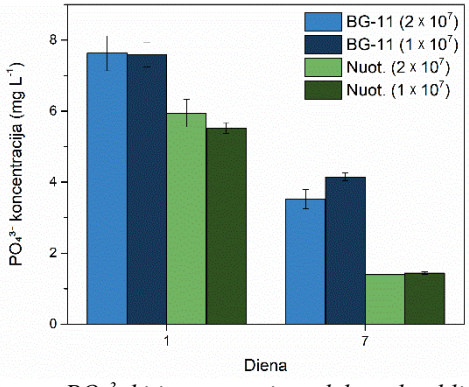
Kamilė Jonynaitė[1], Arūnas Stirkė[1], Liutauras Marcinauskas[2,3], Mindaugas Aikas[2], Andrius Tamošiūnas[2], AiringasŠuopys[2], Rolandas Uscila[2]

[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[2] Lietuvos energetikos institutas, Breslaujos g. 3, 44403 Kaunas
[3]Kauno technologijos universitetas, Studentų g. 50, 51368 Kaunas
kamile.jonynaite@ftmc.lt

Mikrodumbliai – dideliu produktyvumu ir sintetinamų junginių gausa pasižymintis mikroorganizmas. Būtent todėl mikrodumblių svarba biotechnologijų, maisto, farmacijos ir energetikos pramonės sektoriuose itin išaugo. Siekiant patenkinti mikrodumblių ir jų sintetinamų junginių poreikį bei prieinamumą, ieškoma efektyvių kultivavimo ir ekstrakcijos metodų. Vienas iš ekonomiškai atsiperkamų būdu, dumblių kultivavimas nuotekose. Taikant šią strategiją, be papildomų maistinių medžiagų, yra užauginama itin koncentruota dumblių biomasė. Be viso to, mikrodumbliai vykdo nuotekų bioremediaciją. Taigi, proceso išeiga yra vertingų junginių biomasė bei dalinai/visiškai nukenksmintos nuotekos.

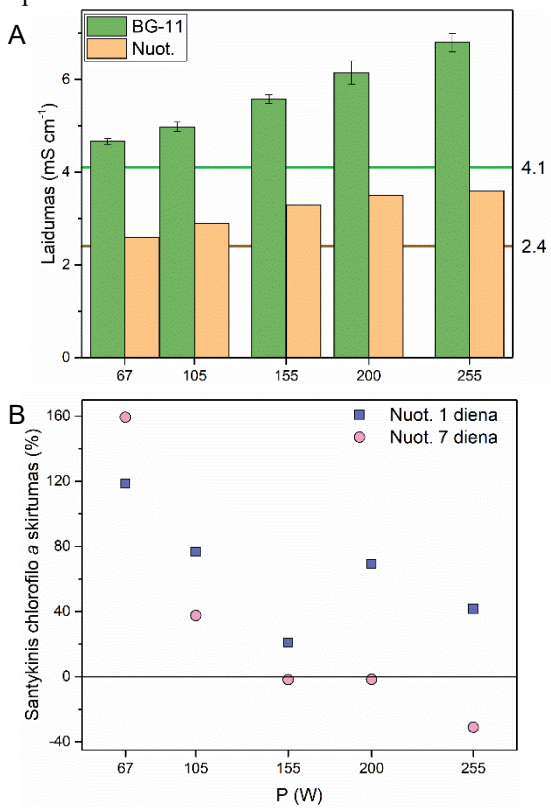
Šiuo metu liko neišspręstas efektyvios, mikrodumblių sintetinamų junginių, ekstrakcijos klausimas. Taikant įprastus ekstrakcijos metodus atsiranda įvairių trūkumų ir apribojimų susijusių su kiekybinėmis ir kokybinės išskiriamų junginių savybėmis. Vienas iš naujai taikomų sprendimo būdų – dumblių apdorojimas plazmos apšvita. Taigi, šio darbo tikslas yra įvertinti plazmos apšvitos parametrų įtaką mikrodumblių *Chlorella vulgaris* gyvybingumui Tuo pačiu įvertinti dumblių vykdomos bioremediacijos efektyvumą.

Tyrimo metu, *C. vulgaris* buvo kultivuojami BG-11 terpėje bei akvakultūros nuotekose. Kultivavimo proceso metu užfiksuoti terpės optinio tankio, laidumo, pH ir kitų cheminių elementų (PO_4, SO_2) kitimai.



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

Vėliau, užauginta ir sukoncentruota dumblių biomasė (10 mg/ml) buvo veikiama plazma. Dumblių biomasės apšvita atlikta atmosferos slėgyje, naudojant slystančio lanko išlydžio plazmą. Plazmai formuoti naudotas suspaustas oras (~22.8 l/min), maitinimo šaltinio galia buvo keičiama 35-265 W intervale, impulsų dažnis buvo 270 kHz, o apšvitos trukmė – 300 s. Chlorofilo *a* koncentracija buvo matuojama kaip mikrodumblių gyvybingumo indikatorius. Pigmento ekstrakcija atlikta iš karto po dumblių apšvitos plazma ir praėjus 7 dienoms, po pakartotinio kultivavimo.



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

Gauti rezultatai parodė, jog *C. vulgaris* gali sėkmingai būti kultivuojamas akvakultūros nuotekose bei vykdyti jų bioremediaciją. Tuo tarpu plazma paveiktų dumblių gyvybingumas kinta priklausomai nuo naudojamos išlydžio galios. Vertinant tyrimų rezultatus, nustatyta jog esant ~255 W galiai, plazma paveiktų dumblių gyvybingumas sumažėjo. Apie plazmos sukeltus dumblių ląstelių pažeidimus, indukuoja ir ryškus laidumo padidėjimas, galimai nulemtas viduląstelinių junginių ištekėjimo į terpę. Tačiau, esant išlydžio galiai iki 200 W, apšvita oro plazma ne tik kad neturi neigiamo poveikio, bet ir gali skatinti dumblių augimą.

Reikšminiai žodžiai: mikrodumbliai, plazma.

fs lazeriu indukuotų struktūrinių pokyčių stikluose tyrimas Ramano spektroskopija

Raman spektroscopy analysis of fs laser induced structural changes in glasses

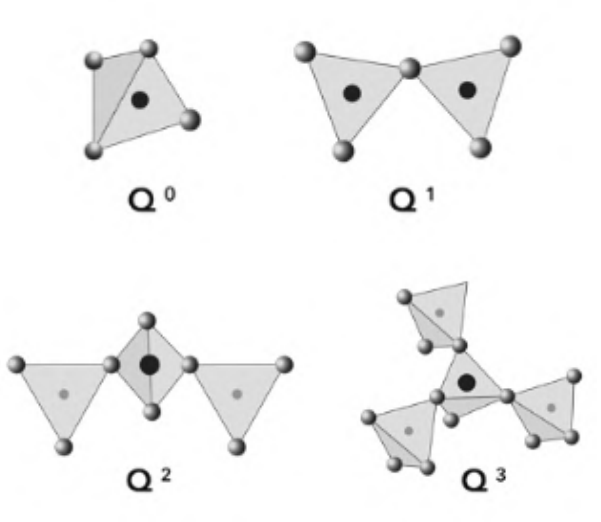
Laura Tauraitė[1], Kasparas Dryžas[1], Antanas Urbas[1,2], Sergejus Orlovas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]UAB Altechna R&D, Mokslininkų g. 6A, LT-08412 Vilnius
laura.tauraite@ff.stud.vu.lt

Selektyvus ėsdinimas yra svarbus procesas elektronikos, optikos ir medicinos prietaisų komponentų gamyboje. Deja, cheminio ėsdinimo procesas yra laiko reikalaujantis procesas, o tai mažina gamybos našumą.

Yra žinoma, kad paveikus natrio-kalcio silikatinį stiklą vainikiniu išlydžiu, pažeistose vietose ėsdinimo sparta kalio šarme (KOH) padidėja apie 1,6 karto [1]. Taip pat pastebėta, jog fs lazeriu paveikus šį stiklą, ėsdinimas KOH padidėja net iki 100 kartų [2].

Šio darbo tikslas yra nustatyti ir palyginti kokie struktūriniai pokyčiai atsiranda natrio-kalcio silikatinio ir aliumosilikatinio stiklo struktūroje ir šių pokyčių įtaką cheminiam ėsdinimui.

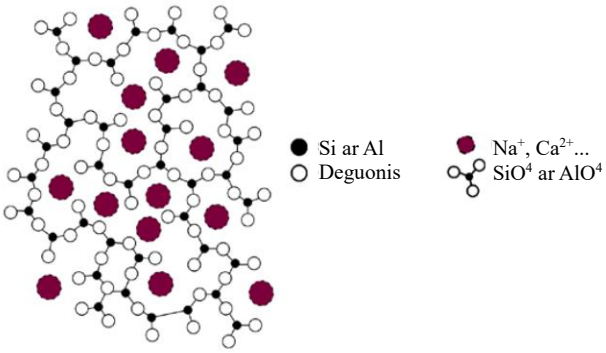
Natrio-kalcio silikatinis stiklas yra sudarytas iš silicio dioksido (SiO_2), natrio karbonato (Na_2CO_3) bei kalcio oksido (CaO) junginių. Struktūrinis tinklas šiame stikle yra sudarytas iš tetraedro formos silicio ir deguonies, vadinamųjų Q grupės, junginių, kurie kartu jungiasi per tiltelinius deguonis (angl. *Bridging oxygen (BO)*) (1 pav.). Priemaišiniai šarminiai metalai arba šarminiai žemės metalai, šiuo atveju Na ir Ca, modifikuoja stiklo struktūrinį tinklą nutraukdami BO jungtis, keisdami stiklo fizines ir chemines savybes.



1 pav. Q grupės junginių vizualizacija

Silikatiniame stikle esant aliuminio priemaišų, priklausomai nuo jų koncentracijos galimi du skirtingi procesai. Esant mažesnei aliuminio priemaišų nei šarminių metalų koncentracijai, aliuminis atlieka gardelės formuotojo funkciją ir keičia silicį gardelėje. Aliuminio tetraedrų $[AlO_4]^-$ krūvis kompensuojamas šarminio metalo. Šarminio metalo perteklius naudojamas netiltelinio deguonies jungčių (NBO) kūrimui. Esant aliuminio koncentracijai didesnei nei šarminio metalo, aliuminio tetraedro krūviai nebėra kompensuojami, todėl jis pakeičia gardelės struktūrą į oktaedro formą ir gardelę modifikuoja kaip ir šarminiai arba šarminiai žemės metalai.

Šiame darbe yra naudojamas „Gorilla3“ aliumosilikatinis stiklas, sudarytas iš natrio oksido (Na_2O), magnio oksido (MgO), aliuminio oksido (Al_2O_3), silicio dioksido (SiO_2) ir kalcio oksido (CaO). Šiame stikle aliuminis veikia kaip gardelės formuotojas ir sudaro tetraedro formos struktūras (2 pav.).



2 pav. Aliumosilikatinio stiklo struktūros vizualizacija

Tyrimo metu stiklo mėginiai yra paveikiami 1030 nm lazeriu. Pažeisti mėginiai analizuojami Ramano spektroskopijos metodu. Šis metodas pasirinktas, nes Ramano sklaidos poslinkių vertės Q grupių junginiams yra gerai žinomos ir nepriklauso nuo šarminių metalų junginių koncentracijos [3].

Ramano spektroskopija šiame tyrime yra atliekama 532 nm žadinamuoju pluoštu. Analizuojant gautus spektrus galima nustatyti stiklo struktūrų santykio pakitimus.

Reikšminiai žodžiai: Ramano spektroskopija, lazerio-stiklo sąveika.

Literatūra

[1] Daisuke Sakai et al 2013 Jpn. J. Appl. Phys. 52 036701
[2] Bellouard Yves et al 2004 Fabrication of high-aspect ratio, micro-fluidic channels and tunnels using femtosecond laser pulses and chemical etching. Optics Express, 12(10)
[3] G.S. Henderson, H.W. Nesbitt, G.M. Bancroft, Some Interesting Observations on Oxygen Environments in Silicate Glasses with Implications for the Fitting of the High Frequency Raman Envelope (Cargese, France, 2017).

CubeSat antenų spindulių formavimas ir Doplerio poslinkis daiktų interneto taikymams

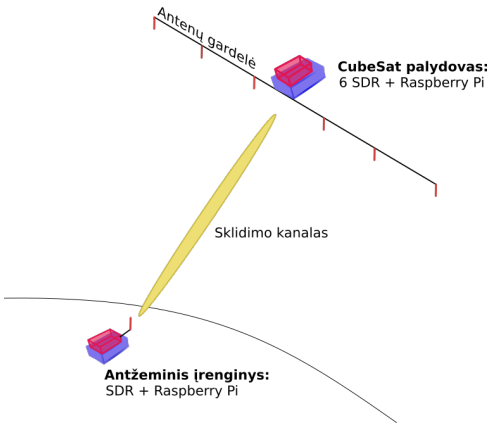
CubeSat antenna beamforming and Doppler shift for IoT applications

Rimvydas Aleksiejūnas[1], Saulius Rudys[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
rimvydas.aleksiejunas@ff.vu.lt

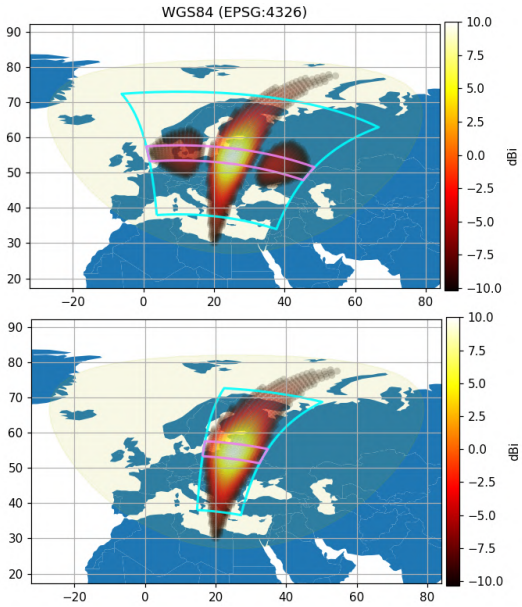
Pastaruoju metu mažieji CubeSat palydovai tampa puikia priemone globalaus ryšio sistemoms aptarnaujančioms antžemines daiktų interneto (angl. Internet of things, IoT) įrenginius [1]. CubeSat palydovai skrendantys apskritiminėmis Saulės sinchroninėmis orbitomis kiekvieną Žemės tašką aplanko tuo pačiu dienos metu, taigi gali būti efektyviai panaudojamas duomenų iš IoT sistemų surinkimui.

Radijo signalo spindulio valdymui palydovuose paprastai įrengiamos antenų gardelės. Tiesinės antenų gardelės panaudojimo CubeSat ryšiui schema pavaizduota 1 pav. Čia radijo siųstuvo-imtuvo funkcijas vykdo programuojamas radijas (angl. software defined radio, SDR), o duomenų apdorojimą atlieka mažų matmenų ir žemos galios Raspberry Pi kompiuteriai. Paprastai antenų gardelė montuojama skersine kryptimi palydovo judėjimo atžvilgiu, todėl spinduliavimo diagrama tampa sufokusuota skersine kryptimi [2]. Išilgine palydovo judėjimo kryptimi lieka plati antenos diagrama apimanti daugelį antžeminių imtuvų ir tokiu būdu dėl interferencijos mažinanti signalo triukšmo santykį. Papildomas spinduliavimo diagramos susiaurinimas skersine kryptimi galimas panaudojant antenų gardelės amplitudžių pasiskirstymą, kaip pavyzdžiui binominį, Teiloro arba Dolfo ir Čebyševo [3].

Dėl palydovo judėjimo atsirandantis Doplerio poslinkis gali būti panaudojamas papildomam antžeminių radijo signalų išskyrimui pagal dažnį. Kaip pavyzdį panagrinėsime 800 km aukštyje skriejantį palydovą, palaikantį IoT ryšį jam skirtame 868 MHz dažnių ruože. Tokiu atveju gaunamas maksimalus Doplerio poslinkis ±20 kHz. Šio darbo metu buvo įvertintos Doplerio poslinkio zonos išilgai palydovo trajektorijos, kurios pavaizduotos 2 pav. kartu su spinduliavimo diagramomis suprojektuotomis pagal WGS84 projekciją. Į spinduliavimo diagramas yra įskaityti ir laisvosios erdvės sklidimo nuostoliai, o pačios diagramos apribotos -20 dB lygiu nuo maksimalios galios. Spinduliavimo diagrama su vienodos amplitudės antenų gardelės žadinimu skersine kryptimi tęsiasi apie 3100 km įskaitant šalutinius lapelius, o panaudojus Dolfo ir Čebyševo amplitudžių pasiskirstymą spinduliavimo diagramos plotis sumažėja iki 1100 km. Jei toks palydovinis ryšys naudojamas pakankamai siauram dažnių diapazonui, kaip pavyzdžiui Weightless-P IoT ryšiui, užimančiam 12,5 kHz juostos plotį, tai priimamas signalas gali būti filtruojamas pagal 12,5 kHz pločio Doplerio poslinkio langus, kurių erdvinis išsidėstymas pavaizduotas 2 pav. violetine spalva (±6,25 kHz) ir šviesiai mėlyna spalva (du langai po 12,5 kHz).



1 pav. Antenų gardelės panaudojimo CubeSat palydoviniam ryšiui schema



2 pav. Keturių elementų antenų gardelės spinduliavimo diagramos ant Žemės paviršiaus: kai žadinimo amplitudės vienodos (viršuje) ir esant Dolfo ir Čebyševo amplitudžių pasiskirstymui (apačioje)

Reikšminiai žodžiai: antenų gardelė, spindulių fokusavimas, CubeSat palydovai.

Literatūra

[1] I.F. Akyildiz and A. Kak, Computer Networks **150**, 134-149 (2019).
[2] S. Rudys, L. Mačiulis, M. Milaševičius, and D. Bručas, in: *Proceedings of 40th ESA Antenna Workshop on Antenna Developments for Terrestrial and Small-Space Platforms* (Noordwijk, 2019), pp. 1-6.
[3] R. J. Mailloux, *Phased Array Antenna Handbook*, 2nd ed. (Artech House, Boston, 2005).

Sidabro nanodalelių, suformuotų lazerine abliacija skystyje, taikymas paviršiuje stiprinamos Ramano sklaidos jutikliams

Application of Silver Nanoparticles Synthesized by Laser Ablation in Liquid for Surface-Enhanced Raman Scattering Sensors

Asta Tamulevičienė[1,2], Jaunius Mykolaitis[2], Aivaras Sartanavičius[2], Mindaugas Juodėnas[1], Tomas Tamulevičius[1,2]

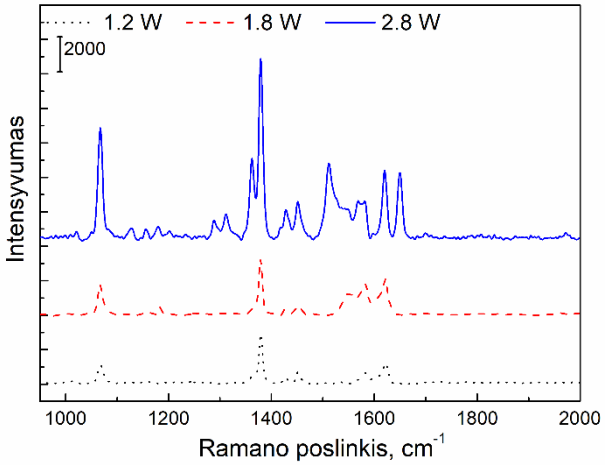
[1]Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas
[2]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
asta.tamuleviciene@ktu.lt

Pastaruoju metu tauriųjų metalų (Ag, Au) nanodariniai yra plačiai tyrinėjami dėl savo ypatingų optinių, elektrinių, mechaninių savybių ir daug žadančių taikymo galimybių, pvz.: katalizėje, paviršiuje stiprinamos Ramano sklaidos (SERS) jutikliuose, biovaizdinimui, fotošiluminei terapijai, saulės elementų efektyvinimui ir t.t. Iki šiol palyginus daug yra pasiekta metalų nanodarinių sintezės srityje, kai galima suformuoti nanodarinius atitinkamos formos, dydžių skirstinio (monodispersiškumo), kristališkumo ir t.t. [1]. Šių dalelių formavimui plačiai naudojami cheminės sintezės metodai, tačiau šiuo metodu dalelės turi apsauginį sluoksnį iš paviršiaus aktyvių medžiagų stabdantį dalelių augimą ir agregaciją. Naudojant metalo lazerinę abliaciją skystyje, pvz.: vandenyje, galima lengvai ir greitai suformuoti nanodaleles kurių paviršius išvis nebūtų pasidengęs stabilizuojančių medžiagų sluoksniu [2].

Šiame darbe sidabro nanodalelės buvo formuojamos lazerinės abliacijos būdu iš 99.9% grynumo sidabro taikinio (UAB „Lietuvos monetų kalykla“) distiliuotame vandenyje naudojant FemtoLab mikro-/nanoapdirbimo sistemą („Altechna R&D“/„Workshop of Photonics“) su femtosekundiniu Yb:KGW lazeriu Pharos („Light Conversion“). Išlaikant pastovų impulsų skaičių ir keičiant 1030 nm bangos ilgio lazerio galią nuo 1.2 W iki 2.8 W buvo suformuoti skirtingos koncentracijos sidabro tirpalai. 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 Tecnai G20 (FEI). Ramano sklaidos spektriniai matavimai atlikti naudojant 532 nm žadinimą inVia (Renishaw) spektrometru. Ramano signalo stiprinimo (SERS) eksperimentuose kaip analitinė medžiaga buvo naudojamas 10^{-6} – 10^{-8} M koncentracijos 2-naftalentiolis (2NT) (Sigma Aldrich).

Keičiant lazerio galią nuo mažiausios iki didžiausios, sidabro darinių koncentracija tirpale padidėjo nuo 9,49 mg/l iki 91,27 mg/l. Ištyrus suformuotų tirpalų optinę sugertį ties ~400 nm buvo identifikuota sidabro nanodariniams būdinga paviršiaus plazmonų smailė. Didėjant nanodarinių koncentracijai smailės plotis didėjo kas parodė, jog tirpale yra įvairaus dydžio dalelių. Atlikus SEM analizę nustatyta, jog pavienių dalelių dydis keičiant formavimo sąlygas kito nežymiai, tačiau didėjant lazerio galiai (ir darinių koncentracijai), buvo stebimas dalelių sulipimas į didesnius agregatus.

Fotofizikiniu metodu susintetintų Ag darinių tirpalo su 10^{-6}M koncentracijos 2NT molekulėmis Ramano sklaidos stiprinimo rezultatai yra apibendrinti 1 pav. Nepriklausomai nuo naudotos galios buvo užregistruotas Ramano sklaidos stiprinimas. Verta paminėti, kad visais atvejais buvo užregistruotas tiriamos medžiagos signalas, tačiau didžiausias smailių intensyvumas nustatytas kai tiriamoji medžiaga buvo sumaišyta su koloidiniu tirpalu suformuotu naudojant didžiausią galią. Tikėtina, jog tiriamoje zonoje buvo daugiau sidabro nanodalelių kurios galėjo sąveikauti su tiriamos medžiagos molekulėmis ir stiprinti jų sklaidos signalą.



1 pav. 10^{-6}M koncentracijos 2NT SERS signalas išmatuotas naudojant skirtingomis sąlygomis (vidutinė lazerio galia nurodyta legendoje) suformuotus sidabro koloidinius tirpalus

Reikšminiai žodžiai: sidabro nanodalelės, lazerinė abliacija, paviršiuje stiprinama Ramano sklaida, 2-naftalentiolis

Literatūra

[1] Y. Chen, Z.X. Fan, Z.C. Zhang, W.X. Niu, C.L. Li, N.L. Yang, B. Chen, H. Zhang, *Chem. Rev.*, **118**, 6409 (2018).
[2] H. Qayyum, W. Ahmed, S. Hussain, G.A. Khan, Z.U. Rehman, S. Ullah, T.U. Rahman, A.H. Dogar, *Opt Laser Technol.* **129**, 106313 (2020)

Tanino rūgšties ir trinatrio citrato santykio įtaka pusiau monodispersinių sidabro nanodalelių augimo kinetikai

Dependence of semi-monodispersed silver nanoparticles growth kinetics on tannic acid and trisodium citrate ratio

Nadzeya Khinevich[1,3], Asta Tamulevičienė[1,2], Sigitas Tamulevičius [1,2]
[1]Kauno 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
[3]UAB „Nanoversa“, K. Baršausko g. 59, LT-51423, Kaunas

nadzeya.khinevich@ktu.lt

Silver nanoparticles are widely used in different fields from biosensing to electronics due to their optical and electrical properties [1]. The control of the monodispersity is important in experiments employing metal colloids, as a film or assembly. The standard procedure to synthesize silver nanoparticles reduction of silver nitrate with trisodium citrate (TC) which serves as stabilizer as well. The drawback of this simple route is that the dispersion of sizes is quite wide. It was shown that combination of trisodium citrate with tannic acid (TA) provided the synthesis of monodispersed silver nanoparticles [2].

In this work, we studied the effect of TA/TC ratio in the step of seeds preparation that are further used in the growth of the silver nanoparticles.

The synthesis of nanoparticles consisted of two steps. At first, seeds were prepared using a solution consisting of silver nitrate in concentration of 0.25 mM, 0.05 mM TC and TA were added to get TA/TC ratio from 0.02 to 0.5. The second step was initiated to grow nanoparticles based on seeds solution. For the growth step, 36 ml of aqueous solution consisting of 1.5 ml of 2.5 mM TA, 1 ml of 25 mM $AgNO_3$ and 19.5 ml seeds were used. Seeds solution was heated to 90°C, and other components were added consistently at vigorous stirring. This process was repeated five times with each seed solution. The optical properties and the kinetics of nanoparticles growth were studied.

Using the described procedure, we were able to get nanoparticles with the mean diameter of 20 nm – 270 nm and the standard deviation of 3% - 40% depending on the growth step.

The absorbance spectra of seeds solutions formed at different TA/TC ratios are presented in Figure 1. With the increase of TA/TC ratio, the absorbance peak shifted from 406 nm to 430 nm and the peak's width increased. Rising the TA concentration during the seed's synthesis led to the increase of the average nanoparticles' diameter from ~20 nm to ~60 nm, and at the same time, their standard deviation of size distribution rose from 3% to 13%.

We determined that the rate of nanoparticle growth is highly dependent on the initial size of the seeds. When the nanoparticle growth starts from the smaller sized seeds (~20 nm diameter), the growth is slower and the final size of nanoparticles after 5 stages of growth is 70 nm. In the case of bigger seeds (~60 nm diameter) after 5 stages of growth the nanoparticles were 270 nm in diameter. Changing the TA/TC rate during the synthesis of seeds and the number of nanoparticle growth steps we can vary the final size of the nanoparticles in a wide range with a predefined size distribution if necessary to form monodispersed silver nanoparticles.

This methodology already showed their efficiency for silver nanoparticle fabrication with precisely defined mean diameter and size distribution sufficient for particle self-assembly on the template [3].

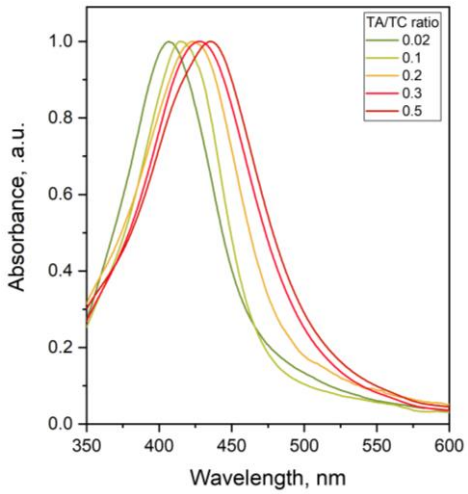


Fig. 1 Absorption spectra of seeds solutions prepared using different TA/TC ratio

Keywords: silver nanoparticles, chemical synthesis.

This research project is funded under the 2014–2020 Operational Programme for the European Union Funds' Investments under measure No. 01.2.2-MITA-K-702 "Promoting the Commercialization and Internationalization of R&D Results"

Literatūra

[1] X. F. Zhang, Z. G. Liu, W. Shen, and S. Gurunathan, Int. J. Mol. Sci., **17**, 9 (2016).
[2] J. Grobelny et al., J. Nanoparticle Res., **19**, 8, (2017).
[3] N. Khinevich, M. Juodėnas, A. Tamulevičienė, H. Bandarenka, and S. Tamulevičius, Coatings, **11**, 6, pp. 1–10, (2021).

GRAFENO OKSIDO NANODARINIŲ BIOAKUMULIACIJOS TYRIMAI *SALMO TRUTTA* ANKSTYVOSE VYSTIMOSI STADIJOSE

BIOACCUMULATION OF GRAPHENE OXIDE NANOSTRUCTURES IN *SALMO TRUTTA* AT EARLY DEVELOPMENT STAGES

Augustas Morkvėnas[1,4], Živilė Jurgelėnė[2], Sergej Šemčiuk[3], Nijolė Kazlauskienė[2], Vitalijus Karabanovas[1,4]

[1] Biomedicinės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio centras, Baublio 3b, LT-08406, Vilnius, Lietuva
[2] Gamtos tyrimų centras, Akademijos st.-2, LT-08412 Vilnius, Lietuva
[3] [2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300, Vilnius, Lietuva
[4]Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilnius Gedimino Technikos Universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva
a.mmorkvenas@gmail.com

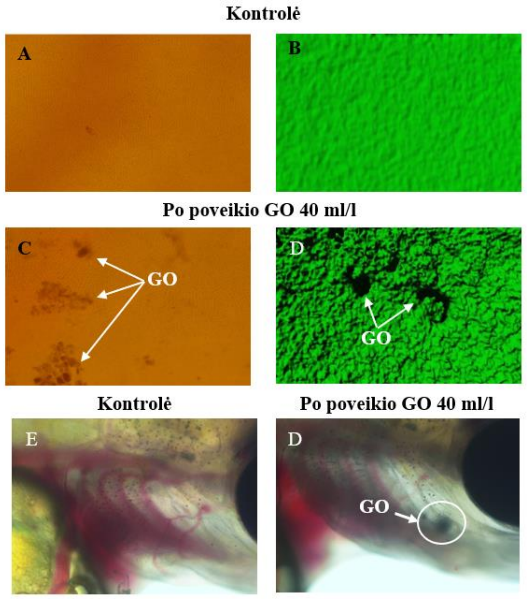
Grafeno oksidas (GO) turi didelį panaudojimo potencialą biomedicinoje ir aplinkosaugoje. Padidėjęs GO naudojimas padidina tikimybę šioms nanomedžiagoms patekti į aplinką. Tačiau rizika sveikatai, susijusi su GO poveikiu aplinkai, iš esmės nežinoma. Dėl savo unikalių fizikinių ir cheminių savybių GO ir jo kompozitai gali būti naudojami nuotekų valymui ir aplinkos teršalų adsorbcijai.

Šio tyrimo tikslas - ištirti GO 40 mg/L pasiskirstymą *Salmo trutta* embrionuose ir lervose, naudojant konfokalinę fluorescencinę mikroskopiją. Tyrimai buvo atlikti panaudojant bandomųjų organizmų 3D vaizdinimą (1pav. B ir E). Įvertintas GO pasiskirstymas embriono chorione ir lervų išoriniuose kūno audiniuose. Procedūros, susijusios su žuvimis, buvo vykdomos pagal Europos Parlamento ir Tarybos direktyvą 2010/63/ES dėl mokslo tikslais naudojamų gyvūnų apsaugos (Direktyva 2010/63/ES, 2010). Laboratorinis apdorojimas buvo atliktas aplinkos kameroje (Bronson PGC-660, Zaltbommel, Olandija), vadovaujantis ISO standartuose numatytomis gairėmis (ISO 7346-1:1996) ir ūmaus toksiškumo bandymų atlikimo metodika (OECD 2006)

Šviesaus lauko mikroskopija gautuose vaizduose galima matyti lygų choriono paviršių, su tolygiai pasiskirsčiusiomis tamsiomis dėmėsis (Pav. 1. A). Šios tamsios dėmės tai choriono poros, kurios yra svarbios deguonies, maisto medžiagų patekimui ir ekskretų, anglies dvideginio pašalinimui. Po 4 dienų inkubacijos su GO 40 mg/L, vertinant chorioną fluorescencinės konfokalinės mikroskopijos pagalba buvo pastebėtos tamsios dėmės, kurios indikavo GO kaupimąsi choriono paviršiuje (Pav. 1. E). Tokios pačios tamsios dėmės (GO) buvo matomos ir lervų išoriniuose audiniuose (Pav. 1. D ir F). Buvo parodyta, kad GO gali užkimšti choriono poras ir taip trikdyti tolimesnį embriono vystymąsi [1]. Klausimas apie GO sąveika su organizmu vis dar yra aktualus, nes jo biologinis pasiskirstymas nėra iki galo ištirtas.

Šis tyrimas buvo finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, Projekto No. S-MIP-20-22.

Reikšmingi žodžiai: Grafeno oksidas, Salmo trutta nanotoksikologija, konfokalinė mikroskopija



Pav. 1. Šviesaus lauko (A ir D) ir 3D rekonstruoti fluorescenciniai vaizdai (B ir E)
S. trutta embrionų choriono ir lervų (C and F) po 4 dienų inkubuotų GO 40 mg/l.

Literatūra

[1] Chen Y., Sun J., Hu X., Zhou Q. 2016. Specific nanotoxicity of graphene oxide during zebrafish embryo genesis. Nanotoxicology **10**(1), 42-52.

Koloidinio aukso ir sidabro tirpalų sintezė naudojant lazerinę abliaciją

Synthesis of colloidal gold and silver solutions using laser ablation

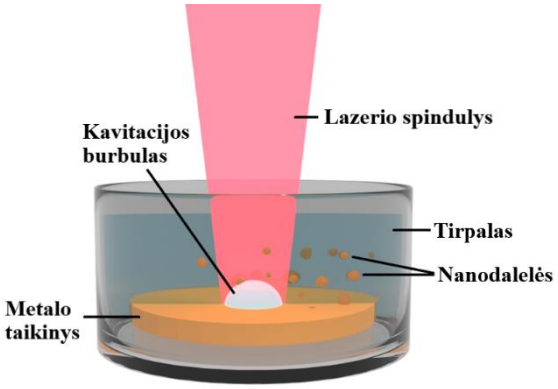
Vita Petrikaitė[1], Martynas Skapas[2], Evaldas Stankevičius[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanoriu g. 231, LT-02300, Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
vita.petrikaite@ftmc.lt

Aukso ir sidabro nanodalelės taikomos įvairiose technologijose, įskaitant pažangius katalizatorius, vėžio gydymą ir diagnostiką [1], tikslinį vaistų pristatymą, SERS, elektrocheminius jutiklius ir optinių bei elektroninių prietaisų komponentus, kurių savybės priklauso nuo plazmoninių vibracijų [2]. Aukso ir sidabro nanodalelės turi intensyvias spalvas, didelį paviršiaus ploto ir tūrio santykį, didelį elektros laidumą, cheminį stabilumą, katalizines funkcijas [3] ir pan. Metalo nanodalelių optinės savybės priklauso nuo lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso (LPPR). LPPR – tai dažnis, pasireiškiantis dėl laidžių elektronų virpesių, kurie sukuriami dėl sąveikos su elektromagnetine banga. Vizualus lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso indikatorius yra ryški spalva, nebūdinga makro-medžiagai ir atomams. Šį kvantinį reiškinį galima manipuliuoti keičiant nanodalelių dydį, dispersiją, formą, kompoziciją ir kitas fizines ir chemines charakteristikas [4]. Tam įvykdyti pasitelkiami skirtingi sintezės metodai ir parametrai, kurie nulemia morfologiją, stabilumą ir fizikochemines savybes.

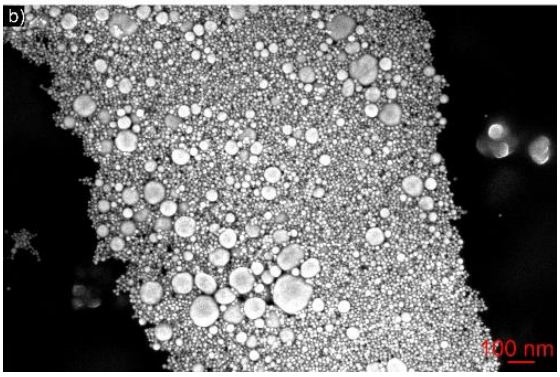
Šiame tyrime analizuojama aukso ir sidabro nanodalelių, morfologija ir plazmoninės savybės. Iš gautų rezultatų nustatyta kaip nanodalelės priklauso nuo pasirinkto tirpalo, vidutinės lazerio galios, židinio padėties, lazerio spindulio greičio ir kaip keičiasi stabilumas laikui bėgant.

Koloidinio tirpalo sintezės principas pavaizduotas iliustracijoje (1 pav.). Aukso arba sidabro taikinys yra dedamas į skystį (vandenį arba KCl (0,005 mol/L) tirpalą) ir paveikiamas lazeriu. Kai lazerio srautas viršija abliacijos slenkstį, medžiaga pašalinama frakcijomis. Frakcijų (nanodalelių) dydis priklauso nuo lazerio apdirbimo parametrų ir skysčio. Eksperimentuose buvo naudojama pirmoji harmonika (bangos ilgis 1064 nm), 3– 6 mJ impulsinė energija, 3– 6 W vidutinė galia, 10– 500 mm/s lazerio skenavimo greitis ir 1 kHz dažnis su 50 µm atstumu tarp skenuojamų linijų. Aukso nanodalelių, sukurtų naudojant lazerinės abliacijos metodą pavyzdys parodytas paveikslėlyje (2 pav.).

Pristatomas aukso ir sidabro nanodalelių, generuotų naudojant lazerinę abliaciją skystyje, morfologijos ir plazmoninių savybių tyrimas.



1 pav. Koloidinio tirpalo susidarymo naudojant lazerinę abliaciją iliustracija.



2 pav. SEM mikrografija: aukso nanodalelių, iš aukso taikinio, generuotų naudojant lazerinę abliaciją vandenyje.

Reikšminiai žodžiai: koloidinis tirpalas, aukso nanodalelės, sidabro nanodalelės, lazerinė abliacija.

Literatūra

[1] H. R. Rahimi et al. Nanoparticle Synthesis, Applications, and Toxicity, IntechOpen, (2019).
[2] E. Stankevičius, M. Garliauskas, L. Laurinavičius, R. Trusovas, N. Tarasenko, R. Pauliukaitė, Engineering electrochemical sensors using nanosecond laser treatment of thin gold film on ITO glass, Electrochimica Acta (297) 511-522, (2019).
[3] Y. C. Yeh, B. Creran, V. M. Rotello, Gold nanoparticles: preparation, properties, and applications in bionanotechnology, Nanoscale 4(6), 1871–1880 (2012).
[4] E. Petryayeva, U. J. Krull, Localized surface plasmon resonance: Nanostructures, bioassays and biosensing-A review, Analytica Chimica Acta, 706(1), 8–24, (2011).

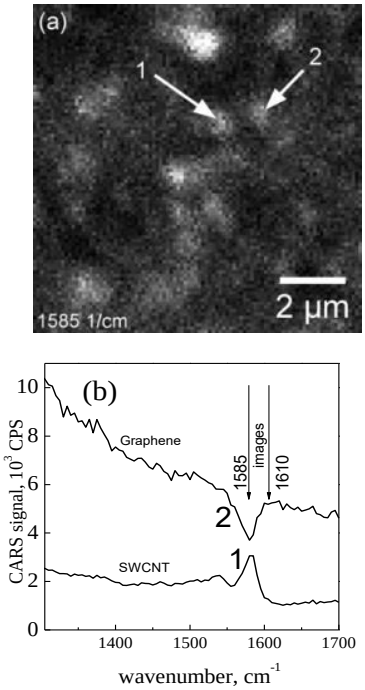
Anglies nano struktūrų tyrimas CARS mikroskopijos metodu

Investigation of carbon nano-structures by CARS microscopy

Andrej Dementjev[1], Alesia Paddubskaya[2], Galina Dovbeshko[3]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius, Lithuania
[2]Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk 220006, Belarus
[3]Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 46 Nauki Ave, Kyiv 03680, Ukraine
andrej.dementjev@ftmc.lt

In the recent years the composites or hybrid material based on graphene and carbon nanotube (CNT) have become a subject of extensive studies. At the same time, although the significant progress in the development of various techniques for the synthesis of CNT-graphene hybrid structures and composites has been achieved, the problem of separation of CNT and graphene in the final composition comprising both of them, as well as recognition of their spatial distribution are still challenging problems for many applications [1]. One of the most widely used methods for these purposes is the optical microscopic imaging using Raman scattering as a contrast mechanism. Coherent analog of spontaneous Raman scattering or coherent anti-Stokes Raman scattering (CARS, a particular case of four-wave mixing) can be applied to characterize CNT and/or graphene. It is worth noting that major contribution in the graphene CARS spectra is electronically enhanced the nonresonant background. At the same time, the contribution of the vibrational component to the four-wave mixing seems to be much smaller than electronic one. Due to Fano resonance nature [2], in this case at the resonance frequency a "dip" appears in the CARS spectrum instead of a "peak". In this work we provide the systematic analysis of the possibilities to separate tiny amounts of CNTs deposited on the surface of CVD graphene by CARS spectroscopy. Furthermore, we propose the mapping algorithm which can be used for future characterization of CNT-graphene hybrid systems.

The "peak" and "dip" for SWCNT and graphene respectively, observed at the resonance frequency of G-band complicate their separation in imaging using CARS Spectroscopy [3]. This stimulates the search of an algorithm enabling separation of component in CNT/graphene composite system. The imaging only at 1585 cm-1 does not allow to separate components. We have demonstrated that two images are necessary for this. While an imaging at 1610 cm-1 gives direct mapping of graphene revealing its specific pattern, the identification of CNT requires images at both frequencies. The differential image was obtained by subtracting the image at 1610 cm-1 from the image at 1585 cm-1 disclosing the distribution of CNT and suppressing graphene. This approach allows separate imaging of CNT and graphene in CARS microscopy and can be useful for future characterization of novel hybrid composite materials.



1 pav. (a) Image of a CNT/graphene system obtained at 1585 cm^{-1}. Point #1 and point #2 have the same brightness while corresponding spectra (b) at resonance frequency show "peak" and "dip", respectively.

Key words: Graphene, CNT, CARS imaging, G-band

Literatūra

[1] Yoshimura S.H., Khan S., Maruyama H., Nakayama Y., Takeyasu K. Fluorescence Labeling of Carbon Nanotubes and Visualization of a Nanotube−Protein Hybrid under Fluorescence Microscope. Biomacromolecules 2011; 12(4): 1200–1204, https://doi.org/10.1021/bm101491s.

[2] Limonov M.F., Rybin M.V., Poddubny, A.N., Kivshar, Y.S. Fano resonances in photonics. Nature Photonics 2017; 11(9): 543–554. https://doi.org/10.1038/nphoton.2017.142.

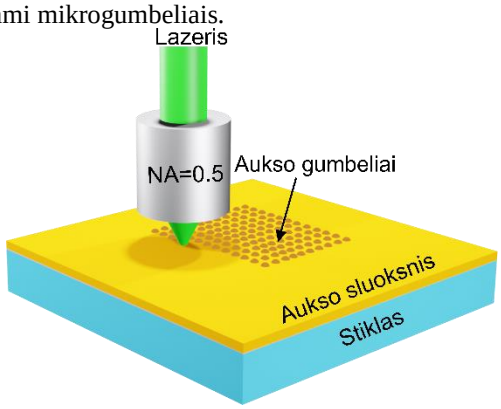
[3] Paddubskaya, A., Rutkauskas, D., Karpicz, R. et al. Recognition of Spatial Distribution of CNT and Graphene in Hybrid Structure by Mapping with Coherent Anti-Stokes Raman Microscopy. Nanoscale Res Lett 15, 37 (2020). https://doi.org/10.1186/s11671-020-3264-8

Plazmoninėmis savybėmis pasižymintys periodiniai aukso mikrogumbeliai, suformuoti tiesioginiu lazeriniu rašymo metodu

Periodic gold microbumps with plasmonic properties, produced using direct laser writing method

Kernius Vilkevičius, Evaldas Stankevičius
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių per. 231, 02300 Vilnius
kernius.vilkevicius@ftmc.lt

Tauriųjų metalų struktūros plačiai tiriamos dėl plazmoninių savybių, kurios plačiai taikomos jutiklių srityje. Pavieniai dariniai pasižymi tik vienos rūšies plazmonine moda, tuo tarpu suformavus periodinių mikrodarinių gardeles, jos sužadina hibridines plazmonines modas. Įprastai tokios gardelės gaminamos litografiniais metodais, tačiau šiame darbe parodomas alternatyvus metodas šių darinių formavimui – tiesioginis lazerinis rašymas, kuris gali būti paprastesnis ir nereikalaujantis sudėtingos vakuuminės įrangos [1]. Periodiniai mikrodariniai formuojami naudojant tik vieną aštriai sufokusuoto femtosekundinio lazerio impulsą. Tokiu impulsu paveikta aukso danga modifikuojama ir iš tolygaus metalo susidaro tuščiaviduriai iškilimai, vadinami mikrogumbeliais.



1 pav. Aukso mikrogumbelių formavimas tiesioginio lazerinio rašymo metodu

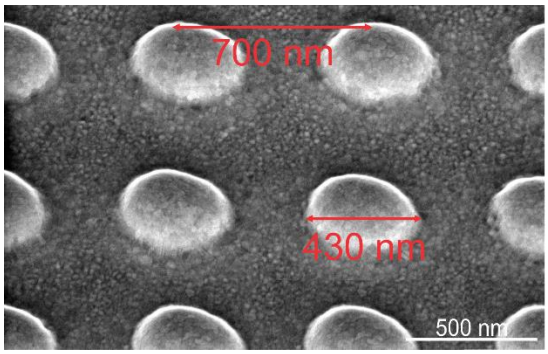
Suformuotos gardelės, kurių periodas artimas šviesos bangos ilgiui, sužadina hibridinį gardelės plazmonų poliaritoną. Ši moda susidaro hibridizuojantis paviršiaus poliaritonui, lokalizuotiems plazmonams bei išsklaidytai nuo gardelės šviesai. Hibridinio poliaritono rezonansas pasižymi atskirų modų savybėmis – jis yra stipresnis, siauresnis bei turi nemažą dispersiją.

Plazmoninės mikrogumbelių gardelių savybės buvo tiriamos spektrofotometru, matuojant bandinių atspindžio spektrą. Tyrimo metu buvo nustatyta keletas tendencijų. Pirmiausia, gardelės rezonansinis atsakas priklauso nuo krentančios spinduliuotės poliarizacijos – naudojant *p* poliarizuotą spinduliuotę susidaro du rezonansai ties skirtingais bangos ilgiais, tuo tarpu naudojant *s* poliarizuotą šviesą gaunamas sugertis tik ties vienu bangos ilgiu. Taip pat nustatyta rezonanso priklausomybė nuo spinduliuotės kritimo kampo į bandinį bei nuo gardelės periodo tarp mikrodarinių.

Formuojant mažų matmenų gardeles bei norint turėti sugertį ties tam tikru bangos ilgiu, svarbu žinoti, kokiu periodu reikia formuoti mikrodarinius. Naudojant viendimensinės gardelės difrakcijos formulę (1), buvo sudarytas nesudėtingas modelis rezonansinio bangos ilgio skaičiavimui. Teoriškai suskaičiuoti rezultatai labai gerai atitinka praktiškai suformuotų ir išmatuotų gardelių rezonansus. Modelis pagrįstas šia formule:

$$\lambda_{\text{rez}} = \frac{d}{m}\left(\pm\sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{d}}\varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon_{\text{d}}+\varepsilon_{\text{m}}} - \sin^2\theta}\right) \qquad (1)$$

Struktūros, žadinančios hibridines plazmonines modas, pasižymi didesniu optiniu jautrumu, tad jų optinis pritaikymas yra gana platus. Dėl mažų matmenų, tokios gardelės gali būti naudojamos biologiniuose jutikliuose įvairių navikų, alergenų ar antigenų detekcijai. Taip pat ypatingos optinės savybės leidžia darinius pritaikyti netiesinėje optikoje, fotoniniuose įrenginiuose ir net plazmoniniuose nanolazeriuose.



2 pav. Periodiniai aukso mikrogumbeliai

Reikšminiai žodžiai: aukso mikrogumbeliai, tiesioginis lazerinis rašymas, mikrodarinių gardelė, hibridinis gardelės plazmonų poliaritonas.

Literatūra

[1] E. Stankevičius et al. *Adv. Opt. Mater.* **9**, p. 2100027 (2021).

Skaičiavimų galimybės naudojant 0.3 PFlops našumo „VU HPC“ Saulėtekis superkompiuterį

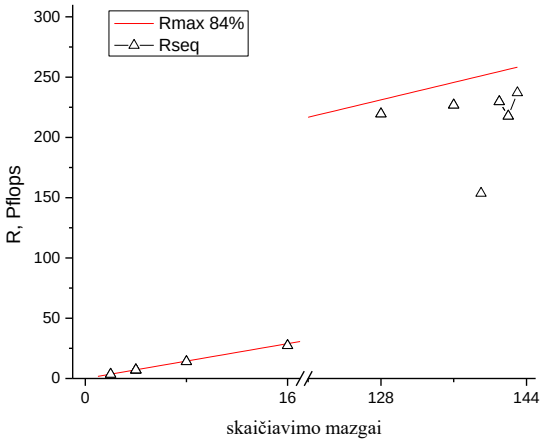
Calculation capabilities using the 0.3 PFlops performance “VU HPC” Saulėtekis supercomputer

Mindaugas Macernis[1], Jonas Franukevičius[1], Juozas Šulskus[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

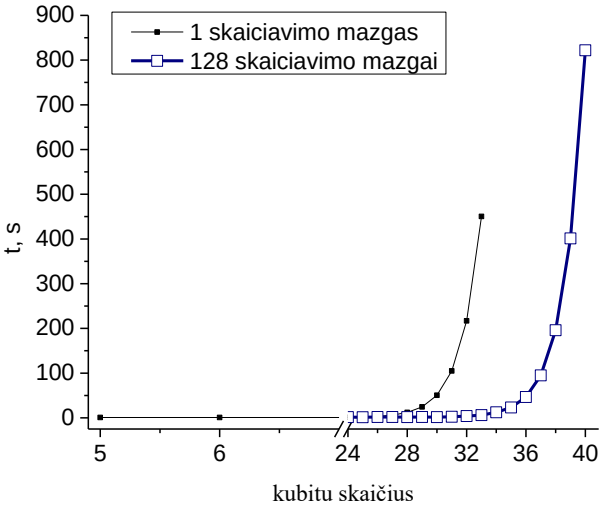
Naujoms mokslo šakoms tokioms kaip kvantinė biologija[1] ar kvantiniai kompiuteriai[2] reikalinga ypač naši kompiuterinė įranga su ypač našiais skaičiavimo algoritmais. Kvantinė biologijoje yra naudojami skaičiuojamosios kvantinės chemijos ir fizikos metodika, todėl reikalingi galingi paraleliniai kompiuteriniai pajėgumai. Amadalo dėsnis sudaro prielaidas nuspėti su kokio dydžio superkompiuteriais įmanoma greičiau spręsti uždavinius ir kada nebegalima tikėtis pagreitėjimo. Be Amdalo dėsnio ribojimo yra papildomi ribojantys veiksniai. Šie ribojai yra dėl kompiuterinio tinklo pralaidumo ir vėlinimo, operatyvinės atminties dydžio ir vėlinimo, procesų konkurencijos dėl skaičiavimo resursų ir t.t. Kiti našumo ribojimai yra pačiame programos kode, kuris turi būti tinkamai išlygiagretintas. O Amdalo dėsnis apibrėžia tik santykio tarp nuoseklaus ir lygiagretaus programinio kodo dalių įtaką. Įvertinti realias superkompiuterio galimybes galima atliekant bandomuosius skaičiavimus. Tipinis superkompiuterių architektūros kokybės matas yra aukšto našumo Linpack (HPLinpack) testas, kuris naudojamas įvertinti pasaulio 500 našiausius superkompiuterius (www.top500.org). Visgi, specifiniams parametrams įvertini būtini kiti standartiniai paketai: kvantinės chemijos NwChem paketas yra ypač stipriai pritaikytas superkompiuteriams, o kvantinio kompiuterio simuliatorius QuEST pasižymi operatyvios atminties poreikiu. Tokie testai gana objektyviai atspindi superkompiuterių galimybes fizikiniams medžiagotyrimiams uždaviniams spręsti.

Šiame darbe buvo atlikta eilė tyrimų su HPLinpack, molekulių dinamika su NwChem, ir QuEST paketais. Gautas superkompiuterio našumas 0.237052 PFlops, o tai sudaro 80% heteregeninio superkompiuterio įrangos pikinio suminio našumo (1 pav.). Naudojant NwChem Car-Parinelllo molekulių dinamiką pagal [3] literatūros duomenis 89 valandų skaičiavimus vieno mazgo uždavinys buvo išsprendė per 2.5 valandas su 96 skaičiavimo mazgais. Tuo tarpu kvantinis kompiuterio simuliatorius QuEST su 128 skaičiavimo mazgais (2 pav.) susimuliavmo 40 kvantinių kubitų.

Atlikti skaičiavimai parodė, kad atnaujintas „VU HPC“ Saulėtekis superkompiuteris yra priklausomai nuo konkrečios užduoties nuo 10 iki 35 kartų našesnis už iki šiol buvusį. Tai leidžia spręsti mokslines problemas, kurios dar prieš metus buvo visiškai nerealios.



1 pav. HPLinpack rezultatai



2 pav. QuEST kvantinių kompiuterio kubitų simuliavimas su superkompiuteriu.

Reikšminiai žodžiai: kvantinė chemija, superkompiuteriai, kvantiniai kompiuteriai.

Literatūra

[1] Cao, J., Cogdell, R.J., Coker, D.F., Duan, H.-G., Hauer, J., Kleinekathöfer, U., Jansen, T.L.C., Mančal, T., Miller, R.J.D., Ogilvie, J.P., Prokhorenko, V.I., Renger, T., Tan, H.-S., Tempelaar, R., Thorwart, M., Thyrhaug, E., Westenhoff, S., and Zigmantas, D., 'Quantum Biology Revisited', Science Advances, 2020, 6, (14), p. eaaz4888.

[2] Jones, T., Brown, A., Bush, I., and Benjamin, S.C., 'Quest and High Performance Simulation of Quantum Computers', Scientific Reports, 2019, 9, (1), p. 10736.

[3] S. Streckaite, M. Macernis, F. Li et al., J. Phys. Chem. A, **124**, 2792-2801, (2020).

Valdomos temperatūros atvyrų kvantinių sistemų dinamika

Temperature Controlled Open Quantum System Dynamics

Mantas Jakučionis[1], Darius Abramavičius[1]
[1]Cheminės fizikos institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius
mantas.jakucionis@ff.vu.lt

Atviros kvantinės sistemos dinamikos nustatymas, t. y., tokios kvantinės sistemos, kurią formaliai galima atskirti nuo ją supančios aplinkos, tačiau sistema ir aplinka lieka terminiame kontakte, yra viena bendriausių kvantinės mechanikos užduočių. Atviros sistemos taikomos modeliuojant sužadintų būsenų optinį atsaką, energijos pernašos procesus molekulėse, jų agregatuose, fotosintetiniuose kompleksuose ir kt.

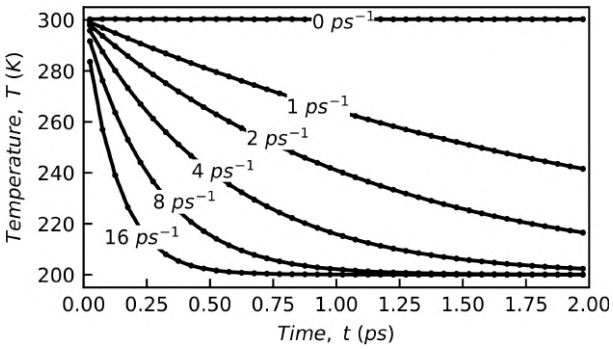
Tokių sistemų dinamikos nustatymui dažnai naudojamas sistemos ir pastovios temperatūros termostato modelis. Sistema vadinami visi mus dominančios fizikinės sistemos laisvės laipsniai, jie sąveikauja su termostato terminėmis fliuktuacijomis, kurie vaizduoja aplinkos poveikį, pvz. fononų, baltymų ir kitų molekulių terminį judėjimą.

Sistema gali būti sudėtinga, sudaryta iš daugybės tarpusavyje sąveikaujančių elektroninių ir virpesinių laisvės laipsnių, o termostato fliuktuacijos modeliuojamos, idealiu atveju – be galo dideliu, kvantinių harmoninių osciliatorių rinkiniu terminėje pusiausvyroje.

Taikant redukuotos tankio matricos teorinį aprašymą, aplinkos laisvės laipsniai yra nekintantys bei atsižvelgiama tik į jų statistinius vidurkius. Kitą vertus, galima tiesiogiai postuluoti modelį aprašančią nuo laiko priklausančią banginę funkciją bei ją išreikštai propaguoti. Tuomet svarbu užtikrinti, jog termostatą sudarančios virpesinės modos išlieka pastovios temperatūros – jeigu vyksta energijos pernaša iš sistemos į termostatą, virpesinių modų temperatūra gali stipriai viršyti pradinę temperatūra, taip efektyviai padidint aplinkos temperatūra.

Šiai problemai spręsti, sukūrėme termostato termalizacijos algoritmą [1], skirtą taikyti kartu su nuo laiko priklausančiu variaciniu metodu. Algoritmas stochastiškai atlieka virpesinių modų sklaida, kiekvieno sklaidos įvykio metu virpesinių modų kinetinė energija yra pakeičiama taip, jog termostatas artėtų prie norimos temperatūros pusiausvyros. Sklaidos įvykių laukimo skirstinys yra Puasono, $P(n,\tau) = \frac{1}{n!}(\tau\nu)^n e^{-\tau\nu}$, ir aprašo tikimybę įvykti n sklaidos įvykiams per laiko intervalą τ, kai sklaidos įvykių sparta yra ν. Puasono skirstinys gautas, modeliuojant diskretaus laiko Bernulio įvykių ansamblį riboje, $\tau \to 0,\ \tau\nu \ll 1$.

Paveikslėlyje (1) pademonstravome, jog termostatui, izoliuotam nuo sistemos, termalizacijos algoritmas neblogai veikia plačiame sklaidos spartų intervale, net kai $\tau\nu \approx 0.15$. Matome, jog termostato temperatūra artėja prie norimos temperatūros ir pasiekia terminę pusiausvyra.



1 pav. Vidutinė termostato temperatūra, suskaičiuota su skirtingomis sklaidos spartomis. Termostatas su pradine temperatūra, $T_0 = 300$ K, termalizuojamas į temperatūros, $T = 200$ K, terminę pusiausvyrą. Sklaidos lango plotis, $\tau = 0.01$ ps.

Pritaikius termalizacijos algoritma molekulinių eksitonų sistemai, parodėme, jog termalizacija leidžia ne tik reguliuoti aplinkos temperatūra, tačiau ir sumažinti reikalingą skaičių modų termostate, norint kokybiškai atvaizduoti aplinkos fliuktuacijas.

Dinaminis termostato temperatūros modeliavimas atveria galimybę atsižvelgti į eksperimentuose stebimus molekulių lokalios aplinkos šylimo efektus, kurie atsiranda dėl mokulinės vidinės konvercijos ar eksitonų anihiliacijos procesų.

Reikšminiai žodžiai: atvira kvantinė sistema, termostatas, temperatūra, termalizacija.

Literatūra

[1] M. Jakučionis, D. Abramavičius, Physical Review A **103**, 032202 (2021)

Aplinkos poveikis krūvio pernašos būsenoms chlorofilo molekuliniuose dimeruose

Environmental effects on the charge transfer states in chlorophyll dimers

Kazimieras Tamoliūnas[1], Juozas Šulskus[1], Andrius Gelžinis[1,2], Jevgenij Chmeliov[1,2]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius
kazimieras.tamoliunas@ff.stud.vu.lt

LHCII baltymas – vienas iš tilakoido membraną sudarančių šviesorankos kompleksų – dalyvauja augalui gyvybiškai svarbių procesų, tokių kaip fotosintezė ir nefotochemininis fluorescencijos gesinimas (NPQ), reguliacijoje. Žinoma, jog šiems procesams įtakos turi krūvio pernašos (CT) būsenos [1], kurių tiksli lokacija ir formavimosi mechanizmas LHCII baltyme nėra vienareikšmiškai nustatyti.

Tarpmolekulinės CT būsenos pasižymi dideliais (10D eilės) statiniais dipoliniais momentais, nykstamais šuolio dipoliniais momentais ir nelokaliais elektronų sužadinimais [2]. Mažiausias funkcinis vienetas tokių būsenų tyrimui – dimeras, kurį sudarančios molekulės turėtų būti arti viena kitos ir stipriai sąveikauti [3]. Tokiomis sąvybėmis pasižymi LHCII chlorofilo (Chl) molekulių dimeras 604*a*-606*b*, kurio sužadintų būsenų charakteristikų kokybinis tyrimas buvo pagrindinis šio darbo tikslas.

Sužadintų būsenų savybės buvo tiriamos kvantinės chemijos metodais naudojantis tankio funkcionalo teorija (DFT). Aukštos erdvinės skyros LHCII komplekso struktūra [4] buvo naudojama išrinkti pradinėms Chl monomerų struktūroms. Monomerai buvo atskirai optimizuojami DFT/CAM-B3LYP/cc-pVDZ teorijos lygmenyje ir surinkti į dimerus remiantis kristaline šviesorankos komplekso sandara. Suformuotų dimerų sužadintų būsenų savybės buvo skaičiuojamos TDDFT/CAM-B3LYP/cc-pVDZ teoriniame lygyje. Tokia pat procedūra buvo taikoma ir aminorūgščių molekulėms.

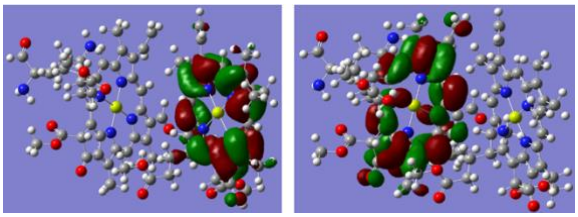
Kvantinės chemijos skaičiavimais buvo nustatyta, jog pasirinkto modelio Chl 604*a*–606*b* struktūros sužadintų būsenų energijos yra per aukštos lyginant su eksperimentiniais duomenimis. Ostroumov *et. al.* [5] Chl dimerų sužadintų būsenų tyrimas parodė, jog sužadintų būsenų energijos gali būti sumažintos įtraukiant aplinkos efektus, pavyzdžiui aminorūgščių (de)protonizaciją.

1 lentelė. Chl 604*a*–606*b* dimero sužadintų būsenų šuolio dipoliniai momentai (D). 1 stulpelis – atskiras dimeras, 2, 3 stulpeliai – dimeras su atitinkamai GLN131 neutralia ir protonizuota aminorūgštimi.

Būsena	604*a*–606*b*	604*a*–606*b*-*GLN131*	604*a*–606*b*-*GLN131+*
1	4.36	4.31	0.34
4	1.12	1.09	0.26
5	0.29	0.30	0.09

Tyrimo metu buvo patikrintas 13 aminorūgščių poveikis sužadintoms Chl 604*a*–606*b* dimero būsenoms. Buvo lyginami spektrai bei sužadintų būsenų savybės – statiniai bei šuolio iš pagrindinės būsenos dipoliniai momentai ir molekulinių orbitalių indėliai į sužadinimus. Didžiausią efektą sužadintoms būsenoms turėjo arti dimero esančios GLN131 aminorūgšties protonizacija.

Galimos krūvio pernašos būsenos buvo atrinktos remiantis žemomis šuolio iš pagrindinės būsenos dipolinių momentų vertėmis (1 lentelė). Orbitalių indėliai į pirmą teigiamai įkrautos struktūros sužadintą būseną (1 pav.) patvirtino šį pradinį spėjimą. Statmena dimero plokštumai pirmos sužadintos būsenos statinio dipolinio momento vektoriaus kryptis parodė, jog šio



sužadinimo metu krūvio pernaša vis dėlto nevyksta.

1 pav. Chl 604*a*–606*b* dimero su protonizuota aminorūgštimi GLN131+

Tyrimas parodė, jog Chl dimerų sužadintų būsenų energijos gali būti sumažintos įtraukiant struktūros sąveiką su protonizuotomis aminorūgštimis.

Reikšminiai žodžiai: LHCII, chlorofilai, tankio funkcionalo teorija, krūvio pernaša.

Literatūra

[1] S. Park, C. J. Steen, D. Lyska, A. L. Fischer, B. Endelman, M. Iwai, & G. R. Fleming, Chlorophyll–carotenoid excitation energy transfer and charge transfer in Nanochloropsis oceanica for the regulation of photosynthesis, Proceedings of the National Academy of Sciences, 201819011, (2019).

[2] T. Mancal, L. Valkunas, & G. R. Fleming, Theory of exciton–charge transfer state coupled systems. Chemical Physics Letters, 432(1-3), (2006), 301–305.

[3] J. Chmeliov, (2015), Excitation evolution and self-regulation ability of photosynthetic light harvesting systems, doctoral dissertation, Vilnius University.

[4] Y. Umena, K. Kawakami, J.R. Shen, & N. Kamiya, Crystal structure of oxygen-evolving photosystem II at a resolution of 1.9 Å. Nature, 473(7345), 55–60, (2011).

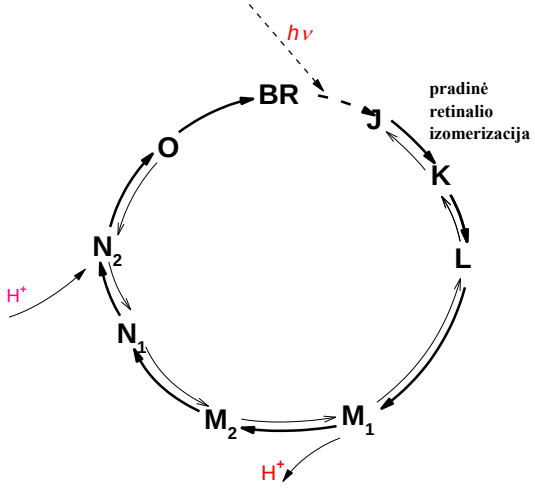
[5] E. E. Ostroumov, J. P. Götze, M. Reus, P. H. Lambrev & A. R. Holzwarth, Characterization of fluorescent chlorophyll charge-transfer states as intermediates in the excited state quenching of light-harvesting complex II, Photosynthesis Research, (2020).

Bakteriorodopsino baltymo aktyvaus centro modeliavimas naudojant molekulių dinamiką

Modeling of active center of bacteriorhodopsin using quantum molecular dynamics

Ligitas Vinciūnas[1], Leonas Valkunas[1], Mindaugas Macernis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
mindaugas.macernis@ff.vu.lt

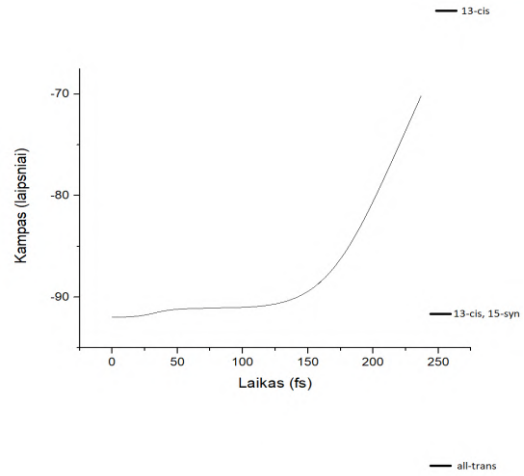
Bakteriorodopsinas – tai baltymas, atsakingas už jonų pernešimą per ląstelės membraną. Kad bakteriorodopsinas atliktų jonų pernešimo funkciją, reikalinga šviesos energija. Bakteriorodopsinas atrastas prieš 40 metų, organizme lotynišku pavadinimu Halobacterium salinarum. Kadangi protonų pernešimo funkcija visoje gyvojoje gamtoje yra panaši, dėl to bakteriorodopsino tyrinėjimai yra svarbūs. Bakteriorodopsino aktyviajame centre yra retinalis. Retinaliui sugėrus šviesos energiją, jo konfigūracija pasikeičia iš all-trans į 13-cis, 15-syn. Šis konfigūracijos pokytis sudaro sąlygas bakteriorodopsinui pradėti protono pernešimo procesą.[1,2] Po kiek laiko, retinalio konfigūracija sugrįžta į pradinę būseną ir visas protonų pernešimo procesas, gali kartotis iš naujo. Tai vadinama bakteriorodopsino fotociklu (2 pav).



1 pav. Bakteriorodopsino fotociklas

Žinoma, kad retinalio 13-*cis*, 15-*syn* konfigūracijos trukmė yra nuo ps iki μs eilės [3], tačiau molekulių dinamikos skaičiavimuose gaunama, kad retinalio 13-*cis*, 15-syn konfigūracijos trukmė yra fs eilės, dėl to šio darbo pagrindinis tikslas yra įvertinti 13-*cis*, 15-*syn* retinalio konfigūraciją iki 1 ps. Išanalizavus įvarius metodus taikomus modeliuojant bakteriorodopsiną nuspręsta, kad bakteriorodopsino aktyviajam centrui (retinaliui) modeliuoti naudosime tankio funkcionalų teorijos skaičiavimo modelį: B3LYP funkcionalą su cc-pVDZ bazinėmis funkcijomis, o stabilių bakteriorodopsino konfigūracijų paieškai naudojome *ab-initio* molekulių dinamiką, įdiegta Gaussian 16 pakete.

Atlikus retinalio struktūros optimizaciją (vakuume ir iš bakteriorodopsino baltymo iškirptų molekulių lauke) pastebėjome, kad retinalio formai didelę įtaką daro jo aplinka. Retinalio struktūros optimizacijos metu, dėl netinkamos molekulių aplinkos, retinalis gali užimti ne tą konfigūraciją kuri tikėtina pagal žinomus kristolografinius duomenis. Todėl buvo atliktas tyrimas molekulių atrinkimas iš baltymo yra ypač svarbus tirinėjant retinalio 13-*cis*, 15-*syn* konfigūraciją. Retinalio konfigūracija 13-cis, 15-syn egzistuoja sužadinotoje būsenoje, todėl su ja buvo atlikti molekulių dinamikos skaičiavima ties 300 K, 70 K ir 1 K temperatūrose. Skaičiavimo rezultatai rodo, kad retinalio 13-cis, 15-syn konfigūracija vakuume išsilaiko maždaug 30 fs, su papildomomis šalia esančiomis molekulėmis maždaug 130 fs (2 pav.), o temperatūros keitimas retinalio konfigūracijai esminės įtakos nedaro.



2 pav. Retinalio konfigūracijos kitimas molekulių dinamikos metu, kai T = 1 K.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.

Reikšminiai žodžiai: bakteriorodopsinas, retinalis, kvantinė molekulių dinamika..

Literatūra

[1] C. Wickstrand, et al., Bacteriorhodopsin: Would the real structural intermediates please stand up?, Biochim. Biophys. Acta (2014), http://dx.doi.org/10.1016/j.bbagen.2014.05.021
[2] B.P. Kietis, M. Macernis, J. Sulskus, L. Valkunas, Lith. J Phys. **50**, 4, (2010).
[3] Ernst OP, Lodowski DT, Elstner M, Hegemann P, Brown LS, Kandori H. Microbial and animal rhodopsins: structures, functions, and molecular mechanisms. Chem Rev. 2014;114(1):126-163. doi:10.1021/cr4003769

Sinchronizacijos slopinimas dviejose sąveikaujančiose neuronų populiacijose

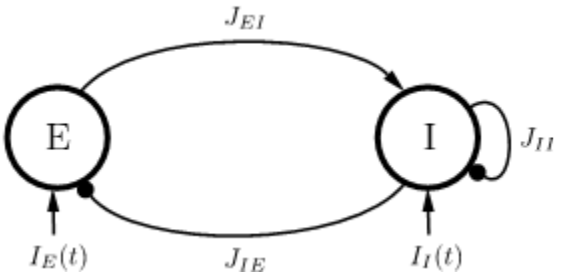
Suppression of synchronization in two interacting neural populations

Tatjana Pyragienė, Kęstutis Pyragas , Augustinas P. Fedaravičius
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
tatjana.pyragiene@ftmc.lt

Sinchronizacijos procesai didelėse sąveikaujančių dinaminių sistemų populiacijose yra intensyvių fizinių, technologinių ir biologinių sistemų tyrimų objektas [1]. Ypač stipri sinchronizacija gali pakenkti smegenų funkcijai ir sukelti įvairius neurologinius sutrikimus, tokius kaip Parkinsono liga, epilepsija ir kt. Dėl šios priežasties sinchronizacijos valdymo tyrimai yra aktualūs moksliniu ir medicininiu požiūriu. Aukšto dažnio giliosios smegenų stimuliacijos (GSS) terapinė procedūra [2] yra patvirtinta klinikiniam Parkinsono ligos ir kt. gydymui.

Naujausi dinaminių sistemų teorijos pasiekimai leido geriau suprasti sinchronizacijos poveikį didelio masto osciliatorių tinkluose. Ott ir Antonsen [3] parodė, kad sujungtų osciliatorių mikroskopinio modelio lygtys gali būti redukuotos iki mažų matmenų įprastų diferencialinių lygčių sistemos biofiziškai reikšmingiems makroskopiniams parametrams: spaikavimo dažniui (*firing rate*) ir vidutiniam membranos potencialui (*mean membrane potential*), kurie tiksliai apibūdina sistemos makroskopinę evoliuciją.

Mes parodėme [4], kad vidutinio lauko (*mean-field*) lygtys yra naudingos norint suprasti stimuliacijos poveikį sinchronizacijos procesams. Mes ištyrėme dviejų sąveikaujančių eksitatorinių ir inhibitorinių (*excitatory and inhibitory*) QIF (*quadratic integrate-and-fire*) neuronų populiacijų tinklą.
Tinklo schema pateikta 1 pav.



1 pav. Simbolinis dviejų neuronų populiacijų tinklo vaizdavimas. Dideli apskritimai, pažymėti „E“ ir „I“, rodo eksitatorinių ir inhibitorinių neuronų populiacijas. Kreivė, besibaigianti rodykle, rodo eksitatorinį ryšį tarp E ir I populiacijų; I_{EI} yra sąveikos stipris. Kreivės, besibaigiančios juodais rutuliukais, rodo inhibitorines jungtis tarp I ir E populiacijų, taip pat viduje I populiacijos; J_{EI}, J_{IE}, ir J_{II} yra atitinkamų sąveikų stipriai. Vertikalios rodyklės, pažymėtos $I_E(t)$ ir $I_I(t)$, rodo išorines sroves, stimuliuojančias E ir I populiacijas.

Palyginus paprastos vidutinio lauko lygtys leidžia atlikti išsamią įvairių laisvo tinklo dinaminių režimų bifurkacinę analizę ir atskleisti įvairių stimuliavimo algoritmų veikimo mechanizmus. Mes parodėme, kad inhibitorinės populiacijos aukšto dažnio stimuliacija yra labai veiksminga slopinant abiejų populiacijų kolektivinius sinchroninius virpesius. Slopinimo mechanizmą galima paaiškinti kaip nestabilios nekoherentinės tinklo būsenos stabilizaciją.

Redukuotos vidutinio lauko lygtys išvedamos, darant prielaidą, kad tinklas yra be galo didelis, bet realūs tinklai yra baigtinio dydžio. Algoritmui išbandyti buvo naudojamas skaitmeninis modeliavimas su 2000 eksitatorinių ir 2000 inhibitorinių QIF neuronų. Šio skaitmeninio modeliavimo rezultatai gerai dera su rezultatais, gautais iš vidutinio lauko lygčių.

Vidutinio lauko lygtys, išvestos iš sąveikaujančių QIF neuronų mikroskopinės dinamikos, yra veiksminga priemonė kuriant įvairius stimuliavimo algoritmus, skirtus valdyti sinchronizacijos procesus didelio masto neuroniniuose tinkluose.

Padėka

Darbas parengtas pagal Lietuvos Mokslo Tarybos projektą Nr. S-MIP-21-2.

Reikšminiai žodžiai: neuroniniai tinklai, mikroskopinio modelio redukcija, bifurkacijų analizė, aukšto dažnio stimuliacija, sinchronizacijos slopinimas.

Literatūra

[1] A. Arenas, A. Díaz-Guilera, J Kurths, Y. Moreno, and C. Zhou, Synchronization in complex networks, Physics Reports 469, 93 (2008).
[2] M. L. Kringelbach, N. Jenkinson, S. L. Owen, and T. Z. Aziz, Translational principles of deep brain stimulation, Nat. Rev. Neurosci. 8, 623 (2007).
[3] E. Ott and T. M. Antonsen, Low-dimensional behavior of large systems of globally coupled oscillators, Chaos 18, 037113 (2008).
[4] K. Pyragas, A. P. Fedaravičius, and T. Pyragienė, Phys. Rev. E 104, 014203 (2021).

Žadinimo-zondavimo spektrų modeliavimas prie didelių žadinimo intensyvumų J agregatuose

Modeling of pump-probe spectra at high excitation intensities for J aggregates

Vytautas Bubilaitis, Darius Abramavičius
Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
vytautas.bubilaitis@ff.vu.lt

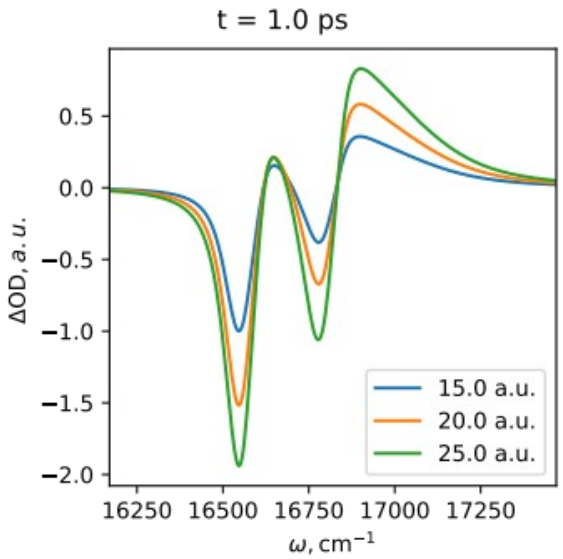
Eksitono-eksitono anihiliacija(EEA) yra procesas, kurio metu iš dviejų molekulinių sužadinimų tdvigubai sužadinta būsena. Tada labai greitai įvyksta vidinė konversija ir lieka tik 1 sužadinimas.

EEA yra stebima dvisieniuose dažų molekulių nanovamzdeliuose[1]. EEA poveikį galima pamatyti žadinimo-zondavimo spektruose[2].

Mūsų tikslas yra teoriškai aprašyti žadinimo-zondavimo spektrus šiuose agregatuose. Tam mes pasitelkiame jau mūsų išvestas netiesines eksitonų lygtis(NEE)[2] su papildomais aukštesnės eilės nariais, aprašančiais EEA procesą. Bendradarbiaujama su prof. J. Hauer, kurio grupėje šie spektrai buvo išmatuoti.

Dvisieniai nanovamzdeliai yra didelės sistemos sudarytos iš tūkstančių molekulių. Todėl norint suskaičiuoti žadinimo-zondavo spektrus su NEE lygtimis turime atlikti keletą aproksimacijų. Laikome du vamzdelius nepriklausomais, vamzdelius ištiesiname, tai yra sukonstruojama j agregatą, nes mus domina tik mažiausios energijos spektrinė linija.

Dalis skaičiavimo rezultatų yra pateikta 1 ir 2 pav. Šiuose paveiksluose yra pateikti žadinimo-zondavimo spektrai kai yra skirtingi žadinimo intensyvumai. 1 pav. spektrai yra kaip vėlinimo trukmė 1 ps , o 2 pav. - 10 ps.

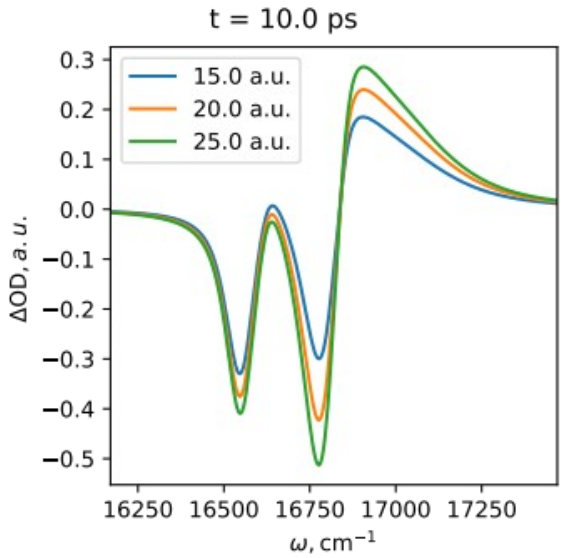


1 pav. Suskaičiuoti žadinimo-zondavimo spektrai su 1 ps vėlinimo trukme esant skirtingiems žadinimo intensyvumams

Kiekviena neigiama smailė atitinka vieną vamzdelį, kairė yra vidinis vamzdelis, dešinėje išorinis[1]. Neigiama smailė yra išblyškimo ir stimuliuotos emisijos sumą, o teigiama dalis - stimuliuotos emisijos. Vidinio vamzdelio stimuliuota emisija persidengia su išorinio vamzdelio neigiama dalimi.

Išorinio vamzdelio spektrinės linijos gęsta greičiau, todėl manome EEA šiame vamzdelyje vyksta sparčiau, todėl šiam vamzdeliui yra parinkta didesnė anihiliacijos parametro vertė, bet gali būti šis efektas yra dėl galimos sužadinimų pernašos tarp vamzdelių, kurios mes neįskaitome.

Taip pat matyti spektrinių linijų gesimo priklausomybė nuo žadinimo intensyvumo. Išorinio vamzdelio spektrinės linijos labiau priklauso nuo žadinimo intensyvumo esant ilgesniam vėlinimo laikui.



2 pav. Suskaičiuoti žadinimo-zondavimo spektrai su 10 ps vėlinimo trukme esant skirtingiems žadinimo intensyvumams

Reikšminiai žodžiai: žadinimo zondavimo spektrai, molekuliniai agregatai, eksitono-eksitono anihiliacija.

Literatūra

[1] Kriete, B., Lüttig, J., Kunsel, T. *et al.* Interplay between structural hierarchy and exciton diffusion in artificial light harvesting. Nat Commun **10,** 4615 (2019)

[2] V. Bubilaitis, J. Hauer and D. Abramavičius, Chem. Phys. **527**, 110458 (2019).

Rezervuarinio skaičiavimo taikymas ekstremaliųjų įvykių prognozei ir slopinimui

Using reservoir computing to predict and prevent extreme events

Viktoras Pyragas[1], Kęstutis Pyragas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
viktoras.pyragas@ftmc.lt

Įvairių gamtinių bei inžinerinių sistemų dinamikoje gali pasireikšti reti, pasikartojantys, dideli nuokrypiai nuo reguliaraus elgesio. Tokie ekstremalūs įvykiai yra įdomūs įvairioms mokslo disciplinoms [1]. Šių reiškinių pavyzdžiai yra vandeninų milžiniškos bangos, žemės drebėjimai, staigūs įtampos šuoliai elektriniuose tinkluose, akcijų rinkų žlugimai, bei epilepsijos priepuoliai. Todėl ekstremaliųjų įvykių prognozavimas bei slopinimas yra ypač pageidautini. Ekstremalieji įvykiai dažnai atsitinka spontaniškai, be akivaizdžių įspėjamųjų ženklų. Jie yra reti ta prasme, kad jų dažnis yra žymiai mažesnis už charakteringąjį sistemos dažnį, ir jie yra ekstremalūs ta prasme, kad jų amplitudė yra kelis kartus didesnė nei standartinis stebimojo dydžio nuokrypis. Ekstremalieji įvykiai yra tiriami tiek stochastinių, tiek deterministinių modelių rėmuose. Stochastiniuose modeliuose ekstremalieji įvykiai gali būti prognozuojami tik statistiškai. Deterministiniuose modeliuose ekstremalieji įvykiai yra dinaminės sistemos vidinių procesų rezultatas. Netgi paprastos dinaminės sistemos gali generuoti labai sudėtingus chaotinius signalus, ir ekstremaliųjų įvykių atsiradimo mechanizmo nustatymas yra labai sudėtingas uždavinys. Ekstremaliųjų įvykių deterministinėse sistemose prognozė gali remtis tuo faktu, kad esama sistemos būsena vienareikšmiškai nusako jos ateitį, bet šią prognozę riboja jautri priklausomybė nuo pradinių sąlygų. Prognozavimo strategijos paprastai remiasi prekursorių (indikatorių) paieška; jie duoda išankstinį įspėjamąjį ženklą apie artėjantį ekstremalųjį įvykį. Žemos dimensijos sistemoms prekursorius gali būti nustatytas iš vienintelio skaliarinio stebimojo dydžio, taikant uždelstųjų koordinačių metodus, tuo tarpu kai aukštos dimensijos sistemų atveju reikia žinoti sistemą aprašančias lygtis.

Šiame darbe [2] mes taikome rezervuarinio skaičiavimo metodą [3] ekstremaliųjų įvykių prognozavimui bei slopinimui. Šis metodas naudoja netiesinį įvesties-išvesties dirbtinį neuroninį tinklą su atsitiktinai sugeneruotom parametrų reikšmėm, ir taiko tiesinę regresiją „išvesties svorinių koeficientų“ nustatymui. Šie koeficientai padaro tinklo išvestį geriausiai atitinkančią „apmokymo stadijos duomenis“. Tokia metodika yra skaitiškai paprastesnė, lyginant su kitais dirbtinių neuronų metodais, nes čia apmokymo procese yra parenkami tiktai išvesties koeficientai, tuo tarpu kai tinklo parametrai lieka nepakeisti. Kolkas rezervuarinis skaičiavimas buvo sėkmingai pritaikytas žemos dimensijos bei erdvinės-laikinės dinamikos sistemų, neturinčių ekstremalių įvykių, prognozei [3].

Ekstremaliųjų įvykių prognozė yra sudėtinga dėl to, kad lokalinis Liapunovo rodiklis, arti ekstremaliojo įvykio, gali būti daug didesnis už globalinį (suvidurkintą) Liapunovo rodiklį, būdingą chaotiniam atraktoriui. Nepaisant to, mes parodėme [2], kad ekstremalieji įvykiai gali būti sėkmingai prognozuojami taikant rezervuarinį skaičiavimą. Mes tai pademonstravome dviem sistemom, generuojančioms ekstremaliuosius įvykius. Viena jų – tai globaliai sujungtų FitzHugh Nagumo (FHN) neuronų modelis, kuris buvo pateiktas ir analizuojamas [4,5] darbuose. Mes tirėme du šio modelio variantus, sudarytus iš mažo (2) ir didelio (101) neuronų skaičiaus. Čia mes pasirinkome valdomąjį kintamąjį, ir parodėme, kad išprognozuoti ekstremalūs įvykiai gali būti nuslopinti, taikant nykstamai mažus valdymo trikdžius, pritaikytus iki išprognozuoto įvykio. Antras modelis yra viena kryptimi sukabinti chaotiniai osciliatoriai, kuriuose ekstremalieji įvykiai, vadinami „Dragon Kings“, atsiranda kaip atraktoriaus „burbuliavimo“ (attractor bubbling) pasekmė. Šiai sistemai yra žinomas prekursorius, ir mes pademonstravome efektyvų ekstremaliųjų įvykių slopinimą, prognozuodami prekursoriaus elgesį.

Reikšminiai žodžiai: ekstremalus įvykis, rezervuarinis skaičiavimas, nuo modelio nepriklausoma prognozė, chaotinė sistema, grįžtamasis ryšys.

Literatūra

[1] S.Albeverio, V. Jentch, H. Kantz (Eds), *Extreme Events in Nature and Society* (Springer, Berlin, 2006)
[2] V. Pyragas, K. Pyragas, Phys. Lett. A **384**, 126591 (2020).
[3] H. Jaeger, H. Haas, Science **304**, 78 (2004).
[4] G. Ansmann, R. Karnatak, K. Lehnertz, U. Feudel, Phys Rev. E **88**, 052911 (2013).
[5] R. Karnatak, G. Ansmann, U.Feudel, K. Lehnertz, Phs. Rev. E **90**, 022917 (2014).

Elektromagnetiškai indukuoto praskaidrėjimo ir lokalizacijos efektai sąveikaujančių Rydbergo atomų sistemose

Electromagnetically induced transparency and localization effects in interacting Rydberg atomic systems

V. Kudriašov[1], H.R. Hamedi[1], G. Juzeliūnas[1], N. Jia[2], J. Qian[3]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio 3, Vilnius, Lithuania
[2]Public Experiment Center, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China
[3]Quantum Institute for Light and Atoms, East China Normal University, Shanghai, China
viaceslav.kudriasov@ff.vu.lt

Coherent control of atom and light interactions has many important applications in quantum and nonlinear optics. In particular, electromagnetically induced transparency, a quantum interference effect where the destructive interference between probability amplitudes of the optical transitions occurs, leads to significant changes in material's optical response and a number of peculiar phenomena [1]. Using highly excited Rydberg atoms, having large principal quantum numbers, one can explore a range of previously studied effects in a new regime of nonlinear quantum optics at low light intensities [2]. Because of their extreme polarizability and long-range interactions, systems of Rydberg atoms can be much more efficient compared to the atomic systems in the ground states.

In this work we were interested in the effects of spatially dependent electromagnetically induced transparency (EIT) in the ensemble of cold interacting Rydberg atoms. The spatially dependent EIT patterning has been realized by taking Rydberg atoms in a typical three level ladder scheme and using a special control field combinations being a superposition of two Laguerre–Gaussian modes (Fig. 1). In this setup, where different vortex control field modes are superimposed, the resulting field develops various spatially coherent structures depending on the corresponding orbital angular momentum (OAM) values of the interfering control fields. As a result, the optical response exhibits the formation of different types of bright and dark Ferris wheel structures as can be seen in the absorption (transmission) profiles (Fig. 2). This setup effectively converts phase information of the optical field into intensity profiles and related modified optical response, that, within the specific range of parameters, may be used to produce highly localized distributions [3].

The findings show the possibility of precise spatial patterning of Rydberg atoms in the transverse two-dimensional space enabling the formation of strongly localized optical lattices with the tunable barriers between sites and providing single-site addressability for the arrays of trapped atoms. The proposed setup, based on interference of optical vortex field combinations, may be especially useful for the applications like creation of specific ring traps for quantum gases, phase dependent quantum memories or storage of high-dimensional optical information.

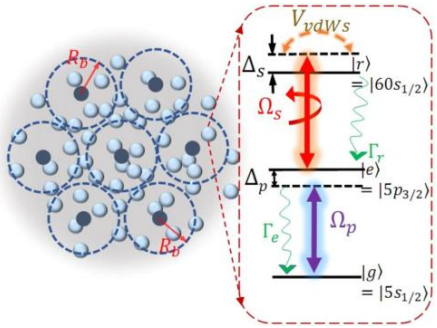


Fig. 1. Schematic representation of a Rydberg atomic ensemble with the ladder energy level configuration coupled by a combined superposition of strong vortex control fields and a weak non-vortex probe field.

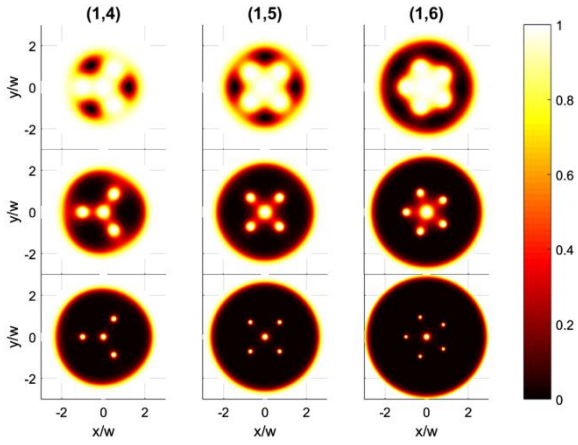


Fig. 2. Normalized absorption distributions for the increasing control field strengths (top to bottom) and different OAM number combinations denoted by the corresponding pairs of numbers above.

Keywords: cold atoms, Rydberg state, optical vortex, induced transparency, absorption pattern

References

[1] M. Fleischhauer, A. Imamoglu, J.P. Marangos, Rev. Mod. Phys. **77**, 633 (2005).
[2] D. Petrosyan, J. Otterbach, M. Fleischhauer, Phys. Rev. Lett. **107**, 213601 (2011).
[3] H.R. Hamedi, V. Kudriašov, N. Jia, J. Qian, G. Juzeliūnas, Opt. Lett. **46**, 4204 (2021).

Ar^{2+} jono jonizacija elektronais

Electron-impact ionization of Ar^{2+}

Aušra Kynienė, Valdas Jonaukas
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
ausra.kyniene@tfai.vu.lt

Argonas, vienas iš gausiausiai paplitusių cheminių elementų visatoje: Ar linijos aptinkamos planetinių ūkų centrinėse žvaigždėse, baltosiose nykštukėse ir saulės vainike [1-3]. Modeliuojant linijų formavimąsi spektruose svarbu nustatyti krūvio pasiskirstymą plazmoje. Krūvio pasiskirstymą plazmoje nulemia du pagrindiniai procesai – tiesioginė jonizacija ir rekombinacija.

Eksperimentiniai jonizacijos skerspjūvių matavimai Ar^{2+} jonui buvo atlikti, tačiau matavimų duomenys skyrėsi esant didesnėms susidūrimų energijoms ir eksperimentų skirtumo priežastys nebuvo identifikuotos. Skirtumas buvo siejamas su metastabilių būsenų buvimu jonų pluoštelyje.

Teoriniai skaičiavimai buvo pagrinde paremti pusiau empyriniais metodais. Loch ir kt. [4] buvo atlikti skaičiavimai viengubos jonizacijos pilnųjų skerspjūvių iškraipytųjų bangų artinyje nagrinėjant šuolius tarp konfigūracijų. Gautas geras sutapimas su eksperimentiniais jonizacijos skerspjūviais prie didelių elektrono energijų. Tačiau eksperimentiniai skerspjūviai buvo didesni ties maksimalia jonizacijos skerspjūvių verte nei gauti teoriniai skaičiavimai.

Šiame darbe buvo nagrinėta Ar^{2+} tiesioginė jonizacija (TJ) bei sužadinimai elektronais su po to sekančia autojonizacija (SA) iš pagrindinės $3s^23p^4$ konfigūracijos visų lygmenų iškraipytųjų bangų artinyje. Naudotos pataisytos Ar^{3+} lygmenų energijos, kad jos sutaptų su NIST pateiktomis energijų vertėmis.

Energijos lygmenys, elektrinių dipolinių šuolių ir Ožė šuolių tikimybės, kaip ir sužadinimo elektronais ir jonizacijos skerspjūviai buvo apskaičiuoti FAC paketu, kuriame realizuotas Dirako-Foko-Slaterio artinys [5]. Skerspjūviai buvo tyrinėti iškraipytųjų bangų ir vienkonfigūraciniame artiniuose.

Tiriant tiesioginę jonizaciją buvo nagrinėjama jonizacija iš $3s$ ir $3p$ sluoksnių. Sužadinimai elektronais tirti iš pagrindinės konfigūracijos $3s$ ir $3p$ sluoksnių :

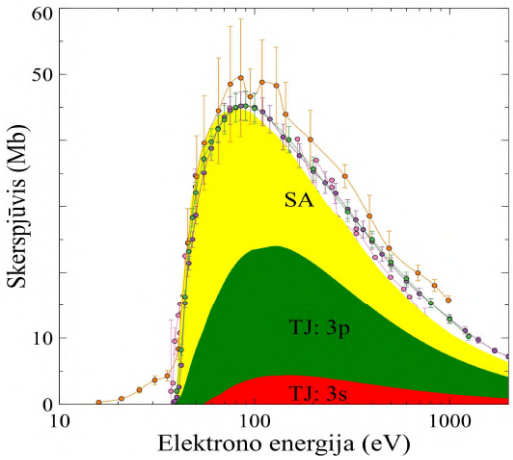
$$3s^23p^4 + e \rightarrow \begin{cases} 3s^13p^5 + e, \\ 3s^13p^43d + e, \\ 3s^13p^3nl + e, \end{cases} \quad (1)$$

ir

$$3s^23p^4 + e \rightarrow \begin{cases} 3s^23p^33d + e, \\ 3s^23p^3nl + e, \end{cases} \quad (2)$$

kur $n \leq 25$ ir $l \leq 4$. Įvertinti elektriniai dipoliniai ir Ožė šuoliai iš visų nagrinėtų 371 sužadintų konfigūracijų. Atsižvelgus į radiacinį slopinimą, sužadinimo-autojonizacijos skerspjūvis mažėja. Rezonansinė dviguba jonizacija šiame darbe nėra tirta, nes jos indėlis dažnai yra mažesnis už tiesioginę jonizaciją ir sužadinimo – autojonizacijos procesus.

Darbe parodyta, kad sužadinimas iš $3p$ sluoksnio duoda didelį indelį jonizacijos skerspjūviams prie mažų elektronų energijų. Gauti pilnieji viengubos jonizacijos skerspjūviai gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis (1 pav.). Didžiausią indėlį (70%) pilniems jonizacijos skrespjūviams ties maksimumu sudaro tiesioginės jonizacijos skerspjūviai.



1 pav. Tiesioginės jonizacijos ir sužadinimo-autojonizacijos indėlis pilniems jonizacijos skerspjūviams. Spalvotais apskritimais pavaizduoti eksperimentiniai duomenys [6-9].

Reikšminiai žodžiai: jonizacijos skerspjūviai, argonas, jonizacija, sužadinimai.

Literatūra

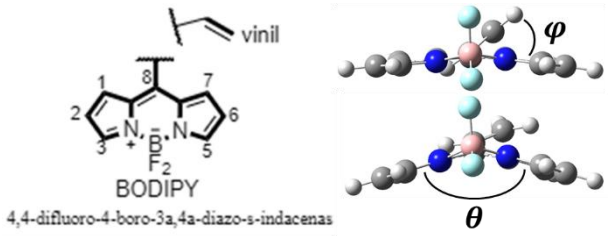
[1] K. Werner, et al., A&A **466**, 317-322 (2007).
[2] G. Del Zanna and T. N. Woods, A&A **555**, A59 (2013).
[3] G. Del Zanna and E.E. DeLuca, Astrophys. J. **852**, 52 (2018).
[4] S. D. Loch, et al., Phys. Rev. A **76**, 022706 (2007).
[5] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
[6] A. Muller, et al., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **13**, 1877-1899 (1980).
[7] D. W. Mueller, et al., Phys. Rev. A **31**, 2905 (1985)
[8] K. F. Man, et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **26**, 1365-1378 (1993).
[9] M. J. Diserens, et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **21**, 2129-2144 (1988).

8-vinil-BODIPY molekulės darinių modeliavimas tankio funkcionalo metodais

Modelling of 8-Vinyl-BODIPY Derivatives Using Density Functional Theory

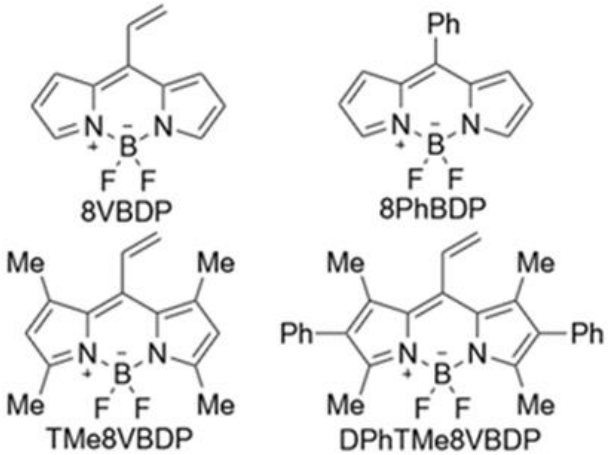
Delianas Palinauskas[1], Stepas Toliautas[2]
[1]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius
delianas.palinauskas@chgf.vu.lt

Molekulės, turinčios BODIPY (1 pav.) struktūrinį elementą gali būti naudojamos kaip fluorescuojantys dažikliai, kurie atlieka molekulinio zondo paskirtį. Šie molekuliniai zondai gali matuoti mikroskopinę klampą ląstelės aplinkoje. Klampa yra svarbus rodiklis, kuris leidžia tirti ląstelės gyvybinius procesus ir gali indikuoti patologinius pokyčius [1]. Sužadinta molekulinio rotoriaus molekulė paprastai išspinduliuoja fotoną, tačiau priklausomai nuo rotoriaus grupės pasisukimo sužadinta molekulė gali pereiti į nespinduliuojančią būseną. Jei dėl didesnės klampos rotoriaus grupės sukimasis apribojamas, vidutinė spinduliavimo trukmė padidėja [2]. Toks principas panaudojamas klampos matavimui.



1 pav. Kairėje – BODIPY molekulės struktūra su pakaitų pozicijomis. Dešinėje – BODIPY molekulės struktūra su nagrinėjamais dvisieniais kampais

Šiame darbe buvo teoriškai nagrinėjamos 8VBDP, 8FeBDP, TMe8VBDP, DPhTMe8VBDP (2 pav.) molekulės, turinčios 8-vinil-BODIPY fragmentą, kurio 8 (*mezo*) padėtyje esanti vinilo grupė atlieka rotoriaus vaidmenį.



2 pav. Tyrimo metu nagrinėjamos molekulės ir jų pavadinimų sutrumpinimai

Atlikus 8VBDP molekulės pagrindinės būsenos (S0) ir sužadintos būsenos (S1) energijos priklausomybės nuo kampo tarp *mezo* vinilo grupės ir BODIPY plokštumos skaičiavimus paaiškėjo, kad sužadintos būsenos BODIPY fragmento lenkimasis sumažina vinilo grupės sukimosi energetinį barjerą. Taip pat iš šios molekulės sužadintos būsenos energetinio minimumo (S1m) vyksta efektyvi nespindulinė relaksacija, t. y. šis minimumas yra artimas kūginei sąnkirtai. Nagrinėjant TMe8VBDP (2 pav.) molekulės sužadintos būsenos minimumo struktūrą paaiškėjo, kad metilo grupių sterinė sąveika neturi įtakos BODIPY plokštumos susilenkimo kampui (θ) bei vinilo grupės pasisukimui (φ), todėl ši molekulė relaksuoja nespinduliniu keliu. DFeTMe8VBDP molekulė sudaro tris rotamerus (P1, P2, P3), kurie tarpusavyje skiriasi ties 2 ir 6 BODIPY molekulės pozicijomis esančių fenilo grupių tarpusavio orientacija. P1 ir P3 rotamerų BODIPY plokštumos susilenkimo kampai (θ) bei vinilo grupės pasisukimo kampai (φ) labiau panašesni į 8VBDP molekulės nei į 8FeBDP molekulės (1 lentelė), todėl fenilo grupės neturi įtakos sužadintos būsenos molekulės deformacijai, kuri skatina nespindulinę relaksaciją. P2 molekulės BODIPY plokštumos susilenkimo kampai (θ) bei vinilo grupės pasisukimo kampai (φ) panašesni į 8FeBDP molekulės nei į 8VBDP, todėl galima daryti prielaidą, kad ši molekulė turi antrąjį sužadintos būsenos energetinį minimumą (S1r).

1 lentelė. Nagrinėjamų dvisienių kampų reikšmės

Kampas	8VBDP			DFeTMe8VBDP1		DFeTMe8VBDP3	
	S0	S1m	S1r	S0	S1m	S0	S1m
φ	-39,20	-15,09	-	-59,69	-16,45	-57,32	-17,89
θ	151,31	139,58	-	156,58	144,25	157,03	143,79
Kampas	8FeBDP			TMe8VBDP		DFeTMe8VBDP2	
	S0	S1m	S1r	S0	S1m	S0	S1m
φ	-53,19	-48,05	-5,61	-60,21	-13,46	-62,69	-45,56
θ	154,74	150,78	128,98	156,87	140,11	157,25	157,45

Reikšminiai žodžiai: tankio funkcionalo teorija, M06-2X, cc-pVDZ, BODIPY, molekuliniai rotoriai, klampa

Literatūra

[1] A. Vyšniauskas, M.K. Kuimova, A twisted tale: measuring viscosity and temperature of microenvironments using molecular rotors, International Reviews in Physical Chemistry. 37 (2018) 259–285.
[2] S. Toliautas, J. Dodonova, A. Žvirblis, I. Čiplys, A. Polita, A. Devižis, S. Tumkevičius, J. Šulskus, A. Vyšniauskas, Enhancing the Viscosity-Sensitive Range of a BODIPY Molecular Rotor by Two Orders of Magnitude, Chem. Eur. J. 25 (2019) 10342–10349.

Skirtingų skaitinių optinio atsako modeliavimo metodų tinkamumo pasirinktoms fotoninėms struktūroms tyrimas

Investigation of the suitability of different numerical simulation methods for determination optical response of the selected photonic structures

Tomas Klinavičius[1], Tomas Tamulevičius[1,2]
[1]Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423
[2]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
tomas.klinavicius@ktu.lt

Fotonika yra fizikos sritis tirianti šviesą – jos generavimą, detektavimą bei manipuliavimą ja. Manipuliavimas šviesa dažniausiai yra atliekamas naudojant įvairios konstrukcijos bei sudėties fotoninius prietaisus [1]. Jiems formuoti dažniausiai naudojamos įvairios litografijos bei savirankos technologijos. Fotoninio prietaiso optinis atsakas yra nulemiamas jo konstrukcijos bei naudojamų medžiagų savybių. Todėl prieš gaminant prietaisą reikia tinkamai parinkti jį sudarančių elementų geometriją bei naudojamų medžiagų optines konstantas. Bendru atveju prietaiso optinį atsaką galima įvertinti modeliuojant prietaiso sąveiką su elektromagnetine spinduliuote naudojant Maksvelo lygtis [2].

Maksvelo lygtys gali būti sprendžiamos arba analitiškai, arba skaitiškai. Analitinis sprendimo būdas yra sudėtingas ir dėl to tinkamas tik labai paprastiems atvejams, todėl praktikoje dažniausiai naudojami įvairūs tiek pusiau analitiniai, tiek pilnai skaitiniai jų sprendimo metodai. Šie metodai gali būti skirstomi pagal savo savybes – laikiniai (modeliuojamas prietaiso atsaką į išorinį lauką laike) arba dažniniai (modeliuojamas laike suvidurkintas atsakas vienam dažniui), realios erdvės (prietaisas diskretizuojamas realioje erdvėje) arba Furje erdvės (prietaisas aprašomas Furje skleidiniu) [3]. Skirtingi metodai pasižymi skirtingais pranašumais bei trūkumais, tokiais kaip skaičiavimo sparta, kompiuterio atminties poreikis bei gebėjimas modeliuoti realaus dydžio prietaisus skersinėje bei išilginėje kryptyse. Mokslinėje literatūroje fotoninių elementų modeliavimui dažnai naudojami baigtinių skirtumų metodai bei griežtai susietų bangų analizė [2].

Fotoninės struktūros gali būti pagamintos iš įvairių medžiagų – dielektrikų, puslaidininkių bei metalų. Visos šios medžiagos pasižymi savitomis optinėmis savybėmis, aprašomomis lūžio rodiklio dispersija. Lūžio rodiklis yra kompleksinis dydis, kurio menamoji dalis aprašo spinduliuotės sugertį medžiagoje, o realioji dalis aprašo spinduliuotės fazinio greičio vakuume ir toje medžiagoje santykį. Optikoje dielektrikais yra laikomos medžiagos nepasižyminčios šviesos sugertimi, pvz.: lydytas kvarcas, tad jų lūžio rodiklis turi tik realiąją dalį. Puslaidininkiai, ypač legiruoti, turi ir menamąją lūžio dalį, jos dydis priklauso nuo legiravimo. Metalai pasižymi didele menamąja lūžio rodiklio dalimi [4]. Pastaruoju metu itin didelio susidomėjimo sulaukia plazmonų rezonansu pasižymintys metalai Ag, Au, Ca ir kt.

Priklausomai nuo struktūros, fotoniniai prietaisai taip pat gali būti dvimačiai (plokšti) arba trimačiai (tūriniai). Jų struktūra gali būti sudėtinga arba paprasta bet kurioje kryptyje – tiek skersinėje tiek ir išilginėje. Pagal savo atsaką jie gali būti arba rezonansiniai (pasižymintys specifiniais dažniais, kuriems prietaiso pralaidumas arba atspindys nuo jo smarkiai skiriasi nuo kitų dažnių) arba nerezonansiniai [2].

Vienas iš paprasčiausių baigtiniais skirtumais pagrįstų skaitinių metodų diferencialinėms lygtims bei jų sistemoms spręsti yra dažninis baigtinių skirtumų metodas. Šis pilnai skaitinis metodas aprašo modeliuojamą erdvę diskrečiuose erdvės taškuose ir tuomet transformuoja Maksvelo lygtis į algebrinių tiesinių lygčių sistemą, užrašomą matricine lygtimi:

$$Ax = b$$

kur A – modeliuojamą erdvę aprašanti kvadratinė matrica, x – ieškomą elektrinį lauką aprašantis vektorius, b – modeliuojamą erdvę apšviečiančios spinduliuotės vektorius. Išsprendus matricinę lygtį gaunamas elektrinio lauko pasiskirstymas struktūroje [5].

Griežtai susietų bangų analizės metodas yra Furje erdvės pusiau analitinis metodas kuris naudodamas diskrečiąją Furje transformaciją transformuoja Maksvelo lygtis į Furje erdvę ir aproksimuoja modeliuojamą erdvę skersinėse kryptyse Furje skleidiniu, o išilginėje kryptyje Maksvelo lygtys sprendžiamos analitiškai [6].

Šiame darbe buvo palyginti keleto skirtingų konstrukcijų bei iš skirtingų savybių medžiagų suformuotų fotoninių prietaisų, aptartais metodais sumodeliuoti, optiniai atsakai bei palygintas rezultatų tikslumas bei atsižvelgta į modeliavimo spartą.

Reikšminiai žodžiai: fotonika, skaitiniai metodai, baigtiniai skirtumai, griežtai susietų bangų analizė.

Literatūra

[1] C. Yeh. *Applied Photonics* (Michigan, Academic Press, 2012).
[2] B. Gallinet, et al., Laser Photonics Rev. **9**, 7 (2015).
[3] M. N. O. Sadiku. *Computational Electromagnetics with MATLAB* 4th edition (Taylor & Francis, Boca Raton, 2019)
[4] B. E. A. Saleh and M. C. Teich., *Fundamentals of Photonics*, 2nd edition (Wiley, Hoboken, New Jersey, 2007)
[5] R. C. Rumpf, Prog. Electromagn. Res. B. **36** (2012)
[6] M. G. Moharam, et al., J. Opt. Soc. Am. A. **12**, 5 (1995)

Elektroninio sužadinimo dinamikos dvimatėse sistemose aprašymas pasitelkiant neuroninius tinklus

Using neural networks to describe the dynamics of electron excitation in two dimensional systems

Pranas Juknevičius, Andrius Gelžinis, Jevgenij Chmeliov
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
pranas.juknevicius@gmail.com

Įvadas. Bandydami aprašyti kompleksinės sistemos evoliuciją mokslininkai dažniausiai kuria supaprastintus modelius, kad sistemą būtų galima aprašyti matematinėmis lygtimis. Tačiau dažniausiai tos lygtys išlieka per sudėtingos spręsti analitiškai, tad tokiu atveju yra pasitelkiami skaitiniai metodai. Jais galima pasiekti kiek norima tikslų rezultatą, tačiau tam reikia daug laiko arba didelių kompiuterinių išteklių. Alternatyva šiam uždavinio sprendimo būdui yra naudoti dirbtinį neuroninį tinklą, kuris išmoktų susieti sistemą aprašančius parametrus su sistemos evoliuciją nusakančiais parametrais. Duomenis, kuriais neuroninis tinklas būtų apmokomas, galima gauti iš eksperimentinių matavimų arba skaitiniais metodais sprendžiant sistemą aprašančias lygtis. Jeigu neuroniniam tinklui pavyktų išmokti sąsają tarp sistemos parametrų ir jos laikinės kinetikos, galėtumėme greitai ir mažais kompiuteriniais ištekliais prognozuoti sistemos laikinę evoliuciją. Taigi šiame darbe taikysime neuroninius tinklus siekdami aprašyti elektroninio sužadinimo dinamiką dvimatėse sistemose.

Naudoti metodai. Šiame darbe nagrinėjome modelinę sistemą. Panašūs modeliai yra taikomi modeliuojant pernašą tarp realių fotosintetinių kompleksų [1]. Ši sistema yra sudaryta iš mazgų, kurie gali:

1. būti sužadinti;
2. perduoti savo sužadinimą artimiausiems kaimynams;
3. atiduoti sužadinimą aplinkai.

Mazgai yra dviejų tipų: „žali“ ir „raudoni“. Raudoni ir žali mazgai skiriasi savo sužadinimo perdavimo spartomis, relaksacijos sparta, savo skaičiumi. Visi šie mazgai sudaro 10x10 kvadratinę gardelę. Visa gardelė yra apibūdinama 4 parametrais:

1. k_{hop} šuolio sparta tarp 2 vienodų mazgų;
2. k_{RG} šuolio sparta tarp raudono ir žalio mazgų;
3. k_{trap} raudono mazgo relaksacijos sparta;
4. n_r vidutinis raudonų mazgų skaičius gardelėje.

Spręsdami sistemą aprašančią pagrindinę kinetinę lygtį ir susumavę visų taškų užpildas gauname sistemos gesimo kreivę. Prie jos priderinus reikiamos formos funkciją, gauname parametrus, kurie nusako sistemos kinetiką. Taip gauname duomenis, iš kurių mokysis neuroninis tinklas. Neuroniniam tinklui paduodami gardelę apibūdinantys parametrai, ir jis turi atspėti, kokie bus priderintos funkcijos koeficientai.

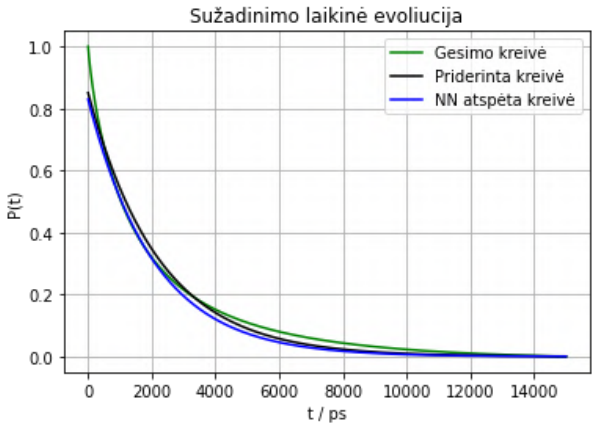
Skaičiavimams buvo naudojamas nuoseklus neuroninis tinklas sudarytas iš 9 sluoksnių su „relu“ aktyvacijos funkcijomis bei naudojami grupelių normalizacijos (angl. *batch normalization*) sluoksniai. Neuroninis tinklas buvo treniruojamas su ~30000 duomenų rinkiniu.

Rezultatai. Rezultatai priklauso nuo derinamos funkcijos formos.

1 lentelė. Skirtingų derinamų funkcijų palyginimas. Skirtumas pateiktas vidutiniu kvadratiniu nuokrypiu.

Pasirinkta funkcija	*Pasirinktos priderintos funkcijos ir gesimo kreivės skirtumas*	*Neuroninio tinklo spėjimo ir priderintos kreivės skirtumas*	*Neuroninio tinklo spėjimo ir gesimo kreivės skirtumas*
$Aexp(Bt)$	$3{,}395 \cdot 10^{-4}$	$2{,}43 \cdot 10^{-3}$	$9{,}86 \cdot 10^{-3}$
$\mathrm{Aexp}(Bt^C) + D\mathrm{exp}\,(Et^F)$	$3{,}023 \cdot 10^{-5}$	$3{,}49 \cdot 10^{-2}$	$2{,}69 \cdot 10^{-2}$

Kaip matyti iš 1 lentelės, daugiau koeficientų turinti funkcija yra tiksliau priderinama prie sužadinimo gesimo kreivės. Tačiau neuroniniam tinklui yra sunkiau atspėti didesnį skaičių koeficientų, todėl skirtumas tarp neuroninio tinklo spėjamos funkcijos ir suskaičiuotos sužadinimo gesimo kreivės nesumažėja.



1 pav. Sužadinimo gesimo kreivė, priderinta kreivė (eksponentė) ir neuroninio tinklo spėjama kreivė.

Reikšminiai žodžiai: modeliavimas, neuroniniai tinklai, sužadinimas.

Literatūra

[1] J. Chmeliov, G. Trinkunas, H. van Amerongen, L. Valkunas, J. Am. Chem. Soc. **136**, 8963−8972, 2014.

Trupmeninio Gauso triukšmo sąlygoti taškiniai procesai

Point processes driven by fractional Gaussian noise

Aleksejus Kononovicius, Rytis Kazakevičius, Bronislovas Kaulakys
Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
aleksejus.kononovicius@tfai.vu.lt

Modeliuojant daugelį sistemų daroma Markovo prielaida. Tariama, kad sistemos ateičiai svarbi tik dabartinė sistemos būsena. Visgi yra sistemų, kurių dinamikai įtaką turi ir sistemos trajektorija (ankstesnės būsenos). Sakoma, kad sistema turi ilgą atmintį, jei jos dinamiką nusakančių laiko eilučių autokoreliacijos funkcijos gęsta laipsniškai lėtai. Įdomu tai, kad tokių sistemų sutinkame tiek fizikoje, tiek kituose moksluose.

Egzistuoja modeliai (pvz., ARCH modeliai ar trupmeninis Brauno judėjimas) kurie ilgą atmintį įskaito tiesiogiai. Tuo tarpu mūsų grupės kuriami modeliai ilgą atmintį atkuria nepažeisdami Markovo prielaidos [1]. Pirmieji mūsų grupės modeliai buvo paremti taškiniu procesu, kuris buvo pasiūlytas [2] darbe. Vėliau šis modelis buvo apibendrintas ir užrašytas kaip netiesinė stochastinė diferencialinė lygtis, kurios laipsninės statistinės savybės buvo detaliai išanalizuotos tiek analiziškai, tiek skaitmeniškai [1]. Šiame darbe mes apibendriname šį taškinį procesą pažeisdami Markovo prielaidą.

Taškinis procesas yra sudarytas iš daugelio atskirų įvykių (pvz., fotono kontaktas su detektoriumi ar sandoris finansų rinkose), kurių profilių (išmatuojamų įvykio poveikių) suma nusako proceso laiko eilutę:

$$x(t) = \sum_k A_k \left(t - t_k\right). \tag{1}$$

Čia $A_k(t)$ yra k-tojo įvykio, kuris įvykio laiku t_k, profilis. Paprastumo dėlei tarkime, kad visų įvykių profiliai yra vienodi ir yra Kronekerio delta funkcijos formos, $A_k(t) = \delta(t)$. Tokiu atveju taškinį procesą pilnai nusako įvykių laikų rinkinys $\{t_k\}$ arba tarplaikių rinkinys $\{\tau_k = t_{k+1} - t_k\}$.

[2] darbe pasiūlyta tarplaikių pokyčius modeliuoti naudojant standartinį nekoreliuotą Gauso triukšmą, ε_k:

$$\tau_{k+1} = \tau_k + \sigma \cdot \varepsilon_k. \tag{2}$$

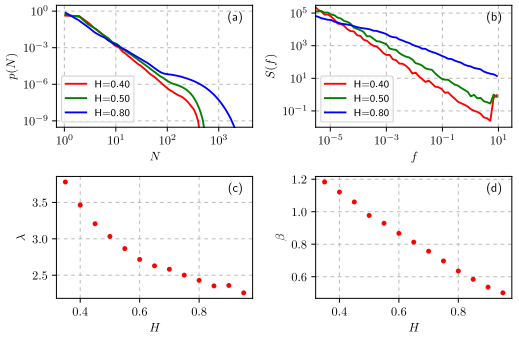
Pagal apibrėžimą tarplaikiai negali būti neigiami, tad sprendžiant šią iteracinę lygtį yra naudojama minkšta atspindinti kraštinė sąlyga iš mažų verčių pusės: jei $\tau_k < \tau_{min}$, tai $\tau_k = \tau_{min}$ (čia τ_{min} yra mažas teigiamas skaičius). Tarplaikių difuziją būtina apriboti ir iš didelių verčių pusės. Tam taip pat naudojame minkštą atspindinčią kraštinę sąlygą ties τ_{max}. Tokiu atveju τ_k procesas tampa stacionarus, o jo skirstinys yra tolygus intervale $[\tau_{min}, \tau_{max}]$. Šis elementarus taškinis procesas yra įdomus, nes jo laiko eilutė $x(t)$ pasižymi ilga atmintimi ($S(f) \sim 1/f$), nors Markovo prielaida nėra pažeidžiama.

Mes nekoreliuotą Gauso triukšmą pakeičiame trupmeniniu Gauso triukšmu (su Hursto rodikliu H):

$$\tau_{k+1} = \tau_k + \sigma \cdot \varepsilon_k^{(H)}. \tag{3}$$

$H = 0.5$ atvejis yra ekvivalentus originaliam modeliui su nekoreliuotu triukšmu. $H < 0.5$ atveju procesas yra anti–koreliuotas, o $H > 0.5$ atveju – koreliuotas. Toks modelio apibendrinimas leidžia nagrinėti modelį, kuriame Markovo prielaida pažeidžiama tolydžiai.

Mes atlikome skaitmeninę modelio laiko eilučių analizę $H \in [0.35, 0.95]$ srityje. Mažesnėms H vertėms triukšmo anti–koreliacija lemia lėtą τ_k difuziją. Didelių verčių atveju dėl stiprios triukšmo koreliacijos procesas labai ilgiems laiko tarpams užstringa greta vienos arba kitos kraštinės sąlygos.



1 pav. Triukšmo Hursto rodiklio įtaka modelio įvykių skaičiaus skirstiniui ((a), (c)) ir $x(t)$ galios spektriniam tankiui ((b), (d)).

Paveiksle matome, kad triukšmo H turi netrivialią įtaką įvykių skaičiaus skirstiniui ir $x(t)$ galios spektriniam tankiui. Abi šios statistinės savybės turi laipsninį pobūdį: $p(N) \sim N^{-\lambda}$ ir $S(f) \sim f^{-\beta}$. Laipsnio rodikliai, λ ir β, priklauso nuo H.

Skaitmeninis apribotos trupmeninės difuzijos savybių tyrimas yra aktuali pastarojo meto problema [3–5]. Mūsų skaitmeninė analizė patvirtina anksčiau gautus rezultatus, bei juos išplečia į įvykių erdvę. Apibendrintas modelis leis tyrinėti kaip kinta modelio ilgos atminties savybės palaipsniui pažeidžiant Markovo prielaidą, bei ieškoti būdų kaip atskirti "tikros" ilgos atminties procesus nuo Markovo procesų.

Reikšminiai žodžiai: ilga atmintis, taškiniai procesai, trupmeninė difuzija

Literatūra

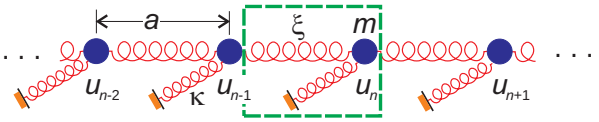
[1] R. Kazakevičius *et al.*. Entropy 23: 1125 (2021).
[2] B. Kaulakys, T. Meskauskas. Phys Rev E 58: 7013–7019 (1998).
[3] T. Guggenberger *et al.*. New J Phys 21: 022002 (2019).
[4] A. Wada *et al.*. J Stat Mech 2019: 033209 (2019).
[5] T. Vojta *et al.*. Phys Rev E 102: 032108 (2020).

Neigiamas mechaninės bangos energijos srautas

Negative flow of energy in a mechanical wave

Algirdas Matulis[1], Artūras Acus[2]
[1]Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras, Puslaidininkių fizikos institutas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius
[2]Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius
arturas.acus@tfai.vu.lt

Aprašoma klasikinė sistema [1], kuri yra kvantinės sistemos, pasižyminčios neigiamu tikimybės srautu, analogas. Sistemą sudaro tarpusavyje spyruoklėmis sujungtų rutuliukų grandinėlė, kurioje kiekvienas rutuliukas papildoma spyruokle dar yra prijungtas prie fiksuotų atramų.



Dėl papildomai prijungtų spyruoklių atsiranda plintančių išilgai grandinėlės bangų spektre draustinis dažnių ruožas ir dispersija

$$\omega = \sqrt{4\omega_0^2 \sin^2(ka/2) + \Omega^2}, \tag{1}$$

kur

$$\Omega^2 = \kappa/m \qquad \text{and} \qquad \omega_0^2 = \xi/m. \tag{2}$$

Čia k žymi bėgančios bangos skaičių. Kitų pažymėjimų prasmė paaiškina iš tiriamos sistemos piešinys viršuje. Parodyta, kad perėjus prie tolydinės ribos ir nagrinėjant dviejų bangų, kurių fazės φ_1, φ_2, o amplitudės 1 ir A superpoziciją, tokioje sistemoje gaunamas bangos energijos srautas:

$$J_0 = \frac{\pi^2 J}{4\omega_1 k_1} = \frac{\pi^2}{4}(\sin\varphi_1 + f\sin\varphi_2)(\sin\varphi_1 + g\sin\varphi_2), \tag{3}$$

kur

$$f = \frac{\omega_2}{\omega_1}A, \qquad g = \frac{k_2}{k_1}A = \frac{v_{\mathrm{gr},2}}{v_{\mathrm{gr},1}}f. \tag{4}$$

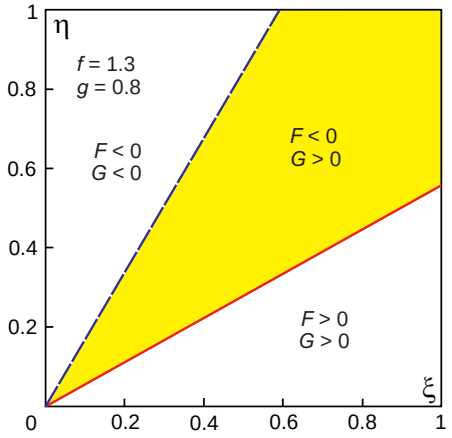
Parinkus tam tikras f ir g vertes jis gali virsti neigiamu. Iš tiesų, pažymėjus

$$\sin\varphi_1 = 2\xi/\pi, \quad \sin\varphi_2 = 2\eta/\pi. \tag{5}$$

galime pakeisti sudėtingą išraišką (3) daugianariu:

$$J_0 = (\xi - f\eta)(\xi - g\eta) = F \cdot G \tag{6}$$

kuriame dydžių kitimas $0 \leqslant \xi, \eta \leqslant 1$ yra apribotas kvadrato. Kadangi (6) yra dviejų narių sandauga jų sandauga virsta nuliu kai vienas iš narių tampa nulis, o tai ir žymi srauto su skirtingais ženklais ribą parodytą paveiksle žemiau.



Nuspalvintas plotas tarp dviejų tiesių (mėlynos brūkšniuotos ir raudonos ištisinės) yra parametrų sritis, kurioje galima stebėti neigiamą energijos srautą, nes čia (6) formulės daugikliai (F arba G) yra skirtingų ženklų. Iš paveikslo taip pat aišku, kad plotas gaunamas didžiausias kai koeficientų f ir g vertės skiriasi daugiausia.

Apskaičiavę taip pat gavome, kad dviejų interferuojančių bangų atveju šio neigiamo srauto dydis visa eile viršija neigamo tikimybės srauto dydį kvantiniame uždavinyje [2, 3, 4, 5].

Taip pat yra apskaičiuota klasikinė sistemą aprašančių lygčių Gryno funkcija ir parodyta, kad neigiamo energijos srauto atsiradimas įmanomas ir tada, kai sistema žadinama dviem trumpais nuosekliais impulsais. Ištirtoje klasikinėje sistemoje atsirandantis neigiamo energijos srauto reiškinys aiškinamas energijos išsišakojimu į lokalines modas. Tai patvirtina gauti žadinamo išorine jėga disipacinio osciliatoriaus rezultatai. Parodyta, kad net tokioje paprastoje sistemoje įmanomas atbulinis (tiek momentinis, tiek ir vidutinis) energijos srautas.

Reikšminiai žodžiai: Banga, dispersija, energija, neigiamas srautas, 1D gardelė, osciliatorius

Literatūra

[1] A. Matulis and A. Acus, Negative flow of energy in a mechanical wave Lith. J. Phys. **60**, 205–216 (2020)
[2] A. J. Bracken and G. F. Melloy, Probability backflow and a new dimensionless quantum number, J. Phys. A **27**, 2197–2211 (1994).
[3] J. M. Yearsley, J. J. Halliwell, R. Hartshorn, and A. Whitby, Analytical examples, measurement models, and classical limit of quantum backflow, Phys. Rev. A **86**, 042116–1–13 (2012).
[4] M. V. Berry, Quantum backflow, negative kinetic energy, and optical retro-propagation, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 415302 (2010).
[5] Anthony Allan D. Villanueva, The negative flow of probability, American Journal of Physics **88**, 325–333 (2020).

Bendro pavidalo bekoordinatės multivektorių eksponenčių formulės Cliffordo algebrose $Cl_{p,q}$ kai $p+q=3$

Coordinate-free exponentials of general multivector in $Cl_{p,q}$ algebras for $p+q=3$

Artūras Acus[1], Adolfas Dargys[2]
[1]Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius
[2]Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras, Puslaidininkių fizikos institutas, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius
arturas.acus@tfai.vu.lt

Geometrinė algebra (matematikų vadinama Cliffordo algebra) apibendrina gerai žinomą vektorinį skaičiavimą, kuris plačiai naudojamas fizikoje. Jei vektorinis skaičiavimas tinka tik trimatėms erdvėms, tai įvedus multivektorius su geometrine algebra skaičiavimus galima atlikti bet kokios dimensijos ir signatūros erdvėse, tarp jų ir reliatyvistiniame erdvėlaikyje.

Bendros formos multivektoriaus eksponentės radimas geometrinėje algebroje tebėra neišspręsta ir labai aktuali problema tiek matematikoje, tiek fizikoje [2, 3]. Tam pakanka prisiminti diferencialines lygtys, kurių sprendiniai yra eksponentės nuo multivektoriaus. Pranešime pateikiamos ir įrodomos bendriausių multivektorių eksponenčių išraiškos algebroms $Cl_{0,3}$, $Cl_{3,0}$ bei $Cl_{1,2}$ ir $Cl_{2,1}$, kurias kiek anksčiau esame užrašę koordinatiniu pavidalu [1]. Algebra $Cl_{1,2}$ yra izomorfiška $Cl_{3,0}$, todėl bekoordinatiniu pavidalu užrašytos formulės joms yra vienodos (tačiau koordinatiniai pavidalai skiriasi ženklais). Pranešime yra pateikiamos visų išvardytų algebrų eksponenčių bekoordinatinės išraiškos.

Bekoordinatiniu pavidalu bendriausią multivektorių $n=3$ algebrose galima užrašyti kaip skaliaro a_0, vektoriaus $\mathbf{a}$, bivektoriaus $\mathcal{A}$ ir pseudoskaliaro $a_{123}I$ sumą

$$\mathsf{A} = a_0 + \mathbf{a} + \mathcal{A} + a_{123}I\,.$$

Bivektorių $\mathcal{A}=\mathbf{a}_1\wedge\mathbf{a}_2$ galima įsivaizduoti kaip orientuotos plokštumos, statmenos vektorių $\mathbf{a}_1$ ir $\mathbf{a}_2$ vektorinei sandaugai, plotelį. Pseudoskaliaras I yra suprantamas kaip 3D erdvės vienetinis orientuotas tūrio elementas. Paprasčiausia eksponentės formulė gaunama $Cl_{0,3}$ algebrai. Ji tokia paprasta, kad tinka užrašyti ir tezių tekste:

$$\exp(\mathsf{A}) = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{a_0}\Big(\mathrm{e}^{a_{123}}(1+I)\Big(\cos a_+ + \frac{\sin a_+}{a_+}(\mathbf{a}+\mathcal{A})\Big) + \mathrm{e}^{-a_{123}}(1-I)\Big(\cos a_- + \frac{\sin a_-}{a_-}(\mathbf{a}+\mathcal{A})\Big)\Big).$$

Čia a_- ir a_+ yra skaliarai, o a_i ir a_{ij} – vektorių ir bivektorių projekcijos,

$$\begin{aligned} a_- &= \sqrt{-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}+\mathcal{A}\cdot\mathcal{A})+2I\mathbf{a}\wedge\mathcal{A}} \\ &= \sqrt{(a_3+a_{12})^2+(a_2-a_{13})^2+(a_1+a_{23})^2}, \\ a_+ &= \sqrt{-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}+\mathcal{A}\cdot\mathcal{A})-2I\mathbf{a}\wedge\mathcal{A}} \\ &= \sqrt{(a_3-a_{12})^2+(a_2+a_{13})^2+(a_1-a_{23})^2}\,, \end{aligned}$$

Ženklai $\cdot$ bei $\wedge$ šioje formulėje žymi atitinkamai vidinę (skaliarinę, simetrinę) ir išorinę (vektorinę, antisimetrinę) sandaugas. Tuo tarpu paprastą daugybą reikia suprasti kaip geometrinę sandaugą, kuri savyje apjungia dvi prieš tai paminėtas sandaugas.

Panašios elegantiškos formulės gaunamos ir $Cl_{3,0}$ bei $Cl_{2,1}$ algebroms.

Pavyzdys. Užrašykime eksponentę multivektoriui $\mathsf{A} = -8 - 6\mathbf{e}_2 - 9\mathbf{e}_3 + 5\mathbf{e}_{12} - 5\mathbf{e}_{13} + 6\mathbf{e}_{23} - 4\mathbf{e}_{123}$, kur $\{\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_{ij}, I=\mathbf{e}_{123}\}$ žymi, atitinkamai, bazinius vektorius, bivektorius ir bazinį trivektorių. Gauname $a_- = \sqrt{53}$, $a_+ = \sqrt{353}$. Visas atsakymas yra

$$\begin{aligned} \exp(\mathsf{A}) = {} & \tfrac{\mathrm{e}^{-8}}{2}\Big(\mathrm{e}^4(1-\mathbf{e}_{123}) \\ & \times\Big(\cos\sqrt{53}+\tfrac{\sin\sqrt{53}}{\sqrt{53}}(-6\mathbf{e}_2-9\mathbf{e}_3+5\mathbf{e}_{12}-5\mathbf{e}_{13}+6\mathbf{e}_{23})\Big) \\ & + \mathrm{e}^{-4}(1+\mathbf{e}_{123}) \\ & \times\Big(\cos\sqrt{353}+\tfrac{\sin\sqrt{353}}{\sqrt{353}}(-6\mathbf{e}_2-9\mathbf{e}_3+5\mathbf{e}_{12}-5\mathbf{e}_{13}+6\mathbf{e}_{23})\Big)\Big). \end{aligned}$$

Norėdami gauti šį atsakymą skaitiškai šešių ženklų tikslumu (t.y. apytiksliai) pasinaudodami eksponentės eilutės kurios elementai yra multivektoriai, skleidiniu turėtume sumuoti 70 tos eilutės narių. Maža to iš pradžių matytume, kad sumuojant vis daugiau narių rezultatas nepaprastai sparčiai didėja, ir tik sumuojant toliau ima artėti prie tikrosios vertės. Priminsime, kad eksponentės eilutės konvergencijos radiusas yra begalinis, todėl rezultatas, griežtai kalbant, negali diverguoti.

Pranešime pateikiamas formules lengva suprogramuoti, ką mes ir realizavome geometrinės algebros skaičiavimams skirtame programoje [4]. Žinant eksponenčių išraiškas jau nesunku užrašyti ir tikslias hiperbolinių ir trigonometrinių (pastarąsias galima užrašyti tik $Cl_{3,0}$ ir $Cl_{1,2}$ algebrose) funkcijų formules.

Reikšminiai žodžiai: Geometrinė (Cliffordo) algebra, multivektorių eksponentės, kompiuterinės algebros sistema

Literatūra

[1] A. Dargys and A. Acus, Exponentials of general multivector (MV) in 3D Clifford algebras, Nonlinear Analysis: Modelling and Control (accepted) (2021).
[2] J. M. Chappell, A. Iqbal, L. J. Gunn, and D. Abbott, Functions of multivector variables, PLoS ONE **10**(3), 1–21 (2015), Doi:10.1371/journal.pone.0116943.
[3] E. Hitzer and S. J. Sangwine, Exponential factorization and polar decomposition of multivectors in *Cl(p,q)*, $p+q\leq 3$, Submitted to Adv. Appl. Clifford Algebras (2019), http://vixra.org/abs/1911.0275.
[4] A. Acus and A. Dargys, *Mathematica* package, 2017, https://github.com/ArturasAcus/GeometricAlgebra.

Mažesnio už bangos ilgį periodo optinė gardelė šaltiesiems atomams

Subwavelength optical lattice for ultra-cold atoms

Domantas Burba[1], Mantas Račiūnas[1], Tomas Andrijauskas[1], Ian Spielman[2,3], Gediminas Juzeliūnas[1]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Joint Quantum Institute, University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA
[3]National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland 20899, USA
domantas.burba@ff.stud.vu.lt, gediminas.juzeliunas@tfai.vu.lt

Ultra-cold atoms in optical lattices represent a unique tool for simulating various condensed matter systems due to their wide tunability. This allows the realization of many paradigmatic Hamiltonians. One seeming limitation of optical lattices is that the spatial lattice period has an apparent lower limit of half the laser beam wavelength [1]. However, there are many methods of adding a subwavelength structure to the lattice, one of which shall be discussed here.

In this work, we consider the center of mass dynamics of atoms characterized by three internal states which are cyclically coupled by the laser beams accompanied by a recoil. It is shown that for zero detuning, the atom-light Raman coupling provides three independent sinusoidal lattices with a periodicity determined by the recoil wave-vector. The individual lattices are shifted by a third of the lattice constant. The atoms in each of these lattices are in different dressed states representing different superpositions of the atomic bare states.

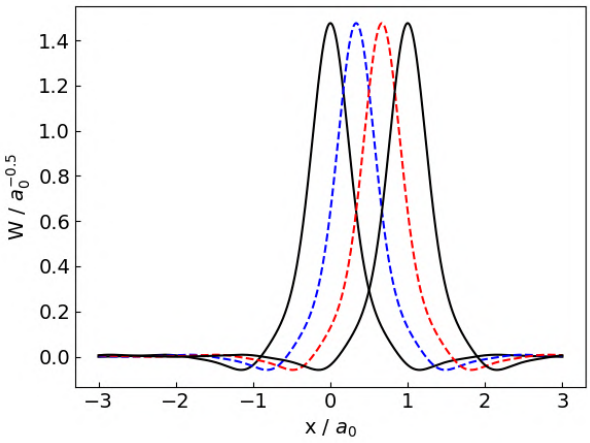


Fig. 1. Wannier functions of the lowest band for Raman coupling $\Omega = 1.00E_R$ and zero detuning ($\Delta_j = 0$).

Inclusion of the detuning induces transitions between atoms in different internal dressed states and thus enables transitions between atoms in different potential wells of the lattice. Depending on the type of the detuning, the transitions between the atomic Wannier functions of individual lattices corresponding to different internal dressed states can be described by both real and complex tunneling matrix elements. It is shown that detuning a single internal state yields real tunneling matrix elements, while antisymmetrically detuning two internal states leads to purely imaginary matrix elements. Thus, one can fully control the phases of the matrix elements. The direct and nearest neighbor tunneling may be calibrated by changing the Raman coupling and detuning in a certain way. For complex matrix elements, a non-zero magnetic flux is formed in the triangular plaquettes of a semi-synthetic lattice.

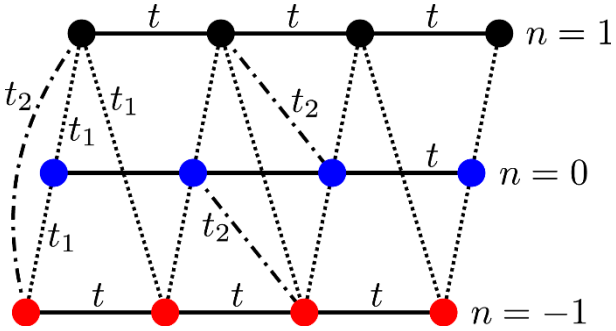


Fig. 2. Representation of the lattice involving direct tunneling t between neighboring sites corresponding to the same dressed states, as well as the nearest neighbor (NN) tunneling t_1 and next nearest neighbor (NNN) tunneling t_2. Only some of the NNN couplings t_2 are shown to maintain clarity.

The state-dependent Raman lattice considered here resembles a semi-synthetic zigzag ladder [2]. However, that system had a pre-existing state-dependent optical lattice and the tunneling in the synthetic dimension was induced by the Raman coupling, while our system's lattice potential comes from the cyclic Raman coupling and the synthetic tunneling is controlled by the atom-light detuning. Thus, one can engineer the necessary complex matrix elements by adjusting properly the detuning.

Keywords: optical lattice, ultra-cold atoms, cyclic coupling, atom-light detuning, dressed states, 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] E. Anisimovas, M. Račiūnas, C. Sträter, A. Eckardt, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas, Semi-synthetic zigzag optical lattice for ultracold bosons, Phys. Rev. A 94, 063632 (2016).

Pilna energijos konversija tarp orbitinį judesio kiekio momentą pernešančių lazerio pluoštų taikant koherentinį populiacijos pagavimą dvigubos-Λ atomų-šviesos sąveikos schemoje

Complete energy conversion between light beams carrying orbital angular momentum using coherent population trapping for a coherently driven double-Λ atom-light-coupling scheme

Hamid Reza Hamedi[1], Emmanuel Paspalakis[2], Giedrius Žlabys[1], Gediminas Juzeliūnas[1], and Julius Ruseckas[1]
[1]Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Sauletekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania
[2]Materials Science Department, School of Natural Sciences, University of Patras, Patras 265 04, Greece
giedrius.zlabys@tfai.vu.lt

The interaction of coherent light with atomic systems allows observation of several important and interesting quantum interference effects such as coherent population trapping (CPT) [1], electromagnetically induced transparency (EIT) [2], and stimulated Raman adiabatic passage (STIRAP) [3]. These phenomena are based on the coherent preparation of atoms in a so-called dark state which is immune against the loss of population through spontaneous emission.

A light beam can carry orbital angular momentum (OAM) due to its helical wave front [4]. Such a light beam with the spiral phase has an optical OAM. The phase singularity at the beam core of the twisted beam renders its donut-shaped intensity profile. A number of interesting effects appear when this type of optical beam interacts with atomic systems. Among them optical vorticities of slow light [5, 6] have generated considerable interest, as the OAM brings an additional degree of freedom in the manipulation of the optical information during the storage and retrieval of the slow light.

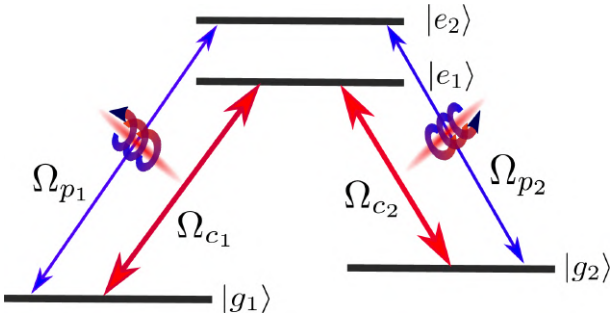


Fig. 1. Schematic diagram of the double-Λ atomic system.

We propose a procedure to achieve a complete energy conversion between laser pulses carrying orbital angular momentum (OAM) in a cloud of cold atoms characterized by a double-Λ configuration of the atom-light-coupling scheme (Fig. 1.), described by the atomic Hamiltonian

$$H = -\Omega_{p_1}|e_2\rangle\langle g_1| - \Omega_{p_2}|e_2\rangle\langle g_2| - \Omega_{c_1}|e_1\rangle\langle g_1| - \Omega_{c_2}|e_1\rangle\langle g_2| + \text{H.c.} \qquad (1)$$

A pair of resonant spatially dependent control fields with Rabi frequencies Ω_{c_1} and Ω_{c_2} prepare atoms in a position-dependent coherent-population-trapping [1] state, while a pair of much weaker vortex probe beams (Rabi frequencies Ω_{p_1} and Ω_{p_2}) propagate in the coherently driven atomic medium. Using the adiabatic approximation we derive the propagation equations for the probe beams. We consider a situation where the second control field is absent at the entrance to the atomic cloud and the first control field goes to zero at the end of the atomic medium. In that case the incident vortex probe beam can transfer its OAM to a generated probe beam.

We show that the efficiency of such an energy conversion approaches the unity under the adiabatic condition. On the other hand, by using spatially independent profiles of the control fields, the maximum conversion efficiency is only ½ [7].

Keywords: Orbital angular momentum, Double Lambda atomic system, Coherent population trapping

References

[1] E. Arimondo, Prog. Opt. 35, 257 (1996).
[2] M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, Rev. Mod. Phys. 77, 633 (2005).
[3] K. Bergmann, H. Theuer, and B. W. Shore, Rev. Mod. Phys. 70, 1003 (1998).
[4] L. Allen, M. J. Padgett, and M. Babiker, Prog. Opt. 39, 291 (1999).
[5] J. Ruseckas, V. Kudriašov, I. A. Yu, and G. Juzeliunas, Phys. Rev. A 87, 053840 (2013).
[6] H. R. Hamedi, J. Ruseckas, and G. Juzeliunas, Phys. Rev. A 98, 013840 (2018)
[7] H. R. Hamedi, Phys. Rev. A 100, 023811 (2019).

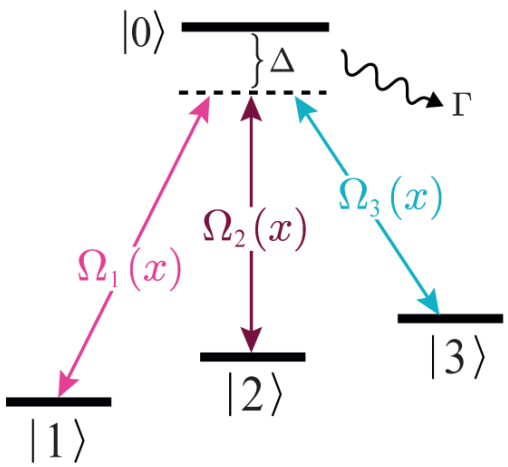
Nuo sukinio priklausanti optinė gardelė su siauresniais nei difrakcijos riba barjerais

Spin-dependent sub-wavelength optical lattice

Edvinas Gvozdiovas, Povilas Račkauskas, Gediminas Juzeliūnas
Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
edvinas.gvozdiovas@ff.stud.vu.lt, gediminas.juzeliunas@tfai.vu.lt

Ankstesniuose teoriniuose [1, 2] bei eksperimentiniuose [3] darbuose buvo parodyta, jog šaltiesiems atomams galima sukurti siauresnius nei difrakcijos riba potencinius barjerus pasitelkiant Lambda konfigūracijos atomo sąveikos su šviesa schemą. Šie barjerai veikia atomus, esančius ilgai gyvuojančioje vidinėje būsenoje, vadinamoje tamsiąja būsena, iš kurios yra uždrausti šuoliai į sužadintą būseną dėl destruktyvios interferencijos tarp skirtingų optinių šuolių.

Dabar pasiūlytas ir ištirtas būdas, leidžiantis sukurti siauresnius nei difrakcijos riba barjerus, kurie skirtingai veikia atomus, esančius skirtingose tamsiosiose būsenose [4, 5]. Nurodytąjam tikslui pasiekti naudojama tripodo tipo šviesos-atomo sąveikos schema (1 pav.), apibūdinama dviejomis tamsiosiomis būsenomis [6].



1 pav. Atomo sąveika su optiniais laukais Tripodo schemoje. *Δ* žymi vienfotoninį išderinimą, o *Γ* žymi sužadintos būsenos savaiminio spinduliavimo spartą. [4]

Darbe parodoma kad, pritaikant tripodo schemą, galima suformuoti periodinę seką siaurų barjerų, kurie atomus veikia priklausomai nuo jų tamsiosios būsenos. Atomus taip pat veikia geometrinis vektorinis potencialas, sukeliantis šuolius tarp atomo tamsiųjų būsenų. Taip suformuojama optinė gardelė, kurios barjerų plotis yra siauresnis nei difrakcijos riba, o barjerų poveikis atomo judėjimui priklauso nuo to, kokioje tamsiojoje būsenoje yra atomas.

Sistemos neadiabatiniai nuostoliai (atomų praradimas optinėje gardelėje) gali būti sumažinti tinkamai parenkant sistemos parametrus.

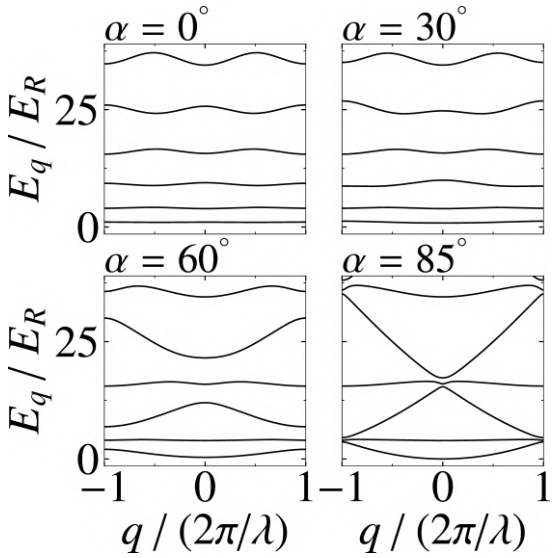
Buvo nagrinėta optinių laukų konfigūracija [4, 5]

$$\Omega_1(x) = \Omega_p, \tag{1}$$

$$\Omega_2(x) = \Omega_p \cos(2\pi x/\lambda + \alpha), \tag{2}$$

$$\Omega_3(x) = \Omega_c \sin(2\pi x/\lambda), \tag{3}$$

kur $\Omega_c \gg \Omega_p$. Tuomet, keičiant fazę α, galima kontroliuoti energijos dispersijos pavidalą (žiūr. 2 pav.) bei atomų tuneliavimo tarp gardelės mazgų parametrus.



2 pav. Šešių žemiausių *Bloch*'o juostų energijos dispersijos 1BZ esant įvairioms fazės α vertėms. [4]

Reikšminiai žodžiai: šaltieji atomai, optinė gardelė, geometrinis potencialas, tamsioji būsena, difrakcijos riba, sukinys.

Literatūra

[1] M. Łącki, M. A. Baranov, H. Pichler, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett., 117:233001 (2016).
[2] F. Jendrzejewski, S. Eckel, T. G. Tiecke, G. Juzeliūnas, G. K. Campbell, Liang Jiang, and A. V. Gorshkov, Phys. Rev. A, 94:063422 (2016).
[3] Y. Wang, S. Subhankar, P. Bienias, M. Łącki, T-C. Tsui, M. A. Baranov, A. V. Gorshkov, P. Zoller, J. V. Porto, and S. L. Rolston. Phys. Rev. Lett., **120**, 083601 (2018).
[4] E. Gvozdiovas, P. Račkauskas and G. Juzeliūnas, arXiv:2105.15148, 2021.
[5] P. Kubala, J. Zakrzewski, M. Łącki, arXiv:2106.04709, 2021.
[6] N. Goldman, G. Juzeliūnas, P. Öhberg and I. B. Spielman, Rep. Prog. Phys., **77**, 126401 (2014).

^{239,240}Pu balanso vertinimas Kuršių mariose

Estimation of ^{239,240}Pu balance in the Curonian Lagoon

Romanenko Vitaliy[1], Galina Lujanienė[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
Vitaliy.romanenko@ftmc.lt

The Curonian Lagoon (Fig. 1) has a surface area of 1584 square kilometers (~6.2 km^3) [1]. The average annual water discharge is about 500 m^{3}s^{-1} for the Nemunas River, 124 m^{3}s^{-1} of the Matrosovka branch, 40 m^{3}s^{-1} for the Minija tributary, and 30 m^{3}s^{-1} for the Deima River [2]. Water outflow gate is the Klaipeda Strait.

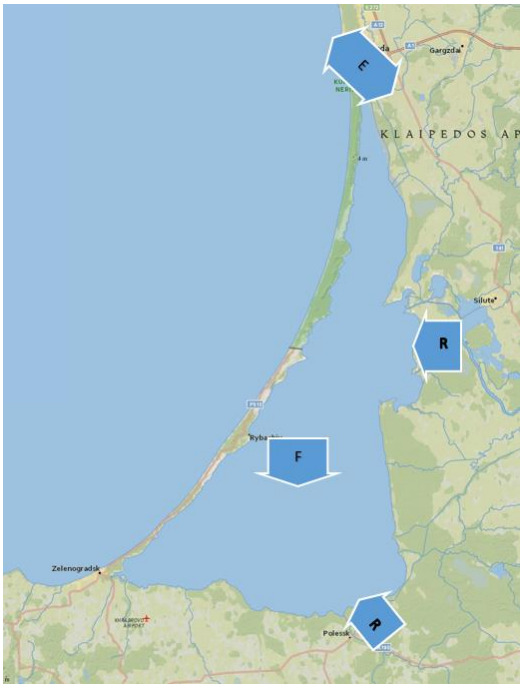


Fig. 1. Map showing the study area

The overall water balance shows that the Lagoon receives water from rivers and precipitation 4 times higher than its volume. The lowest water residence time values were found in front of the Nemunas Delta and in the Klaipeda Strait, while the central and southern parts of the lagoon are characterized by residence times higher than 100 days [2].

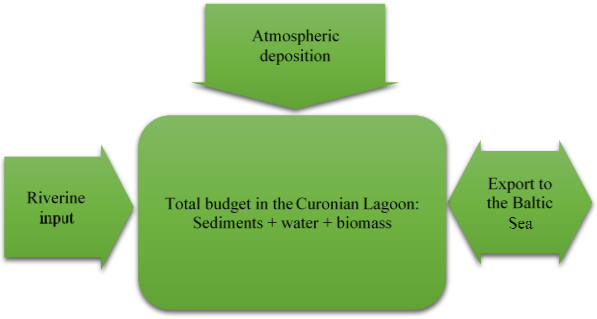


Fig. 2. The mass balance model of the Curonian Lagoon

Using mass balance model [3], we aimed to estimate the ^{239,240}Pu balance in the Curonian Lagoon. The mass balance model (Fig. 2) reflects the total sources and losses of the ^{239,240}Pu in the Curonian Lagoon:

$$I = R + F - E \quad (1)$$

where I - inventory of ^{239,240}Pu in the sediments and suspended particles and water, R – riverine input, F – fallout, E – exchange with the Baltic Sea.

The main inputs of ^{239,240}Pu to the Curonian Lagoon are the river inflow and global fallout after the Nuclear weapon tests aa well as Chernobyl accident. The part of ^{239,240}Pu outflow through the Klaipeda Strait with suspended particles.

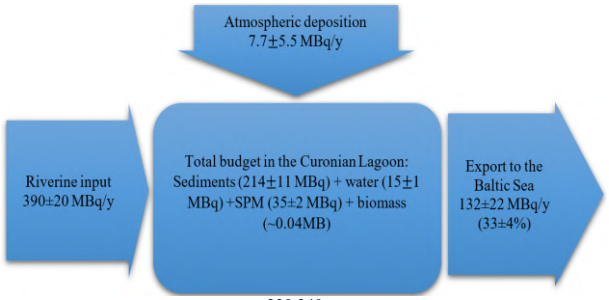


Fig. 3. Estimated ^{239,240}Pu mass balance in the Curonian Lagoon

Based on the mass balance model, the atmospheric and riverine contribution to the Curonian Lagoon was estimated at 397.7 MBq per year. Most part of this plutonium is stored in the bottom sediments, water, and suspended particles (Fig. 3). About 33% of the received plutonium outflows the lagoon with a rate of 132 MBq per year.

Keywords: ^{239,240}Pu balance, box model, Curonian Lagoon

Literature

[1] Mežine, J. *et al. Water (Switzerland)* **11**, 1970 (2019).
[2] Christian, F., *et al. Hydrobiologia* **611**, 133–146 (2008).
[3] Zhuang, Q. *et al. Mar. Pollut. Bull.* **138**, 604–617 (2019).

Atmosferinio gyvsidarbrio koncentraciją įtakojantys veiksniai Maitri vietovėje, Antarktidoje

Factors influencing atmospheric mercury concentrations in the Maitri area in Antarctica

Darius Valiulis[1], Andriejus Urba[1]

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

Darius.Valiulis@ftmc.lt

Atmosferinio gyvsidabrio koncentracija buvo matuojama Maitri tyrimų stotyje (antroji Indijos nuolatinė tyrimų stotis Antarktidoje, geografinės koordinatės 70°46′00″S 11°43′53″E) 2013 02 01 – 23 ir 2015 12 06 – 2016 01 18 laikotarpiais 140 km atstumu nuo kranto. Gyvsidabrio koncentracija buvo matuojama atominės absorbcijos gyvsidabrio analizatoriumi „Gardis 3“, sukurtu Fizinių Mokslų ir Technologijų Centre (Lietuva). Prietaisas kalibruotas standartiniu būdu, taip pat jo rodmenys lyginti su tos pačios tikslumo klasės kitų gamintojų prietaisų parodymais [1]. Dvidešimties min. vidutinės koncentracijos matavimai vyko pastoviai, kartą per parą atliekant kalibraciją. Gyvsidabrio koncentracijų dažnuminio pasiskirstymo metodas buvo panaudotas nustatant pagrindinius veiksnius, įtakojančius gyvsidabrio koncentraciją [2] , taip pat įvertinta vidutinė gyvsidabrio koncentracija matavimo laikotarpiais. Koncentracijos dažnuminio pasiskirstymo hipotezės patikimumas buvo įvertintas naudojant Chi kvadratų metodiką. Nustatyta gyvsidabrio koncentracijos priklausomybė nuo tokių meteorologinių veiksnių kaip vėjo greitis, kryptis, temperatūra. Nustatytas ribinis vėjo greitis, kurį viršijus gyvsidabrio koncentracija pradeda didėti, ir šis kitimas aprašomas antro laipsnio polinomo funkcija. Santykinė drėgmė nedaro jokios pastebimos įtakos gyvsidabrio koncentracijai. Nustatyta, kad yra vienas pagrindinis vyraujantis atmosferinio gyvsidabrio šaltinis, susijęs su tolima pernaša. Taip pat nustatyti gyvsidabrio koncentracijos staigaus sumažėjimo epizodai, susiję su AMDE reiškiniu [3]. Kadangi oro masės, esant minėtiems epizodams, keliavo išskirtinai virš žemyno, pasiūlytos papildomos prielaidos, kodėl galėjo vykti MADE reiškinys. Pavykus išskirti padidėjusių gyvsidabrio koncentracijų įvykius į atskirą reiškinį, pasiūlyta jį paaiškinanti fizikinė-cheminė hipotezė, susijusi su gyvsidabrio srautų paviršine migracija ir termine desorbcija. Nustatytas tiesioginio proporcingumo sąryšis tarp gyvsidabrio koncentracijos ir oro temperatūros jai viršijus -2 °C. Žemiau šios temperatūros sąryšis tarp šių dydžių nenustatytas. Taip pat nustatytas staigus gyvisidabrio koncentracijos augimas vėjo greičiui viršijus 30 mazgų ribą. Ši riba sutampa su staigiu aerozolio submikroninio dydžio dalelių koncentracijos padidėjimu vėjo greičiui ledu padengtoje vietovėje viršijus minėtą ribą [4]. Nors vandenynas taip pat pradeda labai intensyviai generuoti submikroninio dydžio daleles, vėjo greičiui viršijus 30 mazgų ribą, dėl didelio atstumo iki kranto ši hipotezė buvo atmesta. Pasiūlytas fizikinis-cheminis šio reiškinio paaiškinimas.

Reikšminiai žodžiai: gyvsidabris, aerozolis, ozonas, tolima pernaša.

Literatūra

[1] Urba, A. et al. 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] Šakalys J. at al. Changes in total concentrations and assessed background concentrations of heavy metals in moss in Lithuania and the Czech Republic between 1995 and 2005. Chemosphere, 2009, 76(1):91-7.

[3] Sprovieri F. at al. Atmospheric mercury concentrations observed at ground-based monitoring sites globally distributed in the framework of the GMOS network. Atmos. Chem. Phys., 16, 11915–11935, 2016.

[4] Giordano L. at al. The Importance of Blowing Snow to Antarctic Aerosols: Number Distribution and more than Source-Dependent Composition - results from the 2ODIAC campaign. Atmos. Chem. Phys. 2018.

Relationship indoor air quality from urban black carbon level

Daria Pashneva, Julija Pauraite, Agnė Minderytė, Vadimas Dudoitis,
Kristina Plauškaitė, Inga Garbarienė, Lina Davulienė, Steigvilė Byčenkienė
Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio ave. 3, LT-10257 Vilnius,
daria.pashneva@ftmc.lt

Black carbon (BC) has received particular attention around the world due to its impact on air quality and public health. Due to its fine size (size-mode 2.5 μm), large specific surface area, and irregular morphology it is easily inhaled and can affect human health, causing cardiovascular, respiratory and other diseases[1][2]. In the modern world, people spend most of their time (~90%) in indoor environments (home, offices, schools etc.) where energy-efficient buildings can create risks for indoor environmental quality and lead to a various risk of health problems[3]. Toxicological and epidemiological studies indicate an association between indoor and outdoor aerosol black carbon mass concentrations and health risks. Indoor concentrations of some pollutants have increased during recent decades due to changes in building construction standards[4]. It should be noted, that to ensure all buildings operate at net zero carbon emission by 2050, more stringent minimum requirements for the necessary energy transition have been set across the EU. This study aims to investigate influence of outdoor-to-indoor exchange on indoor levels of the BC mass concentration.

In this context, indoor and outdoor continuous real-time measurements of optical BC-related light absorption by aerosol particles were investigated in an office located at urban background environment in Vilnius, Lithuania, during the cold season (from October to December 2020). Equivalent black carbon (eBC) mass concentration was measured by an Aethalometer (Magee Scientific, model AE-31). The optical transmission of carbonaceous aerosol particles was measured sequentially at 7 wavelengths (λ= 370, 470, 520, 590, 660, 880 and 950 nm), where the eBC mass concentration was derived from the light absorption coefficient (σab) at 880 nm wavelength.

Analysis of the obtained data showed certain patterns. Hourly mean mass concentrations of eBC for weekdays and weekends show diurnal cycles, which could be explained by periodicity of traffic intensity and heating activities. Diurnal variations showed an increased contribution of outdoor for indoor eBC mass concentration during 10:00 and 12:00 AM (GMT+2), with the highest indoor eBC mass concentration of 0.097 μgm^{-3} observed, which is almost twice the indoor average. The ratio of indoor/outdoor eBC mass concentrations (I/O ratio) was below 1 during the whole observed period. The I/O ratio lower than 1 indicates that the contribution of outdoor sources is greater than that of indoor sources.

A significant influence of outdoor air quality onthe indoor air was observed. This finding is crucial for offices located next to busy roads where outdoor eBC levels are higher.

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

Keywords— black carbon, climate change, indoor air quality, I/O ratio.

References

[1] S. F. Suglia, A. Gryparis, J. Schwartz, and R. J. Wright, "Association between Traffic-Related Black Carbon Exposure and Lung Function among Urban Women," no. 10, pp. 1333–1337, 2008, doi: 10.1289/ehp.11223.

[2] I. Cunha-Lopes, V. Martins, T. Faria, C. Correia, and S. M. Almeida, "Children's exposure to sized-fractioned particulate matter and black carbon in an urban environment," Build. Environ., vol. 155, pp. 187–194, May 2019, doi: 10.1016/j.buildenv.2019.03.045.

[3] M. M. Lunden, T. W. Kirchstetter, T. L. Thatcher, S. V. Hering, and N. J. Brown, "Factors affecting the indoor concentrations of carbonaceous aerosols of outdoor origin," Atmos. Environ., vol. 42, no. 22, pp. 5660–5671, Jul. 2008, doi: 10.1016/j.atmosenv.2008.03.017.

[4] E. Cheek, V. Guercio, C. Shrubsole, and S. Dimitroulopoulou, "Portable air purification: review of impacts on indoor air quality and health," Sci. Total Environ., p. 142585, Sep. 2020, doi: 10.1016/j.scitotenv.2020.142585.

Radionuklidų tūrinio aktyvumo tyrimas pažemio atmosferoje ir Neries vandenyje

Research of radionuclide activity concentrations in the ground-level atmosphere and the Neris River

Arūnas Gudelis, Lina Gaigalaitė, Gintautas Kandrotas
Fizinių ir technologijos mokslų centras (FTMC), Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
arunas.gudelis@ftmc.lt

2020 m. lapkritį paleidus atominę elektrinę Baltarusijoje (Astravo AE) su dviem trečios kartos branduoliniais VVER-1200 tipo reaktoriais (AES-2006 modelio) tęsiami radionuklidų aktyvumo matavimai aplinkos bandiniuose. Pažemio atmosferos aerozolinėje komponentėje tyrimai atliekami Vilniuje ir Vosyliškių kaime (Ignalinos raj.) eksponuojant FPP tipo filtrus, juos keičiant kas dvi savaites ir matuojant sukauptų gama spinduolių aktyvumą puslaidininkiniais gryno germanio (HPGe) detektoriais. Nuo 2020 m. lapkričio iki 2021 m. rugsėjo Vilniuje ir Vosyliškių stotyje eksponuota, atitinkamai, 22 ir 16 filtrų.

Siekiant pagerinti matavimų jautrį ir sumažinti radionuklidų aptikimo ribą Vosyliškių stotyje (kuri yra apie 2,5 karto toliau nuo technogeninių radionuklidų šaltinio negu Vilnius), nuo 2021 m. birželio filtrai keičiami kas mėnesį. Gama spektrometrinių tyrimų metu pažemio atmosferoje nustatytas kosmogeninės kilmės ^{7}Be, globaliai pasiskirsčiusio ^{137}Cs ir terigeninio ^{210}Pb aktyvumas. Kitų technogeninių būdingų suslėgto vandens branduoliniams reaktoriams aktyvacijos ar dalijimosi produktų (^{51}Cr, ^{54}Mn, ^{58}Co, ^{59}Fe, ^{60}Co, ^{95}Zr, ^{95}Nb, ^{103}Ru, ^{106}Ru, ^{110m}Ag, ^{131}I, ^{134}Cs, ^{144}Ce) nenustatyta, apskaičiuotos jų aptikimo ribos vertės taikant Currie kriterijų [1].

Pradedant 2020 m. lapkričio 16 d. ir baigiant 2021 m. rugpjūčio 24 d. suorganizuotos 7 ekspedicijos imti paviršinio vandens ėminius iš Neries ir Žeimenos upių šešiuose taškuose: ties Buivydžiais, Pabradėje, Nemenčinėje ir ties šių upių santaka ties Žukonimis.

Dviejų VVER-1200 tipo reaktorių galia yra apie 2400 MW, pagal vertinimą [2] vienas šio tipo reaktorius per metus pagamina apie $6{,}7\cdot10^{5}$ GBq tričio (^{3}H). Neries vanduo gali būti naudojamas Astravo AE (kartais dar vadinamos Baltarusijos AE) technologinėms reikmėms (pirminio kontūro aušalui ir reaktoriaus šerdies aušinimui). Dėl didelio tričio aktyvumo aušale šis nuklidas yra tinkamas žymiklis, rodantis galimus nuotėkius iš technologinių branduolinio reaktoriaus sistemų.

Foninis tričio tūrinis aktyvumas paviršiniuose vandenyse šiauriniame Žemės pusrutulyje gali kisti nuo 1 $Bq\cdot l^{-1}$ iki 9 $Bq\cdot l^{-1}$, tad jo aktyvumą galima išmatuoti tiesioginiu metodu panaudojant ypač mažo fono blyksninių tirpalų spektrometrą.

Siekiant vertinti Astravo AE radiologinį poveikį atliktas blyksninių tirpalų spektrometro efektyvumo kalibravimas nustatant tričio tūrinio aktyvumo vandenyje aptikimo ribą [3], detalizuojant matavimo neapibrėžties sandus, išmatuojant dabartinį tričio tūrinį aktyvumą ir užtikrinant matavimų metrologinę sietį su nacionaliniu radionuklidų aktyvumo vieneto etalonu.

Kalibravimo metu ištirti keli komerciniai skystieji scintiliatoriai, naudojami blyksniniams tirpalams ruošti 20 ml tūrio mažos difuzijos polietileniniuose indeliuose: Ultima Gold LLT, OptiPhase HiSafe 2, OptiPhase HiSafe 3 ir Gold Star LT2. Tirti šie scintiliatorių parametrai: imlumas tiriamam mėginiui, mūsų atveju, vandeniui (maksimalus mėginio kiekis, kurį sumaišius su scintiliatoriumi, blyksninis tirpalas išlieka vienalytis), matavimo efektyvumas, aptikimo riba, foninė impulsų kaupimo sparta.

Rezultatai leido apskaičiuoti kokybės rodiklį (*angl.* FOM – *Figure Of Merit*) ir pagal jį palyginti skirtingų komercinių scintiliatorių tinkamumą mažo aktyvumo tričio nustatymui vandenyje.

Reikšminiai žodžiai: aerozoliai, aptikimo riba, atominė elektrinė, gama spinduoliai, Neris, tritis.

Literatūra

[1] L. A. Currie, Anal. Chem., **40(3)**, 586 (1968).
[2] IAEA Technical Reports Series No. 421 (2004).
[3] ISO 9698:2019. Water quality – Tritium – Test method using liquid scintillation counting.

Variability of aerosol main chemical components in Lithuanian rural environment: a 5-years study

Touqeer Gill[1], Julija Pauraitė[1], Steigvilė Byčenkienė[1] and Kristina Plauškaitė[1]
[1]Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
touqeer.gill@ftmc.lt

Aerosol particles greatly influence the atmosphere and cause changes in the environment because of their chemical composition. Due to this reason, the chemical composition of aerosols should be well known as well as the pathway in which they are formed.

The main chemical components of aerosol were investigated by using the Aerosol Chemical Speciation Monitor (ACSM) in the rural environment of Rūgšteliškis (Lithuania). The measurements were taken during a period of 5 years (2013, 2014, 2016, 2018 and 2019) in three seasons (Spring, Summer & Autumn). The analysis of time series and diurnal trends of organic and inorganic aerosols (OA and IA, respectively) was done. OA had a higher contribution (60-80 %) over all seasons to the total submicron (diameter less than 1 µm) particulate matter (PM_1) than IA (20-40 %). OA had a higher contribution in the summers of 2013, 2016 and 2018 in comparison to spring and autumn seasons. To the seasons of autumn and spring however, in the years 2014 and 2019 the highest contribution of OA was seen during the season of spring. The mass concentration of OA was seen as dominant (77.04%) during all 5 years when time series always were conducted to the total loading (Fig 1).

Possible day and night aerosol chemistry and sources were characterized by diurnal trends of OA and IA (Fig 2). In spring season (except 2016) OA showed higher mass concentration during the morning hours (5-7 h) and lower mass concentration during the afternoon (13-19 h). OA in summer 2013, 2018 and 2019 exhibited higher mass concentration during the morning hours (2-7 h) and lower mass concentration during the daytime (12-19 h). OA in autumn 2018 showed higher mass concentration during the night hours (2-7 h) and lower mass concentration during the daytime (12-19 h) whereas2013, 2014, and 2016 was not showing clear diurnal trend. The diurnal pattern of organic nitrates and inorganic nitrates diurnal trend was viewed independently. Similar pattern was assessed for the mass concentration of $NO_{3(Org)}$ in the spring, summer & autumn seasons and $NO_{3(Inorg)}$ which rose to its maximum in spring between 2-7 h and minimum between 12-19 h. In 2013, 2016, 2018 and 2019 NH_4 was not showing clear diurnal pattern for all the 3 seasons. Except spring and summer 2014 showed higher mass concentrations in day time (10-15h) and lowered mass concentration in night time (1-5 h). The formation of ammonium derived aerosol could be done in NH_4NO_3 and $(NH_4)_2SO_4$ form which aerosol particles are formed when HNO_3 and H_2SO_4 are neutralized with NH_3[1]. Higher mass concentrations of SO_4 were observed during daytime (12-19h) in comparison to night time (1-6 h) except in 2018. The formation of SO_4 derived aerosol was likely occurring by the oxidation of gaseous precursor SO_2. This is followed by the formation of particles by the condensation. Diurnal trend of biomass burning, transport and other man-made emitted primary organic aerosol (BB, TR & Other MM emission, respectively) was performed which was not showing clear diurnal pattern. Additionally, the correlation of $NO_{3(org)}$ and $NO_{3(Inorg)}$ among (OA, SO_4 and NH_4) observed. The results of this study could lead to a better understanding in regard to the changes in climate on the global and local scale.

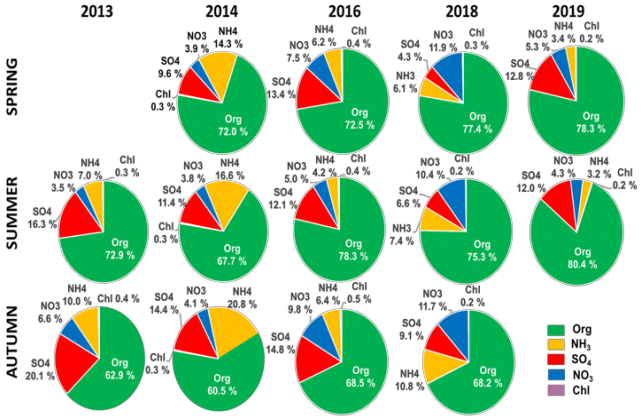


Fig. 1 Main aerosol chemical composition of three seasons (spring, summer and autumn) in the year 2013, 2014, 2016, 2018 and 2019.

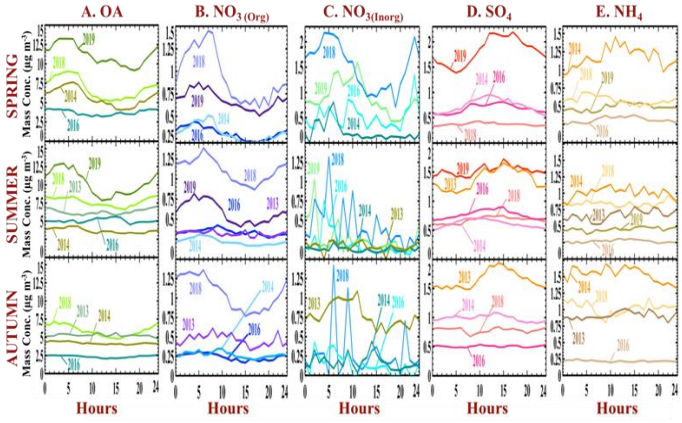


Fig. 2 Five years diurnal trend of (A) OA, (B) $NO_{3(Org)}$, (C) $NO_{3(Inorg)}$, (D) SO_4 and (E) NH_4 for three seasons (spring, summer and autumn).

Keywords; Aerosol, Diurnal, Aerosol chemical speciation monitor

Literature

[1] A. I. Calvo, C. Alves, A. Castro, V. Pont, A. M. Vicente, and R. Fraile, *"Research on aerosol sources and chemical composition : Past , current and emerging issues,"* vol. 121, pp. 1–28, 2013.

Gama spektrų modeliavimas įvairios geometrijos metalinių AE atliekų bandiniuose

Modeling of gamma spectra in samples of various geometries of metal waste from nuclear power plants

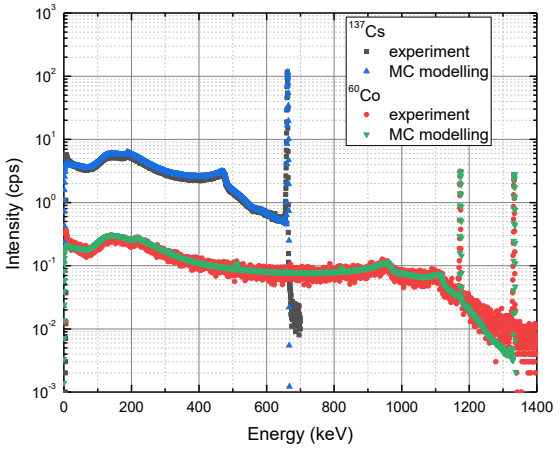
Marina Konstantinova, Elena Lagzdina, Darius Germanas, Danielius Lingis, Jevgenij Garankin, Rita Plukienė, Artūras Plukis, Vidmantas Remeikis
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
marina.konstantinova@ftmc.lt

Viena iš problemų nutraukiant atominės elektrinės darbą yra optimizuoti metalinių radioaktyviųjų atliekų (MRA) tvarkymą, jas grupuojant ir atskiriant. MRA tampa radioaktyviomis dėl neutronų aktyvacijos, o taip pat gali būti užterštos per aušinimo kontūrą veikiant reaktoriui arba avarinių įvykių metu. Šiuo metu didžiausias dėmesys skiriamas metalo atliekų rūšiavimui, deaktyvacijai ir utilizavimui nerūdijančio plieno konteineriuose, o taip pat tobulinami nedestrukciniai monitoringo metodai, siekiant paprastai ir efektyviai radiologiškai charakterizuoti konteinerių turinį prieš patalpinant juos į galutinio saugojimo atliekynus [1]. Ignalinos atominės elektrinės (IAE) veikiančių RBMK-1500 reaktorių eksploatacijos nutraukimas pradėtas 2004 m., kai buvo uždarytas pirmasis blokas, bei tęsiamas uždarius antrąjį bloką 2009 m. [2]. RBMK tipo reaktorių konstrukciniams elementams naudotos įvairios sudėties medžiagos: plienas 20 (atraminės ir apsauginės plokštės), 10ChN1M (atraminės konstrukcijos, aktyviosios zonos biologinės apsaugos dalys), 08Ch18N10T (vamzdžiai atraminėje metalo konstrukcijoje, aušalo kanalai), 10ChSND (biologinės apsaugos metalinė konstrukcija), cirkonio-niobio lydinys E125 (vamzdžiai klojinyje, kuro kanalai) ir kt. [3, 4].

Norint efektyviai charakterizuoti labai mažo aktyvumo metalo atliekas, reikia nustatyti paviršinį užterštumą, naudojant paprastą ir nedestruktyvų gama spektrometrijos metodą. Šio darbo tikslas yra ištirti pagrindinių aktyvacijos (^{60}Co) ir paviršiaus užterštumo (^{137}Cs) šaltinių spektrus skirtingų metalų konstrukcijų aplinkoje bei nustatyti parametrus, kurie gali būti naudojami paviršiniam ir tūriniam aktyvumui įvertinti.

Išmatuoti bandinių ^{60}Co ir ^{137}Cs spektrai laboratorijoje esant skirtingai metalinių paviršių geometrijai, o taip pat atlikti analogiški modeliavimo darbai naudojant MCNP6 kodą [5] su ENDF-VII branduolinių duomenų bibliotekomis. Įvertinti ^{60}Co ir ^{137}Cs gama pilnos sugerties foto-smailių ir Komptono sklaidos kraštų santykiai įvairioms šaltinių ekranavimo geometrijoms. Eksperimentiniai ir modeliavimo rezultatai neblogai sutapo, o tai sudaro prielaidas tirti įvairių formų/storių radiaktyviųjų metalo atliekų gama spektrus bei įvertinti tūrinės aktyvacijos ar paviršinio užterštumo dalis MRA (1 pav.).

Preliminari analizė parodo, kad galima aiškiai atskirti paviršinius šaltinius nuo šaltinių, kurie yra ekranuoti skirtingo storio geležimi. ^{137}Cs taškiniam šaltiniui modeliavimo ir eksperimento rezultatai neblogai sutampa (iki 8%) esant skirtingiems ekranuojančio metalo storiams, tuo tarpu ^{60}Co šaltiniui gauti didesni neatitikimai (~ 23%), todėl svarbu įvertinti eksperimento sąlygas (detektoriaus matavimo neveikos trukmę, atstumus nuo jautraus paviršiaus ir kt.) bei atlikti modelio patikrą (sukalibruoti modelio parametrus) [6].



1 pav.Išmatuotų ir sumodeliuotų ^{60}Co ir ^{137}Cs taškinių šaltinių γ spektrų, apsaugotų 1 cm storio geležies plokšelėmis, palyginimas

Tyrimai buvo vykdami pagal HORIZON2020 Euratom projekto 2019-2020 veiklas, sutartis Nr. 945098

Reikšminiai žodžiai:metalinės radioaktyvios atliekos, ^{60}Co, ^{137}Cs, Komptono sklaidos kraštas.

Literatūra

[1] https://predis-h2020.eu/work-packages/
[2] https://www.iae.lt/en
[3]B. K. Bylkin, G.B. Davydova, Y.A. Zverkov, A.V. Krayushkin, Y.A. Neretin, A.V. Nosovsky, V.A. Seyda, S.M. Short, Nucl. Technol., **136**, **1**, 76–88 (2001).
[4]E. Narkūnas, "Reaktoriaus RBMK-1500 konstrukcinių elementų nuklidinės sudėties kitimo tyrimai." Doctoral dissertation, 2009
[5]https://www.osti.gov/biblio/1419730-mcnp-%20version-release-
[6] M. Konstantinova, D. Germanas, A. Gudelis, A. Plukis, Lit Phys, **61, 1,** 66-73 (2021)

Klimato fizikos naujienos pagal IPCC6

Climate Physics Updates in IPCC6

Lina Davuliene
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
lina.davuliene@ftmc.lt

Klimato modeliai yra viena iš pagrindinių priemonių klimato kaitos raidai numatyt ir jos priežastims paaiškinti. Šie modeliai sparčiai vystosi sudėtingėjimo linkme ir virto Žemės sistemos modeliais, apimančiais net socialinius ir ekonominius modelius.

Modelių sudėtingėjimas nebūtai reiškia jų rezultatų patikimumo didėjimą, nes pvz., didėjant aprašomų procesų skaičiui, didėja ir nežinomųjų parametrų skaičius. Modelių palyginimo eksperimentai rodo, kad gana patikimai yra modeliuojama pagrindinių klimato parametrų vidurkių eiga. Vis gi didžiausias dėmesys pastaraisiais metais kreipiamas į klimato parametrų kitimo ribų, ekstremalių verčių, prognozavimą [1]. Tam vykdami klimato modelių grupiniai eksperimentai, tikslinami fizikiniai modeliai ir bandoma įvertinti klimato jautrumą vandens garų, o taip ir atmosferos aerozolių koncentracijos pokyčiams.

Šiame pranešime bus apžvelgti globalių klimato modelių palyginimo eksperimentų rezultatai ir svarbiausi fizikinės klimato modelių dalies pakeitimai remiantis naujausia IPCC6 ataskaita.

Literatūra

[1]IPCC 6th report, 2021.
https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg1/#FullReport

Terahercinis spalvotas struktūrinių defektų vaizdinimas mene ir pramonėje

Representation of terahertz color spectroscopy in arts and industry

Benas Bužinskas[1], Rusnė Ivaškevičiūtė-Povilauskienė[1], Domas Jokubauskis[1] ir Linas Minkevičius[1]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
benas.buzinskas@ftmc.lt

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

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



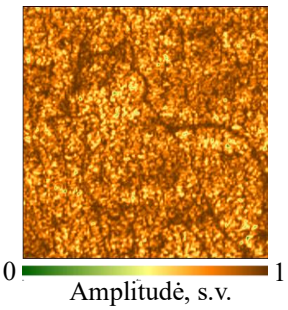
a) b)

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

THz vaizdinimo tyrimams, pirmiausia ant kartono lapo (storis 3,31mm) grafito pieštuku buvo nupieštas vilkas (1 pav. a)), ant jo viršaus akriliniais dažais buvo nutapyta avelė. Išorinis piešinys buvo nutapytas taip, kad akimis būtų neįmanoma įžvelgti pieštuku piešto vilko (1 pav. b)). Pirmieji pralaidumo eksperimentai buvo atlikti su Gunn diodiniu 100 GHz šaltiniu ir microbolometriniu [3] detektoriumi taikant signalo registravimą sinchroninės detekcijos metodu (moduliacija 1053 Hz), vaizdinamo taško dydis siekė dydis 0,5 x 0,5 mm^2, skanavimo greitis 50 mm/s, parabolinių veidrožių pagalba terahercų spinduliuotę buvo fokusuojama į kiekvieną bandinio tašką atliekant taškinį skanavimą.

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

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



2 pav. Paveikslo pirminio sluoksnio vaizdas ties 0,76 THz. Pikselio dydis 0,5 x 0,2 mm^2, vaizdą sudaro 60040 pikselių.

Reikšminiai žodžiai: terahercai, , vaizdinimas.

Literatūra

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

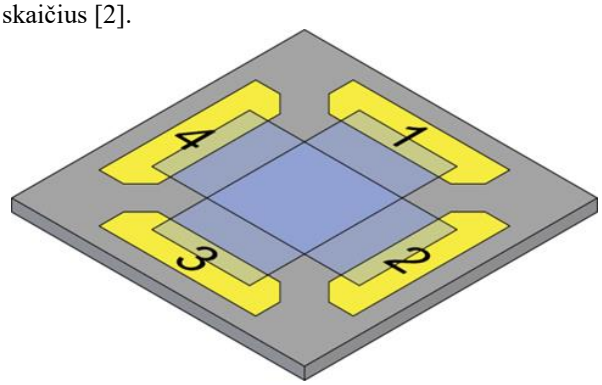
Įtampa valdomas Fabri Pero rezonansas silicio plokštelėje

Voltage-controlled Fabry Perot resonance in silicon wafer

Andrius Kamarauskas[1,2], Laurynas Staišiūnas[1], Gediminas Šlekas[1], Dalius Seliuta[1,2], Žilvinas Kancleris[1]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Mikrobangų laboratorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2] Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10221 Vilnius
andrius.kamarauskas@ftmc.lt

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

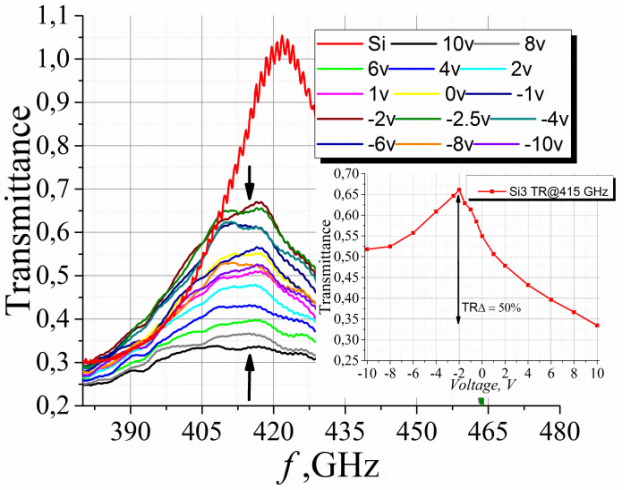
Paprasčiausiu atveju, kai EM banga krenta į dielektriko plokštelę dėl daugkartinių jos atspindžių pasireiškia FP rezonansas. Praėjusios per plokštelę EM bangos galios maksimumas (išnykus atspindžiui) formuojasi tada, kai plokštelėje telpa sveikas pusbangių skaičius [2].



1 pav. Tirto darinio su persiklojančiais grafeno sluoksniais scheminis vaizdas. Izoliuojančio Si (ε = 11,9) plokštelės storis 0,5 mm, persiklojančios srities dydis 5 mm x 5 mm

Mūsų tyrimo objektas pavaizduotas 1 pav. Ant Si plokštelės padengtos 60 nm storio HfO_2 (ε = 30) sluoksniu užgarintos aukso kontaktinės aikštelės. Pirmasis grafeno sluoksnis šlapio perkėlimo būdu užnešamas ant kontaktų 1-3. Nuėmus grafeno apsauginį polimetilmetakrilato (PMMA) sluoksnį, ir mechaniškai uždengus 2 ir 4 kontaktines aikšteles, padengiamas antrasis 60 nm storio HfO_2 sluoksnis. Po to užklojamas viršutinis grafeno sluoksnis tarp kontaktų 2-4. Jis paliekamas su apsauginiu PMMA sluoksniu apsaugančiu jį nuo aplinkos poveikio. Tokiu būdu pagamintas darinys yra kaip kondensatorius, kuriame metalinės plokštelės pakeistos grafeno sluoksniais. Keičiant prie grafeno sluoksnių prijungtą elektrinį potencialą, kinta Fermi lygio padėtis grafene ir tokiu būdu pakeičiamas grafeno paviršinis laidumas [3].

Eksperimentiniai pagaminto darinio pralaidumo priklausomybės tyrimai nuo pridėto prie grafeno sluoksnių elektrinio potencialo atlikti 380-460 GHz ruože terahercinių spektrometru Toptica Terascan 780. THz spindulys nukreiptas statmenai į grafeno sluoksnių persiklojimo vietą. Eksperimento rezultatai parodyti 2 pav. rodo, kad pridėjus įtampą darinio pralaidumas FP rezonanso srityje ženkliai sumažėja. Kaip matyti iš įdėtinio grafiko maksimalus THz pralaidumas stebimas, kai prie viršutinio kontakto įtampa -2 V.



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

Mes taip pat išmatavome grafeno sluoksnių DC varžos priklausomybes nuo pridėtos prie sluoksnių įtampos. Pasirodė, kad viršutinio sluoksnio varža pridėjus prie jo -2 V įtampą buvo apie 1,7 kΩ. tuo tarpu apatinio – 5,7 kΩ. Keičiant pridėtą įtampą apatinio sluoksnio varža ženkliai sumažėjo, kai tuo tarpu viršutinio silpnai priklausė nuo išorinės įtampos. Pastebėtus skirtumus matomai gali sąlygoti tai, kad grafeno sluoksnius supa skirtingos terpės. Apatinis sluoksnis 1-3 iš abiejų pusių padengtas 60 nm storio HfO_2 sluoksniu, kai viršutinis yra iš vienos pusės padengtas PMMA sluoksniu.

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

Reikšminiai žodžiai: Fabri Pero, moduliacija, grafenas, hafnio oksidas.

Literatūra

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

Mobile Ions Determines Multiphase Performance Dynamics of Perovskite LEDs

Rokas Gegevičius[1], Karim Elkhouly[2], Lukas Jonušis[1], Weiming Qiu[2], Vidmantas Gulbinas[1]

[1]Center for Physical Sciences and Technology Saulėtekio Avenue 3, Vilnius LT-10257, Lithuania
[2]KU Leuven Kasteelpark Arenberg, 3001 Leuven, Belgium
rokas.gegevicius@ftmc.lt

Metal-Organic Perovskite Light Emitting Diodes (PeLEDs) currently reaching more than 20% external quantum efficiency1–3 are a promising technology for display and lighting applications. Unfortunately, many questions regarding their performance are still not completely understood, especially those related to the device stability, operation in non-stationary regimes, and efficiency roll-off at high current densities. In this work, we try to address some of those issues in MAPbI3 hybrid perovskite LEDs. By analysing electroluminescence (EL) and current dynamics after the abrupt application of pumping voltage at different temperatures it was showed that EL intensity and current of PeLED exhibits complex growth kinetics after the application of constant pump voltage. The initial EL intensity of the pristine sample is very weak and continue to grow from milliseconds to tens of minutes. Subsequent application of voltage after the device "rests" for tens of minutes or hours creates a much stronger initial EL signal, which increases by tens of per cent during additional seconds. This EL growth process was analysed using several spectroscopic techniques that enabled us to study changes of EL intensity, current, and EL spectrum taking place during applied bias stressing, relaxation after bias stressing, negative voltage or light soaking. Additionally, we investigated stressing-induced changes of the samples photoluminescence, electroabsorption and capacitance.

Analysis of the experimental results together with mathematical modelling revealed that the complex operation dynamics on time scales from sub-seconds to minutes and hours is caused by redistribution of single type mobile species - iodine ions, which changes the carrier injection, spatial electric field and carrier density distributions and density of nonradiative recombination centres. These novel results provided a deeper understanding of the processes taking place in operating PeLEDs and will be highly important for their optimization directed to the more efficient performance of the perovskite devices.

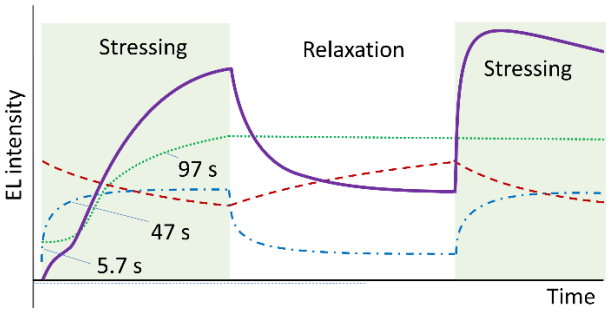


Figure 1. Major stressing-induced processes. EL development kinetics (solid magenta line), bi-exponential current growth causing fast reversible EL growth component (dash-dot blue line), slow irreversible EL growth component (dot green line), and reversible EL decay (dash red line). The numbers show time constants of various processes at room temperature at 2 V stress voltage obtained from exponential fitting.

Keywords: perovskite, LEDs, mootion of ions, crystal defects.

References:

[1] Cao, Y. *et al.* Perovskite light-emitting diodes based on spontaneously formed submicrometre-scale structures. *Nature* **562**, 249–253 (2018).
[2] Xu, W. *et al.* Rational molecular passivation for high-performance perovskite light-emitting diodes. *Nat. Photonics* **13**, 418–424 (2019).
[3] Chiba, T. *et al.* Anion-exchange red perovskite quantum dots with ammonium iodine salts for highly efficient light-emitting devices. *Nature Photon* **12**, 681–687 (2018).

Švino bromido perovskitiniai šviesos detektoriai

Lead Bromide Perovskite Light Detectors

Martyna Mazuronytė,[1] Patrik Ščajev, Saulius Juršėnas

[1] Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

martyna.mazuronyte@ff.stud.vu.lt

Perovskitiniai šviesos detektoriai dėl savo patrauklių optinių bei elektroninių savybių, taip pat pigaus ir paprasto gaminimo proceso yra numatomi kaip stiprūs konkurentai įvairiems puslaidininkiniams šviesos sensoriams [1-3].

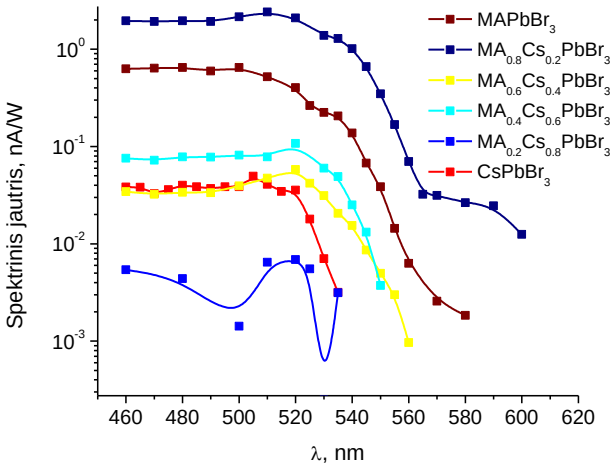
Šio darbo tikslas buvo pagaminti įvairios sudėties perovskitinius šviesos detektorius ir atlikti jų parametrų analizę, palyginti gautus rezultatus su pateikiamais literatūroje.

Šiam darbui buvo pagaminti šeši šviesos detektoriai liejant $MA_xCs_{1-x}PbBr_3$ (x = 0 - 1) bromidinių perovskitų tirpalus ant stiklo padėklų su užgarintais vario kontaktais. Taip pat pagaminti šeši tos pačios sudėties bandiniai be kontaktų, kad būtų charakterizuojama kontaktų įtaka perovskito optoelektroninėms savybėms. Darbe buvo ištirta: bandinių sugerties spektras naudojant sugerties spektroskopą. Sužadinant detektorius su femtosekundiniu lazeriu kartu su optiniu parametriniu stiprintuvu ištirtas jų spektrinis atsakas, mikroskopo pagalba buvo nustatyta bandinio kristalinė struktūra bei jos defektai. Foto liuminescencijos su laikine skyra metodas buvo pasitelktas įvertinti bandinių fotoliuminescencijos spektrus bei kinetikas, kas leido apskaičiuoti krūvininkų gyvavimo trukmę kiekviename prietaise (1 lentelė). Detektorių signalo intensyvinės priklausomybės nuo sužadinimo buvo tiriamos naudojant pikosekundinį lazerį kaip sužadinimo šaltinį. Naudojant srovių matuoklį išmatuotos voltamperinės charakteristikos, kai bandinys buvo tamsoje ir kai apšviestas ir iš gautų duomenų apskaičiuotos prietaisų varžos ir spektrinio jautrio charakteristikos (1 pav.).

Gauti duomenys buvo išanalizuoti, buvo įvertinta kontaktų įtaka bandinių optoelektroninėms charakteristikoms, kiekvieno bandinio gauti duomenys buvo palyginti tarpusavyje, taip pat su literatūroje pateikiamais duomenimis. Šio tyrimo metu buvo nustatyta, kad detektoriai, kurie buvo pagaminti iš perovskito, kuriame buvo didelė metilamonio koncentracija pasižymėjo geriausiais parametrais, tačiau detektorių fotojautris turi būti padidintas siekiant tolesnio jų pritaikymo.

1 lentelė. Pagrindiniai detektorių parametrai

Perovskito sudėtis	Spektrinio atsako didžiausia vertė (nA/W)	FL krūvininkų gyvavimo trukmė (ns)	Srovės stipris tamsoje, kai įtampa 21 V (nA)
$CsPbBr_3$	0.05	0.93	0.02
$MA_{0.2}Cs_{0.8}PbBr_3$	0.007	0.1	0.008
$MA_{0.4}Cs_{0.6}PbBr_3$	0.11	0.05	0.06
$MA_{0.6}Cs_{0.4}PbBr_3$	0.06	-	0.08
$MA_{0.8}Cs_{0.2}PbBr_3$	2.41	0.04	0.15
$MAPbBr_3$	0.65	0.51	0.06



1 pav. Perovskitinių šviesos detektorių spektrinio jautrio charakteristikos.

Literatūra

[1] Tian, W., Zhou, H., & Li, L. (2017). Hybrid Organic-Inorganic Perovskite Photodetectors. Small, 13(41), 1702107

[2] Ahmadi, M., Wu, T., & Hu, B. (2017). A Review on Organic-Inorganic Halide Perovskite Photodetectors: Device Engineering and Fundamental Physics. Advanced Materials, 29(41), 1605242

[3] Li, C., Ma, Y., Xiao, Y., Shen, L., & Ding, L. (2020). Advances in perovskite photodetectors. InfoMat, 2(6), 1247–1256

Energijos kaupimas iš bevielio ryšio tinklų

Energy harvesting from WiFi networks

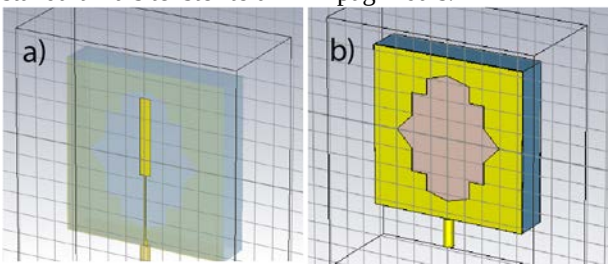
Paulius Ragulis[1], Rimantas Simniškis[1], Gediminas Šlekas[1], Romualdas Trusovas[1], Karolis Ratautas[1], Žilvinas Kancleris[1], Gediminas Račiukaitis[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
paulius.ragulis@ftmc.lt

Energijos rinkimas, kaupimas ir transformacija yra aktuali mokslinė ir technologinė šių dienų ekologinė problema. Be labiausia paplitusio saulės energijos rinkimo, kurio našumas ir nenutrūkstamumas yra susijęs su paros ir metų laikotarpiu, ieškoma būdų, kaip panaudoti ir kitos rūšies energijos rūšis: vibraciją, akustinį triukšmą, temperatūros gradientus ir aplinkos elektromagnetinę spinduliuotės foną [1]. Elektromagnetinės spinduliuotės energijos panaudojimas leidžia sukurti autonomines belaidžių jutiklių ir aktuatorių sistemas, kurios yra kuriamos pagal bendrąją strateginę šių dienų IoT (Internet of Things) ir IoE (Internet of everything) kryptį.

Darbe pateikta kuriama energorinkio sistema, skirta kaupti bevielių maršrutizatorių spinduliuotės energiją 2.4 GHz ir 5-6 GHz dažnių ruožuose. Buvo siekiama sukurti efektyvius energorinkius panaudojant minimalių gabaritų, našias ir plačiajuostes antenas optimaliai suderintas su mikrobanginiais lygintuvais [2]. Pagrindiniai darbo kriterijai buvo maksimalus naudingo veikimo koeficientas ir maksimali tiekiama energorinkio įtampa esant minimaliai elektromagnetinei spinduliuotei.

Mikrobangų energijos rinkimo prietaisą, energorinkį, dažniausiai sudaro šie trys elementai: 1. priimančioji antena, skirta bevielio ryšio energiją atviroje erdvėje surinkti, 2. lyginimo mikroschema verčianti kintantį signalą į nuolatinę įtampa, 3. tarpinė grandinė suderinanti antenos ir lyginimo mikroschemos impedansus.

Energorinkyje panaudojome lopinę anteną pavaizduotą 1 pav. Kaip matyti iš 1 b) pav. lopinės antenos žemės plokštumoje yra padaryta žvaigždės formos išpjova. Taip yra praplečiamas antenos darbo ruožas. Sukurta antena pritaikyta dirbti dviejuose dažnių ruožuose apie: 2.45 GHz ir 5.5 GHz. Antenos pagrindas - Rogers3210 (ε – 10,8, tanδ – 0,0027 ties 10 GHz). Didelė pagrindo dielektrinė skvarba leido sumažinti antenos geometrinius matmenis, lyginant su standartiniais tekstolito ar FR4 pagrindais.

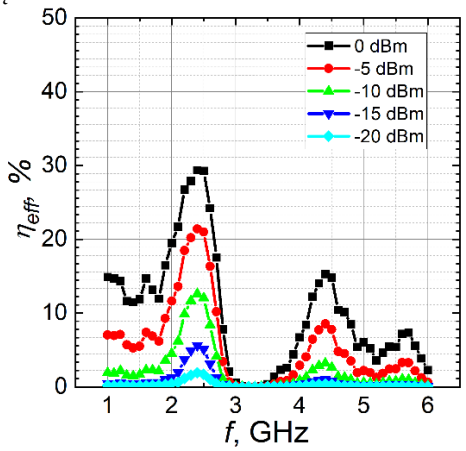


1 pav. Dviejų dažnių antena skirta energijos surinkimui iš 2.45 GHz ir 5.45 GHz bevielio ryšio tinklo a) antenos vaizdas iš priekio, b) antenos vaizdas iš galo.

Įtampos keitiklio iš kintamos į nuolatinę realizacijai buvo nuspręsta naudoti Greinacherio įtampos daugintuvo schemą, kur įtampos lyginimo funkciją atlieka du SMS7630 Šotki diodai.

Energorinkio efektyvumo priklausomybės nuo mikrobangų dažnio grafikas yra pavaizduotas 2 pav. Iš grafiko matyti, kad didžiausias energorinkio efektyvumas pasiekiamas ties 2.45 GHz. Aukštesniuose dažniuose efektyvumas krenta ir siekia tik 9 %. Tai gali sąlygoti sumažėjęs Šotki diodo efektyvumas ar nepakankamai gerai suprojektuota impedanso suderinimo grandinė.

Darbo metu buvo pasiekti 29.5% naudingumo koeficientas o maksimali įtampa 0.45 V, esant 0 dBm spinduliuotei. Gauti rezultatai rodo didelį potencialą tokio tipo energorinkio panaudojimui įvairių pasyvių jutiklių maitinimui.



2 pav. Energorinkio efektyvumo priklausomybė nuo elektromagnetinės spinduliuotės patenkančios į energorinkio įėjimą galios

Reikšminiai žodžiai: mikrobangos, bevielis ryšys, energijos surinkimas.

Padėka

Projektas bendrai finansuotas iš Europos regioninės plėtros fondo lėšų (projekto Nr. 01.2.2-LMT-K-718-03-0038) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT)

Literatūra

[1] Ku, Meng-Lin, Wei Li, Yan Chen, and KJ Ray Liu. "Advances in energy harvesting communications: Past, present, and future challenges." IEEE Communications Surveys & Tutorials 18, no. 2 (2015): 1384-1412.

[2] Balani, Warsha, Mrinal Sarvagya, Tanweer Ali, Manohara Pai MM, Jaume Anguera, Aurora Andujar, and Saumya Das. "Design techniques of super-wideband antenna–existing and future prospective." IEEE Access 7 (2019): 141241-141257.

Molekulinių pluoštelių epitaksijos sąlygų įtaka Kvantinių kaskadinių lazerių paviršiaus kokybei

MBE growth conditions influence on Quantum Cascade laser surface quality

Karolis Stašys[1], Jan Devenson[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
Karolis.stasys@ftmc.lt

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

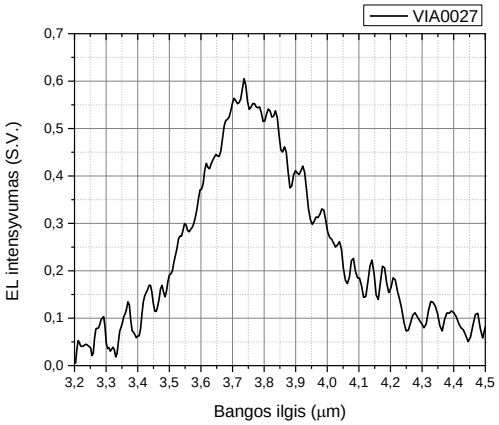
Šiame darbe mes tiriame, kaip InAs kristalinių padėklų oksido desorbcija ir stipriai Si-legiruoto plakiruojančio sluoksnio augimo sąlygos, taip pat plokštelių temperatūros pasiskirstymas, įtakoja defektų tankį suformuotoje struktūroje. Defektų tankis yra labai svarbus QCL plokštelių kristalų parametras,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

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

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



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



2 pav. QCL kristalo elektroliuminescencijos spektras.

Reikšminiai žodžiai: MPE, QCL, Indžio Arsenidas, deoksidacija

Literatūra

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

Naftiridino fragmentus turinčių elektroaktyvių organinių junginių sintezė ir savybės

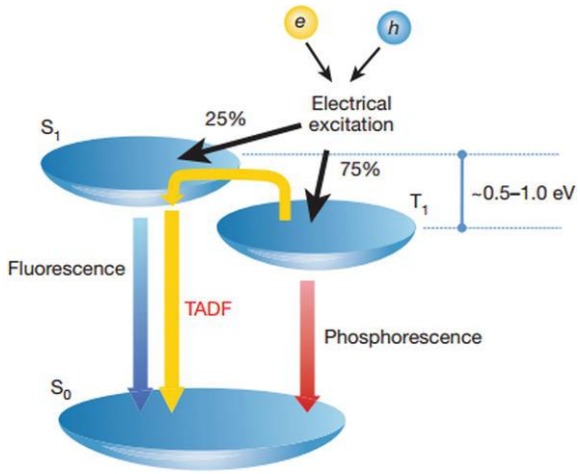
Synthesis and properties of electroactive compounds with naphthyridine moieties

Lukas Dvylys[1], Rasa Keruckienė[1], Juozas Vidas Gražulevičius[1]
[1]Kauno technologijos universitetas, Polimerų chemijos ir technologijos katedra, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas
lukas.dvylys@ktu.edu

Nuo pirmojo Tang'o ir Van Slyke'o pranešimo apie organinius šviesą skleidžiančius diodus (OLED) praėjo daugiau nei trys dešimtmečiai, per kuriuos OLED technologija smarkiai pažengė į priekį [1]. OLED – elektroliuminescenciniai optoelektronikos prietaisai, kurie skleidžia šviesą per juos tekant elektros srovei [2]. Šviesa generuojama dėl elektronų ir skylių poros, vadinamos eksitonu, rekombinacijos, vykstančios tarp elektrodų [3].

Pagrindiniai OLED privalumai lyginant su įprastais skystųjų kristalų ekranais yra ryškus, aukštos kokybės ir kontrasto vaizdas, žema veikimo įtampa bei galimybė formuoti lanksčius paviršius. Šios savybės leidžia juos panaudoti gaminant įvairių išmaniųjų įrenginių ekranus, didelius monitorius ar apšvietimo įrenginius [1].

Yra trijų kartų OLED spinduoliai. Pirmos kartos OLED – tai įprastos fluorescencinės molekulės, kurios gali pasiekti tik 25 % teorinį efektyvumą, nes emisijai panaudojami tik singletiniai eksitonai. Antros kartos OLED priklauso fosforescencinės medžiagos, kurios dėl stiprios sukinio-orbitalės sąveikos gali pasiekti iki 100 % vidinį kvantinį efektyvumą (IQE). Tačiau fosforescenciniuose emiteriuose naudojami reti ir brangūs pereinamieji metalai (iridis, platina). Šio trūkumo neturi trečios kartos termiškai aktyvuotos uždelstosios fluorescencijos medžiagos (TADF) [1].



1 pav. Fluorescencijos, fosforescencijos ir TADF mechanizmai [4]

Pagrindinis TADF medžiagų kūrimo principas – molekulės erdvinis pasukimas tarp donorinės (D) ir akceptorinės (A) grupės, kas leidžia pasiekti didelį atskyrimą tarp aukščiausios užimtos molekulinės orbitalės (HOMO) ir žemiausios neužimtos molekulinės orbitalės (LUMO) bei mažą energetinį tarpą (ΔE_{ST}) tarp singletinės ir tripletinės būsenos. D-A pasuktiems junginiams būdinga gera krūvio pernaša (CT) ir potencialiai greita ir efektyvi atgalinė interkombinacinė konversija (rISC), leidžianti emisijai panaudoti tiek singletinius, tiek tripletinius eksitonus. Todėl jie yra labai patrauklūs OLED gamyboje [5].

Dažnai teigiama, kad TADF OLED gali pasiekti 100% IQE, tačiau jų pritaikymą riboja platūs ir batochromiškai pasislinkę fluorescencijos spektrai bei didelė D-A pasukimo kampų įvairovė. Sukurti TADF spinduolį su siaura emisijos juosta nėra lengva, ypač kuriant mėlynos spalvos OLED [5]. Tai parodo, kad labai svarbi tokių medžiagų paieška.

Šiame darbe buvo susintetinti du elektroaktyvūs organiniai junginiai, turintys elektroakceptorinį naftiridino fragmentą. Kaip elektrodonorinis fragmentas panaudotas karbazolas dėl puikių jo savybių: pigus, pasižymi geru terminiu ir elektrocheminiu stabilumu, paprasta keisti savybes įvedant įvairius pakaitus [3]. Taip pat prie karbazolo buvo prijungtos ir dvi skirtingos alkil-grandinės, siekiant išsiaiškinti jų įtaką savybėms.

Bus pristatyta minėtų junginių sintezė, terminės, elektrocheminės, fotoelektrinės bei fotofizikinės savybės.

Reikšminiai žodžiai: OLED, TADF, naftiridinas.

Literatūra

[1] CHEN, C., et. al. *Journal of Materials Chemistry C*. Royal Society of Chemistry, 2019, vol. **7**, 4673.
[2] UGALE, A., et. al. Elsevier, 2018, 59–97, ISBN 9780128138403.
[3] WEX, B., and KAAFARANI, B. R. *Journal of Materials Chemistry C*. Royal Society of Chemistry, 2017, vol. **5**(34), 8622–865.
[4] UOYAMA, H., et. al. Nature, vol. **492**(7428), 234–238 (2012).
[5] KREIZA, G., Journal of Materials Chemistry C. Royal Society of Chemistry, 2020, vol. 8, 8560-8566.

PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF PYRIMIDINE-BASED TADF EMITTERS

Kamilė Bareikaitė[1], Rokas Skaisgiris[1], Jelena Dodonova[2], Sigitas Tumkevičius[2], Saulius Juršėnas[1]

[1] Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania
[2] Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Lithuania
kamile.bareikaite@ff.stud.vu.lt

Organic light emitting diodes (OLEDs) are devices of great potential and interest. However, 75% of electrically injected charge in the OLED ends up in non-emissive triplet states. Triplets can be harvested through the mechanism of thermally activated delayed fluorescence (TADF), where thermal energy is exploited to upconvert triplets to emissive singlet state. As a result, it is possible to achieve up to 100% internal efficiency, without the use of any heavy metals as it is usual in efficient phosphorescent devices [1]. To achieve efficient TADF, the energy gap between the lowest singlet and triplet states (ΔE_{ST}) should be minimized, this is usually reached by spatially separating the HOMO and LUMO states in charge transfer compounds, composed of electron donor and acceptor [2].

In this work, photophysical properties of new pyrimidine-based emitters were investigated - a pyrimidine acceptor with a tert-butyl carbazole donor attached to it at different places (fig. 1). Standard photophysical properties analysis was conducted - absorption, emission, time-resolved fluorescence experiments - in air or vacuum and in room temperature as well as 50K. The obtained data revealed that attaching donor at different positions leads to emission wavelength shift from 483 nm in compound CP2 to 437 nm in compound CP6. Moreover, the molecule with donors at the *ortho* and *meta* positions (CP2) shows the smallest ΔE_{ST} gap (135meV) while for the other compounds it was above 250meV. This may be the result of sterically crowding of donor units leading to larger twist angles and in turn larger separation of HOMO – LUMO orbitals [3]. The reduced ΔE_{ST} led to CP2 having the largest amount of delayed emission – 68% compared to 58% and 20% for compounds CP4 and CP6, respectively. The origin of delayed fluorescence was attributed to TADF emission due to being quenched in low temperature of 50 K (fig 1. decay kinetic).

In conclusion, carefully selecting the point of attachments for donor units can lead to superior TADF emission properties.

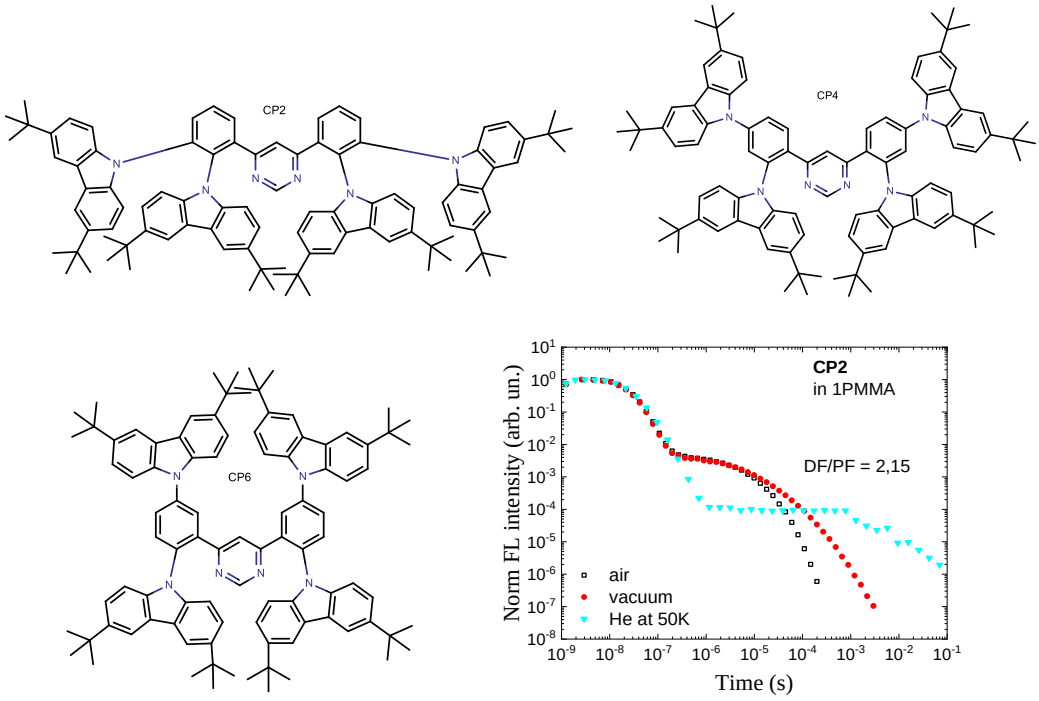


Fig. 1 Pyrimidine – carbazole TADF compounds analyzed in this work and the decay kinetics of compound CP2 in 1 wt% PMMA films at room temperature in air and vacuum ambient and at 50 K temperature.

[1] K. Goushi, K. Yoshida, K. Sato, C. Adachi, Organic light-emitting diodes employing efficient reverse intersystem crossing for triplet-to-singlet state conversion, Nature Photonics **6**, 253–258 (2012).
[2] F. B. Dias et al., Photophysics of thermally activated delayed fluorescence molecules, Methods and Applications in Fluorescence **5**, 012001 (2017).
[3] T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, L. Jagintavičius, J. Bucevičius, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, S. Tumkevičius, Emission wavelength dependence on the rISC rate in TADF compounds with large conformational disorder, Chemical Communications **55**, 1975-1978 (2019).

Struktūriniai ir fotoliuminescencinių savybių pokyčiai elektriniu lauku paveiktose perovskitinėse plėvelėse

Changes in perovskite film structure and photoluminescence after electric field stressing

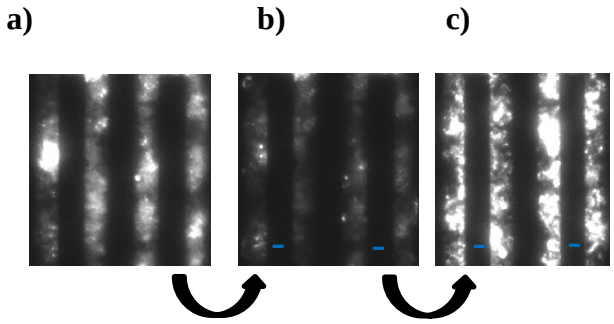
Simonas Driukas[1], Vidmantas Gulbinas[1], Danielius Rutkauskas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių skyrius, Fotoelektronikos laboratorija, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
simonas.driukas@ftmc.lt

Pastaruoju metu puslaidininkių ir optoelektronikos mokslo srityse didelio susidomėjimo sulaukė hibridiniai metaloorganiniai perovskitai. Šios medžiagos yra lengvai sintetinamos iš tirpalo ir pasižymi geromis optoelektroninėmis savybėmis, dėl kurių perovskitai gali būti pritaikomi saulės elementuose, fotodioduose, šviestukuose ir kituose puslaidininkiniuose prietaisuose [1]. Tačiau daugelis perovskitų savybių, įskaitant jų atsparumą elektrinio lauko poveikiui, nėra suprasti.

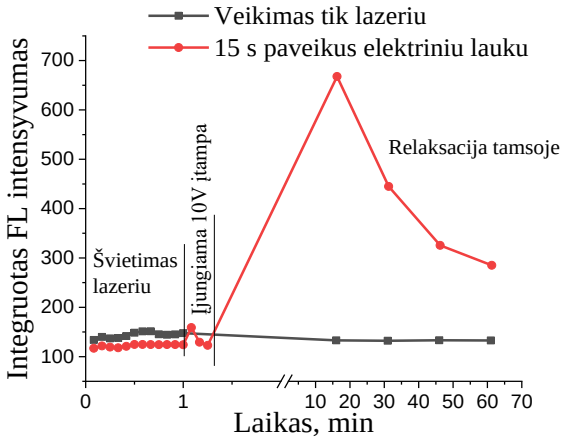
Šiame darbe buvo siekiama išsiaiškinti procesus, vykstančius veikiant perovskitinę plėvelę elektriniu lauku. Fotoliuminescenciniu (FL) mikroskopu buvo stebimi metilamonio švino jodido (MAPI) perovskitinių plėvelių FL pokyčiai, prijungiant skirtingo stiprumo įtampą. Tuo tikslu perovskitinės plėvelės buvo liejamos ant periodiškai pasikartojančių platinos elektrodų, tarp kurių yra 10 μm atstumas.

Atlikus šiuos matavimus buvo pastebėti trys efektai. Pirmiausia, įjungus elektrinį lauką buvo matomas FL gesimas, kuris prasideda nuo teigiamo elektrodo krašto. Toliau veikiant laukui, FL vaizdas keičiasi iš homogeniško į pavienius, stipriai šviečiančius taškus (1 pav. b)), kurių pozicija nuolat kinta. Įtampą išjungus, taškų judėjimas sustoja ir FL stipriai padidėja prie buvusio neigiamo elektrodo. Siekiant išsiaiškinti ar FL intensyvumo padidėjimas po elektrinio lauko poveikio nėra jau žinomas šviesos „mirkymo“ (angl. „light-soaking“) reiškinys, buvo atlikti papildomi relaksacijos matavimai, fiksuojant FL vaizdą kas 15 min. Iš šio matavimo paaiškėjo, kad net trumpai (15 s) paveikus plėvelę 10 V įtampa, FL intensyvumas gali padidėti ~6 kartus plėvelei esant tamsoje (2 pav.). Tuo tarpu tik šviečiant lazeriu, FL didėjimas yra kur kas mažesnis.

Šiuos reiškinius mes susiejome su elektrinio lauko indukuota jonų migracija perovskito plėvelėje, dėl kurios keičiasi perovskito kristalinė struktūra ir metalo-perovskito energetinių lygmenų sandūra. Dėl pakitusios energetinės struktūros galimai prasideda krūvininkų injekcija į perovskitą ir matomas srovės stiprinimas, kuris degraduoja perovskitą ir gesina FL. Išjungus elektrinį lauką srovė nustoja tekėti ir dėl jonų judėjimo „užgydyta“ plėvelė pradeda stipriai šviesti.



1 pav. Mikroskopinis FL vaizdas skirtingais matavimo momentais. a) Prieš įjungiant el. lauką. b) Tik įjungus el. lauką. c) išjungus el. lauką.



2 pav. Viso vaizdo FL intensyvumo pokytis skirtingais kadrais. Kadro kaupinimo trukmė 5 s.

Reikšminiai žodžiai: perovskitai, fotoliuminescencija (FL), elektrinis laukas.

Literatūra

[1] Li, J., Duan, J., Yang, X., Duan, Y., Yang, P., & Tang, Q. (2020). Review on Recent Progress ofLead-Free Halide Perovskites in Optoelectronic Applications. Nano Energy, 105526.doi:10.1016/j.nanoen.2020.105526

Lazerinių diodų su AlGaAs stačiakampėmis ir parabolinėmis kvantinės duobėmis žemo dažnio triukšmo charakteristikos

Noise characteristics of rectangular and parabolic AlGaAs QWs -based LDs

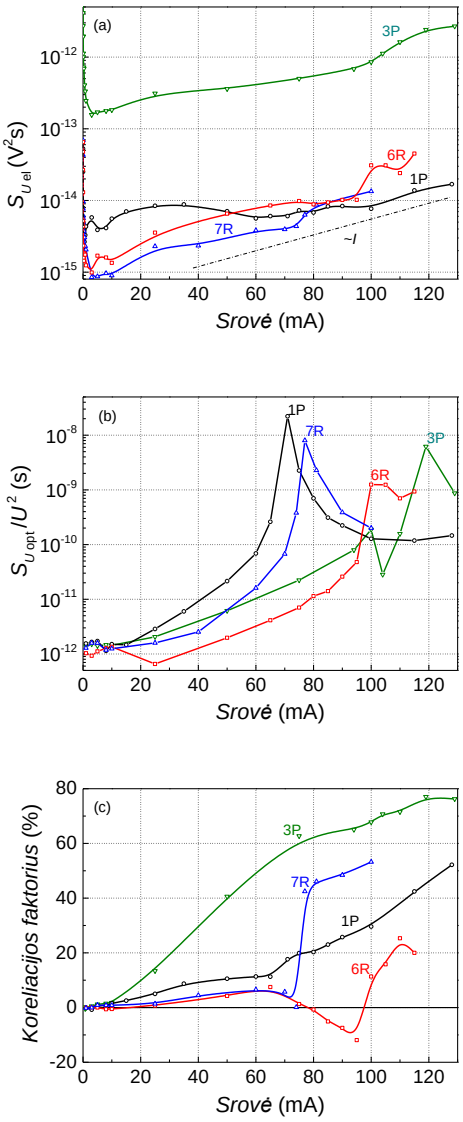
Simona Armalytė[1], Justinas Glemža[1], Sandra Pralgauskaitė[1], Jonas Matukas[1], Simona Pūkienė[2], Algirdas Jasinskas[2], Vladimir Agafonov[2], Mindaugas Kamarauskas[2], Andrius Bičiūnas[2], Bronislovas Čechavičius[2], Renata Butkutė[2, 3]
[1]Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[3]Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
sandra.pralgauskaite@ff.vu.lt

Nepaisant to, kad šiandien lazeriniai diodai (LD) plačiai naudojami įvairiose taikymuose (telekomunikacijų sistemose, tyrimo ir praktiniuose medicinos taikymuose, aplinkos stebėsenos ir saugos jutikliuose bei sistemose ir pan.), mokslininkai nuolat ieško naujų būdų, kaip pagerinti lazerinių diodų charakteristikas ir taip praplėsti jų taikymo sritis – nuolat kuriamos ir tiriamos tiek naujų medžiagų sistemos, tiek ir nauja aktyviosios srities sandara. Šiame darbe pristatomi AlGaAs/GaAs lazerinių diodų su parabolinėmis kvantinėmis duobėmis optinių ir elektrinių fliuktuacijų tyrimai, atlikti siekiant atskleisti triukšmo šaltinius šiuose dariniuose bei įvertinti tokių lazerinių diodų kokybę ir palyginti jų triukšmo charakteristikas su standartiniais stačiakampių kvantinių duobių pagrindu gaminamais LD.

Atlikti molekulinių pluoštelių epitaksijos metodu pagamintų AlGaAs/GaAs lazerinių diodų su parabolinėmis ir stačiakampėmis kvantinėmis duobėmis aktyviojoje srityje (duobių skaičius kinta nuo 1 iki 2) žemo dažnio (10 Hz – 20 kHz) optinių ir elektrinių fliuktuacijų tyrimai temperatūros srityje nuo 71 K iki 290 K. Tirtų LD slenkstinė srovė kito (60 – 120) mA srityje, charakteringos spinduliuotės bangos ilgis siekė (785-830) nm.

Eksperimentai parodė, kad tirtų lazerinių diodų optinių ir elektrinių fliuktuacijų spektrai susideda iš $1/f$ ir Lorenco tipo sandų. Šios fliuktuacijos yra kuriamos krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų įvairiuose defektų sukurtuose pagavimo centruose, o didelis elektrinių fliuktuacijų intensyvumas mažos srovės srityje yra nulemtas srovės tekėjimo defektų suformuotais kanalais. Teigiamas koreliacijos tarp optinių ir elektrinių fliuktuacijų faktorius rodo, kad lazerių aktyviojoje srityje yra defektai, kurie moduliuoja ja tekančią srovę ir tiesiogiai veikia spinduliuotės galią, sukurdami jos fliutkuacijas. Srovės nuotėkis apie aktyviąją sritį atsispindi elektrinėse fliuktuacijose (stebimi būdingi Lorenco tipo spektrai), tačiau nedaro įtakos spinduliuotės charakteristikoms (t. y. optinėms fliuktuacijoms).

Tyrimų rezultatai parodė, kad tirtų lazerinių diodų triukšmo charakteristikos, taip pat kokybė ir ilgaamžiškumas nepriklauso nuo kvantinių duobių profilio (stačiakampės ar parabolinės) ir aliuminio kiekio duobės sluoksnyje. Parabolinių kvantinių duobių formavimas nesukuria naujų triukšmo ir degradacijos šaltinių lyginant su stačiakampių duobių dariniais.



1 pav. Lazerinių diodų su stačiakampėmis (6R ir 7R) ir parabolinėmis (3P ir 1P) kvantinėmis duobėmis elektrinių (a) ir optinių (b) įtampos fliuktuacijų spektrinio tankio, bei abipusės koreliacijos tarp optinių ir elektrinių fliuktuacijų faktoriaus (c) priklausomybės nuo srovės kambario temperatūroje 108 Hz dažniui.

Reikšminiai žodžiai: elektrinis triukšmas, lazerinis diodas, optinis triukšmas, parabolinė kvantinė duobė.

Dujų detekcijai skirtų kvantinių kaskadinių lazerių įtaisų formavimas

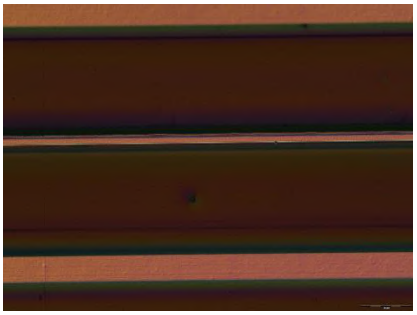
Fabrication of Quantum Cascade Laser Devices for gas-sensing application

Giedrė Čepurnaitė[1], Vytautas Jakštas[1], Karolis Stašys[1], Jan Devenson[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
giedre.cepurnaite@ff.stud.vu.lt

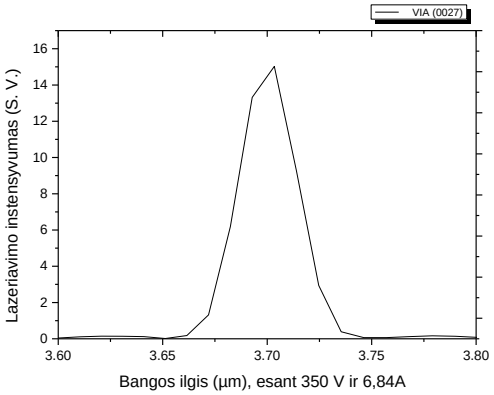
Kvantinis kaskadinis lazeris (KKL) dėl savo veikimo principo ir unikalių savybių yra vienas iš perspektyviausių koherentinės viduriniojo diapazono infraraudonosios (MIR – angl. mid-infrared) šviesos šaltinių skirtų spektroskopiniams jutikliams kurti. Šis elektromagnetinės spinduliuotės ruožas yra labai svarbus mokslui ir technologijai, nes būtent jame daugelis molekulių turi savo pagrindines rotacines – vibracines absorbcijos juostas. Potencialiausia KKL taikymo sritis yra dujų detekcija. Siaura KKL emisijos juosta ir didelis intensyvumas leidžia pasiekti didelį detekcijos jautrumą, kuris siekia dalį-per-milijardą (ppb) ir dalį-per-trilijoną (ppt). KKL yra labai kompaktiški, emisijos bangos ilgiai yra nuo ~3 µm ir gali siekti kelių dešimčių mikronų. KKL gali būti taikomi aplinkosaugoje bei medicinoje. Taip pat, šiuos lazerius galima pritaikyti pramonėje atliekant kokybės kontrolę gamybos metu. Dėl labai sparčių fotonų emisijos procesų šie lazeriai potencialiai gali būti taikomi ir duomenų perdavimui (LiFi – short for light fidelity). Šiame darbe pristatomas FTMC taikomas kvantinių kaskadinių lazerių įtaisų formavimo procesas.

KKL gamyboje dažniausiai naudojamos III-V grupės elementai (Ga, As, In, Al, Sb, P). Iš šių medžiagų yra sudaromi trinariai ar net keturnariai dariniai, tokie kaip InAlAsSb, tačiau parenkant medžiagų sistemas, yra būtina suderinti kristalų gardelės konstantas norint išvengti kristalinių defektų, kurie mažina KKL našumą, išauginant lazeriavimo slenkstines sroves. [1]

Kvantinių kaskadinių lazerių, kaip ir kitų puslaidininkinių lazerinių diodų formavimas prasideda nuo molekulinių pluoštelių epitaksijos (MPE) būdu užaugintos kristalinės struktūros paruošimo. FTMC naudojamoje įrangoje, MPE dažniausiai yra atliekama ant pilno arba ketvirčio 2 colių pagrindo, kurio storis gali siekti 500 µm. Pirmas žingsnis yra padėklo skaldymas, kur yra išpjaunamas 2-3 cm^2 gabalėlis. Fotolitografijos procesas prasideda nuo fotorezisto užnešimo (nusodinimo) ant plokštelės paviršiaus. FTMC taikomo proceso metu, pirmajame etape yra naudojamas teigiamas fotorezistas. Dengiamo fotorezisto sluoksnio tolygumas ir storio kontrolė yra pasiekiami naudojant *spin-coating* technologiją (4000 aps./min). Dengiamas padėklas yra sukamas lygiai vieną minutę, 1 minutę plokštelė yra džiovinama 110 ºC temperatūroje, po to vykdoma fotorezisto aktyvacija UV šviesoje (540 mJ). Tuomet plokštelė yra skalaujama dejonizuotame vandenyje ir išdžiovinama suspausto azoto srautu. Tokiu būdu paruošta plokštelė yra ėsdinama H_3PO_4:H_2O_2:H_2O (proporcijomis 3:1:3) tirpale. Ėsdinimo greitis kambario temperatūroje yra 1 µm/min., o ėsdinimo laikas priklauso nuo epitaksinių sluoksnių storio. Šis etapas yra užbaigiamas nuplaunant plokštelę dejonizuotu vandeniu ir fotorezistas nuplaunamas acetone. Šiame etape UV spindulių poveikis buvo 2 s, o fotorezistas kaitinamas dvi valandas 200 ºC temperatūroje, norint sudaryti dielektrinį sluoksnį . Metalinis kontaktas uždedamas vakuuminėje garinimo kameroje. Nusodinimas vyksta dvejais etapais: Cr sluoksnis nusėda ir sukimba su puslaidininkinio paviršiumi, o po to įvyksta Au nusodinimas. Paskutinis kvantinių kaskadinių lazerių gamybos etapas yra plokštelių skaldymas, lazerio lusto montavimas ir kontaktų prijungimas. Pagaminta KKL lustas yra skaldomas į 1,5 – 4 mm atskirus lazerinius strypus. Tada lazerio ilgis, storis bei plotis yra tikrinamas ir matuojamas Nomarskio mikroskopu (1 pav.). Po to yra gaminami lazeriniai strypai ir jie yra montuojami į korpusą, kuris atlieka aušintuvo vaidmenį. Montuojant reikia storo aukso kontakto, kad būtų užtikrintas efektyvus šilumos išsklaidymas. Radiatorius buvo naudojamas varinis dėl gero elektros ir šilumos laidumo. (≈ 400 $Wm^{-1}K^{-1}$). Lazerinis strypelis su radiatoriumi yra prilituojamas indžio lydmetalio sluoksniu.



1 pav. Lazerinio kristalo Nomarskio mikroskopijos vaizdas



2 pav. Lazerinio lusto VIA0027 lazerinės emisijos spektras

Reikšminiai žodžiai: epitaksija, QCL, litografija

Literatūra

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

Viduriniosios infraraudonosios srities VCSEL aktyviai terpei skirtų struktūrų su kvantinėmis duobėmis palyginimas

Comparative Study of Different Quantum Well Active Regions for Mid-IR VCSELS

Algirdas Jasinskas[1], Andrea Simaz[2], Mina Beshara[2], Gerhard Böhm[2], Mikhail Belkin[2], Renata Butkutė[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva
[2]Walter Schottky Institute, Am Coulombwall 4, D-85748 Garching, Germany
algrdas.jasinskas@ftmc.lt

Nowadays mid-Infrared spectral region is very important for various applications, such as safety, thermal imaging, medical diagnostics, industrial process control, spectroscopy. Due to presence of strong absorption lines of various gasses in this region, such as CH_4, NO_2, CO_2, N_2O etc., mid-IR has a lot of potential for detection of these gasses [1]. Vertical Cavity Surface Emitting Lasers (VCSELs) seem to be the perfect choice for this application, however, in order to produce lasing at specific mid-IR wavelengths, proper active region has to be chosen. For wavelengths above 2.6 µm, GaSb technological platform has to be used, which faces a lot more challenges than GaAs or InP platforms typically used in shorter wavelength lasers [2].

The goal of this research was to find a proper active region design for long wavelength (above 3 micrometers) VCSELS. Three different designs were considered: type-I - InGaAsSb quantum wells (QWs) with AlGaSb barriers, type-II - W-shaped QWs with InAs electron confining layers and GaInSb hole confining layers, as well as type-II - M-shaped QWs.

Molecular Beam Epitaxy (MBE) was used for growth of the QW structures on unintentionally doped GaSb substrate. Optical microscopy was used to determine surface morphology and overall quality of grown films. Optical properties of the active region were studied by room temperature (RT) and 4K photoluminescence (PL) measurements. To imitate removal of the surface oxide before second epitaxial growth (two-step process is necessary for production of GaSb VCSEL), the as-grown samples were additionally annealed for 30 minutes at 500°C temperature and remeasured to determine the effect of annealing on QW optical properties.

It was found, that while type-I QWs do have highest PL intensities, they suffer from high post-annealing spectral shift. This undesirable shift would complicate technological processes in VCSEL production. Type-II M-shaped active region was expected to have superior luminescent properties [3], however, experimental characterisation also has shown significant post-annealing spectral shift (Fig. 1). Only type-II W-shaped QW structure had virtually no spectral shift as well as exhibited higher PL intensity. Thus, those structures were applied in production of MID-IR VCSEL.

Furthermore, various designs and growth conditions of QW structure, such as InAs layer thickness and growth temperature were optimized in order to tune the emission wavelength and achieve maximum PL intensity.

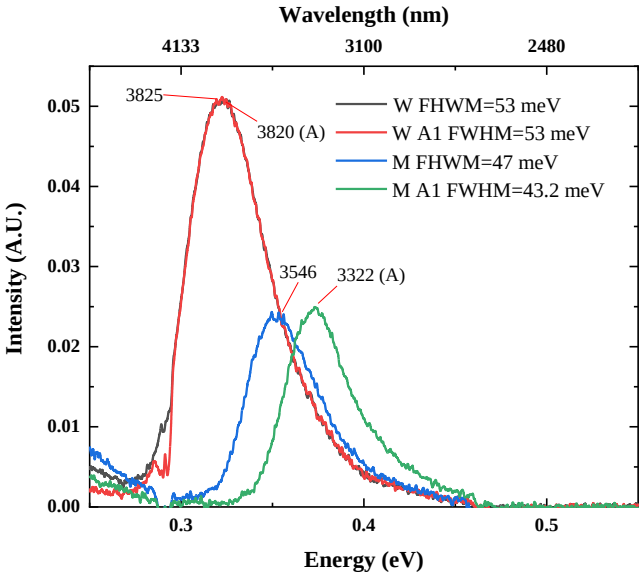


Fig. 1. Photoluminescence spectra of W- and M-shaped type-II quantum wells. Spectra labelled with (A) are attributed to annealed samples, while the other spectra are measured for as-grown samples.

Keywords: VCSEL, MID-IR, MBE, quantum well, photoluminescence.

References

[1] A. Lambrecht, K. Schmitt, *Mid-infrared gas-sensing systems and applications*, Mid-infrared Optoelectronics. Materials, Devices and Applications (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, 2020).
[2] S. R. Segal et al, Appl. Advanced Photonics, paper IM4B.3 (2018).
[3] K. Ryczko and G. Sek, Optical Materials 88, 252-255 (2019).

Optimization of GaInAs MQW for NEAR INFRARED VERTICAL-EXTERNAL-CAVITY SURFACE-EMITTING LASERS

Andrea Zelioli[1], Algirdas Jasinskas[1], Simona Pūkienė[1], Lukas Jočionis[1], Bronislovas Čechavičius[1], Evelina Dudutienė[1] and Renata Butkutė[1,2]

[1] Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania
[1] Institute of Photonics and Nanotechnology, Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania

andrea.zelioli94@gmail.com

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

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

VECSEL structure is demonstrated in Fig.1. To obtain lasing it is necessary to design the Bragg mirror, gain region and surface barrier layer (window) depending on the target wavelength of the laser. The gain region is usually composed from quantum well structure calculated to match the laser optical standing wave antinodes as shown in Fig.1 (black curve).

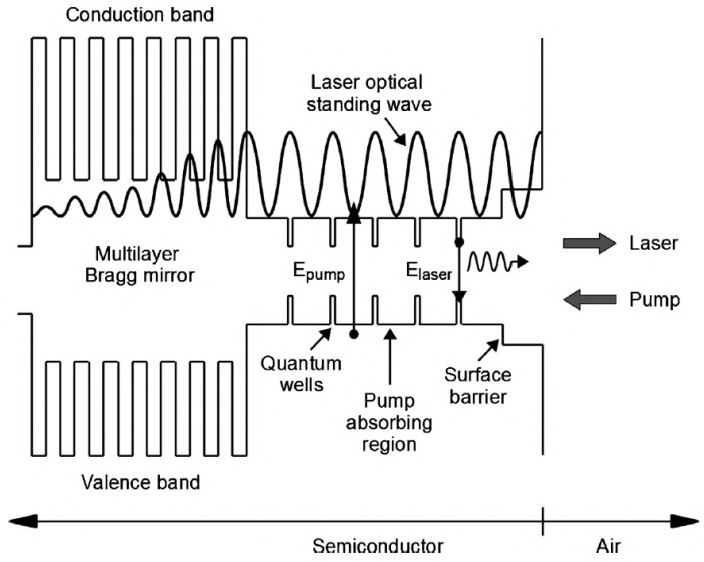


Fig. 1. Energy levels across the VECSEL structure [1].

In this work the modelling of design of VECSEL emitting at wavelength of 976nm was performed. Multiple InGaAs/GaAs quantum wells (MQWs) and AlAs/GaAs Distributed Bragg reflector (DBR) were used for VECSEL architecture. The separate layers and VECSEL structures were grown using solid-source MBE system (Veeco GENxplor R&D) equipped with standard cells for metallic Al, Ga and unique As design source generating pure arsenic dimers flux. The semi-insulating GaAs substrate oriented in (001) crystalline plane was selected for deposition of laser structures. To optimize the growth conditions In content in the well was changed from 10 to 15 %, the width of QW and barriers varied from 5 to 10 nm and from 10 to 15 nm, respectively. Quantum well number was set from 5 to 10. The reflectance of DBR was modelled for 25-30 GaAs and AlAs periods to obtain higher than 97% at central DBR wavelength of 976 nm.

All grown layers and VECSEL structures were characterized by Atomic Force Microscopy, Reflectance and Photoluminescence measurements.

1. Mark Kuznetsov, VECSEL Semiconductor Lasers: A Path to High-Power, Quality Beam and UV to IR Wavelength by Design, Semiconductor Disk Lasers. Physics and Technology. Edited by Oleg G. Okhotnikov, 2010, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

A3-B5-Bi kvantinių darinių technologijos infraraudoniesiems šviestukams

Growth and investigation of Bi-containing A3-B5 compounds

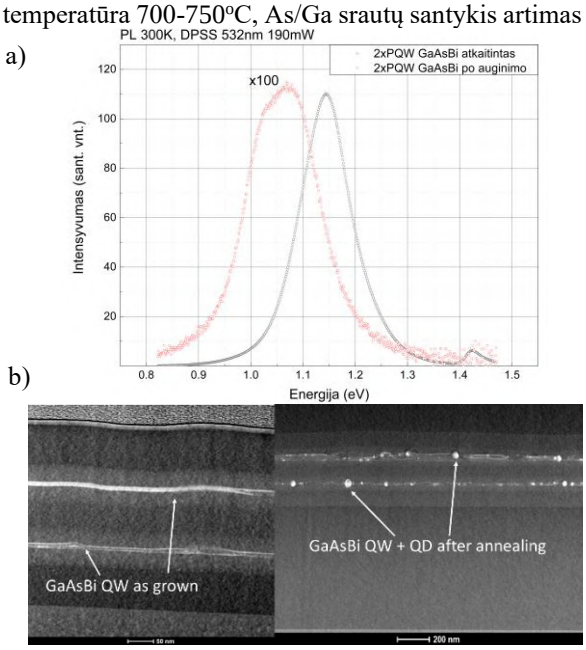
Arnas Pukinskas[1,2], Silvija Keraitytė[1,2], Nerijus Jurkūnas[1,3], Algirdas Jasinskas[1], Simona Pūkienė[1], Andrius Bičiūnas[1], Bronislavas Čechavičius[1], Virginijus Bukauskas[1], Arnas Naujokaitis[1], Martynas Skapas[1] ir Renata Butkutė[1,2]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Optoelektronikos skyrius, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva
[2]Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lietuva
[3]Optonas Ldt, Savanorių pr. 235, 02300 Vilnius, Lietuva
arnas.pukinskas@ff.stud.vu.lt

Moksliniai tyrimai artimųjų infraraudonųjų (NIR) bangų spektrinėje srityje pastaruoju metu sulaukė ypatingo dėmesio dėl šioje srityje esančių daugelio organinių molekulių vibracinės sugerties arba emisijos spektro linijų. Ateityje šios srities taikymai siejami su medicina, neinvaziniam ligų atpažinimui, su maisto pramone, toksinių bioproduktų detektavimui, su aplinkosauga, oro ir vandens taršos matavimams, taip pat su kriptografija, duomenų apsaugos sistemomis.

Pagrindiniai faktoriai ribojantys šiuolaikinių puslaidininkinių lazerinių diodų taikymą – nestabilus lazerinės spinduliuotės bangos ilgis kintant aplinkos temperatūrai bei nespindulinės Ožė rekombinacijos nuostoliai. Temperatūrinė medžiagų draustinių energijų tarpo priklausomybė lemia tai, kad šiuos lazerius reikia šaldyti norint užtikrinti stabilią jų veiklą ir taip pat didina sistemos matmenis bei kainą. Todėl naujų medžiagų, funkcionuojančių NIR srityje kambario temperatūroje, paieška yra labai aktuali.

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

Šio darbo pagrindinis tikslas yra artimosios infraraudonosios srities šviestukų su A3-B5-Bi kvantiniais dariniais – kvantinėmis duobėmis ir joje esančiais kvantiniais taškais, technologijos optimizavimas. Technologinė studija leis ištirti galimybę A3-B5-Bi kvantinius darinius pritaikyti lazerinių diodų ir šviestukų aktyviojoje terpėje. Kvantinių darinių technologinių sąlygų optimizavimas darbe yra atliekamas naudojant molekulinių pluoštelių epitaksiją (MBE) ir pasitelkiant trinarius bismidinius junginis GaAsBi bei in-situ atkaitinimą kvantinių taškų formavimui. MBE optimizavimo procese pagrindinis dėmesys yra skiriamas kvantinių barjerų ir duobių sudėties ir geometrijos (duobės ir barjero pločiui, formai) paieškai, įvertinamas kvantinių duobių skaičiaus poveikis optiniams ir elektriniams parametrams, *n* ir *p* sričių legiravimai bei *i* srities tinkamiausių parametrų paieškos. Bandiniai charakterizuojami atliekant I-V ir liuminescencijos (PL ir EL) matavimus, paviršiaus morfologinius tyrimus, struktūrinė kokybė vertinama skenuojančiuoju elektronų ir peršviečiamųjų elektronų mikroskopais. PL rezultatai parodė, kad bandinių emisijų smailės svyruoja 1,035 – 1,18 eV intervale, atkaitinus bandinius, jų intensyvumas išauga 100 kartų. Peršviečiamųjų elektronų mikroskopija įrodė, jog auginant susidaro kvantinės duobės, o po atkaitinimo susiformuoja kvantiniai taškai. Optimalios GaAsBi kvantinių duobių su kvantiniais taškais auginimo sąlygos: padėklo temperatūra 380-430ºC, atkaitinimo temperatūra 700-750ºC, As/Ga srautų santykis artimas 1.



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

Reikšminiai žodžiai: NIR diodai, šviestukai, bismidai, MBE, PL, El, TEM.

Literatūra

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

GaAsBi/GaAs:Be kvantinės duobės su 10% bismuto

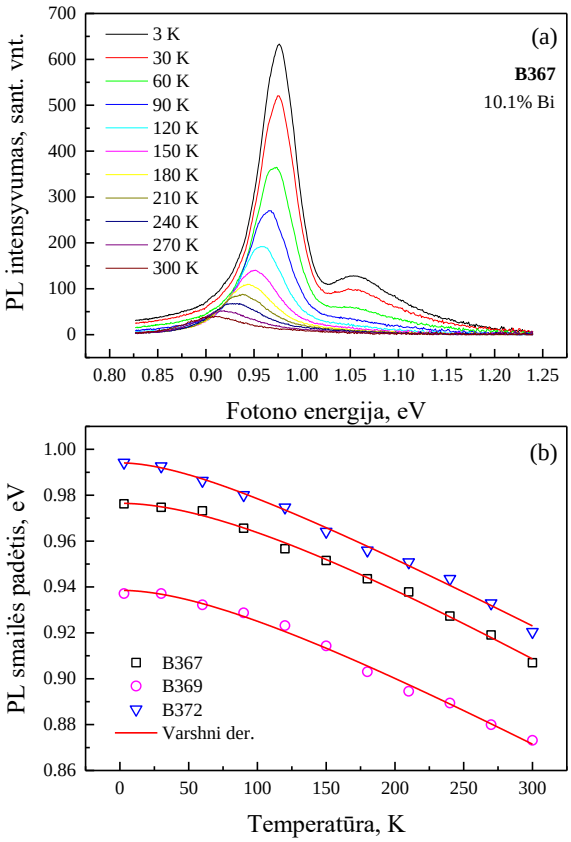
GaAsBi/GaAs:Be quantum wells containing 10% of bismuth

Monika Jokubauskaitė, Evelina Dudutienė, Algirdas Jasinskas, Bronislavas Čechavičius, Virginijus Bukauskas, Gintaras Valušis, Renata Butkutė
VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
monika.jokubauskaite@ftmc.lt

Vos keli procentai bismuto įterpti į GaAs gardelę, ženkliai sumažina šios naujos medžiagos – GaAsBi – draustinių energijų tarpą (E_g). Taip pat, pastebėta, kad GaAsBi E_g silpnai priklauso nuo gardelės temperatūros, o GaAsBi, su didesne nei 10.5% bismuto koncentracija, sukinio-orbitinio suskilimo energija viršija draustinių energijų tarpą. Tai lemia efektyvų nespindulinės Auger rekombinacijos sumažėjimą [1]. Dėl šių savybių, GaAsBi yra potencialus kandidatas kuriant ilgabangius optoelektronikos prietaisus, kurių veikimas silpnai priklauso nuo temperatūros [2]. Visgi, norint sukurti ir optimizuoti tokius optoelektronikos prietaisus, svarbu žinoti GaAsBi optines savybes ir elektroninę struktūrą.

Šiame darbe tiriamos molekulinių pluoštelių epitaksijos metodu (MBE) užaugintos pavienės GaAsBi/GaAs:Be kvantinės duobės, kuriose bismuto kiekis siekia ~10%. Taip pat, n-tipo GaAs barjeriniai sluoksniai buvo kompensuoti juos skirtingai legiruojant beriliu: $N_{Be} = 5 \times 10^{17}$ cm^{-3}, 1×10^{18} cm^{-3} ir 3×10^{18} cm^{-3}, bandiniams B367, B369 ir B372, atitinkamai. Struktūrinė kvantinių darinių analizė parodė, kad QW pasižymi aukšta kristaline kokybe ir aštriomis sąlyčio ribomis tarp sluoksnių.

Temperatūriniai fotoliuminescencijos (PL) matavimai buvo atlikti 3 – 300 K temperatūrų intervale naudojant skirtingus sužadinimo intensyvumus. Optinių savybių tyrimo rezultatus iliustruoja 1(a) pav., kuriame pavaizduoti bandinio B367 temperatūriniai PL spektrai. Visos trys tirtos QW struktūros pasižymi emisija ties 1300 nm (0.95 eV). Skaitmeniniai skaičiavimai parodė, kad žemose temperatūrose aukštesnių energijų srityje stebimas antras PL ypatumas (žr. 1(a) pav.) gali būti priskirtas optiniams šuoliams iš aukštesnių lygmenų. Analizuojant spektrus, matuotus skirtingose temperatūrose, buvo nustatyta, kad temperatūrinis PL smailių spektrinės padėties kitimas (1(b) pav.) gerai seka Varshni dėsnį su parametrais, mažesniais nei GaAs [3]. Tai svarbus ypatumas siekiant nagrinėjamas struktūras pritaikyti optoelektronikoje. Tiriant, PL smailių intensyvumo priklausomybę nuo sužadinimo galios buvo nustatyta, kad net kambario temperatūroje dominuoja spindulinės rekombinacijos kanalas. Galiausiai, skaitmeniniai QW skaičiavimai atskleidė, kaip kinta juostinė struktūra keičiant berilio koncentraciją barjeriniuose sluoksniuose. Nustatyta, kad esant didžiausiai tirtai Be koncentracijai (3×10^{18} cm^{-3}) padidėja elektronų ir sunkių skylių banginių funkcijų persiklojimas, o tai lemia PL intensyvumo išaugimą.



1 pav. GaAsBi/GaAs:Be QW temperatūriniai PL spektrai (a) ir visų tirtų struktūrų PL smailių padėties kitimo priklausomybės nuo temperatūros (b).

Reikšminiai žodžiai: molekulinių pluoštelių epitaksija, kvantinės duobės, bismidai, fotoliuminescencija.

Literatūra:

[1] M. Usman, C. A. Broderick, A. Lindsay, E. P. O'Reilly, Phys. Rev. B **84**(24), 245202 (2011).
[2] K. K. Nagaraja, Y. A. Mityagin, M. P. Telenkov, I. P. Kazakov, Crit. Rev. Solid State **42**, 239 (2017).
[3] Y. P. Varshni, Physica 3**4**(1), 149 (196).

Dviejų liuminescencijos juostų nepoliniuose InGaN/GaN kvantinių duobių spektruose tyrimas

Investigation of two luminescence bands in nonpolar InGaN/GaN multiple quantum wells spectra

Elena Valkiūnaitė[1], J.Mickevičius,[1] R.Aleksiejūnas[1]

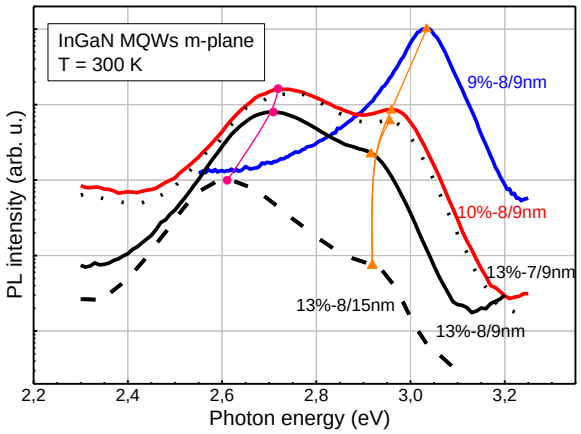
[1]Vilniaus universitetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
elena.valkiunaitė@ff.stud.vu.lt

InGaN dariniai yra plačiai naudojami fotoninių prietaisų, veikiančių regimajame spektro ruože, gamybai. Dažniausiai naudojami poliniai (c-plokštumos) InGaN dariniai dėl išvystytos auginimo technologijos, tačiau jų optines savybes ir efektyvumą stipriai riboja vidinis elektrinis laukas bei krūvininkų lokalizacija. Vidinio elektrinio lauko galima išvengti naudojant nepolinius (a- ir m-plokštumos) InGaN darinius, kas leidžia pagerinti optines savybes bei lemia stipriai poliarizuotą emituojamą šviesą. Kita vertus, krūvininkų lokalizacija nepoliniuose dariniuose niekur nedingsta ir netgi lemia kelių juostų atsiradimą fotoliuminescencijos (FL) spektruose.

Darbe tirti InGaN dariniai buvo užauginti ant m-plokštumos GaN padėklo, naudojant cheminio metalo-organinio junginio nusodinimo iš garų fazės (MOCVD) technologiją. Tirtus bandinius galima suskirstyti į dvi grupes: i) dariniai su nekintančiais kvantinės duobės ir barjero storiais ir skirtingu indžio kiekiu tarp 9% ir 13% bei ii) fiksuotu indžio kiekiu (13%) ir skirtingais kvantinės duobės ar barjero storiu. Bandinių liuminescencijos ypatumai buvo tiriami naudojant įprastinę liuminescencinę spektroskopiją plačiame temperatūrų ir sužadinimų intervale – keičiant sužadinimo galios tankį ir/ar temperatūrą nuo 4 W/cm^2 iki 10 MW/cm^2 bei nuo 8 iki 300 K, atitinkamai. Pagrindinis dėmesys buvo skiriamas kelių liuminescencijos juostų, matomų InGaN/GaN kvantinių duobių FL spektruose, dinamikai.

InGaN/GaN bandinių FL spektrai, išmatuoti 300 K temperatūroje esant žemam sužadinimui yra pateikti 1 pav. Bandinio su žemiausiu indžio kiekiu (9%) FL spektre matoma tik viena juosta, tačiau indžio kiekį padidinus iki 10% atsiranda antra juosta, esanti 220 meV žemiau. Dar padidinus indžio kiekį iki 13% - abi juostos šiek tiek pasislenka į žemesnes energijas, tačiau atstumas tarp jų lieka toks pat. Nedidelis kvantinės duobės pločio varijavimas didelės įtakos nedaro, tačiau barjero pločio padidinimas iki 15 nm lemia stiprų žemesnės energijos FL juostos poslinkį, kai atstumas tarp dviejų FL juostų padidėja iki 310 meV.

Atstumo tarp energijos juostų pokyčio dydis (90 meV) atitinka išilginį optinį fononą. Temperatūrinės FL spektrų priklausomybės irgi atskleidė stiprią krūvininkų-fononų sąveiką, kuri pasireiškia spektre matomais fononiniais pakartojimais. Priklausomai nuo InGaN/GaN darinio parametrų buvo matomi du ir daugiau fononiniai pakartojimai. Stipri krūvininkų-fononų sąveika bei įprastos S-formos smailės padėties nebuvimas atspindi stiprią krūvininkų lokalizaciją.



1 pav. InGaN/GaN m-plokštumos bandinių su skirtingais struktūros parametrais (a) ir skirtingu In kiekiu (b) FL spektrai, išmatuoti 300 K temperatūroje, esant žemam sužadinimui.

Apibendrinus, FL juostų poslinkis didinant sužadinimą ir/ar temperatūrą virsta kelių rekombinacijos mechanizmų konkurencija. Remiantis eksperimentiniais matavimais bei skaičiavimais, aukštų energijų FL juosta yra priskiriama šuoliams tarp žemiausių kvantinės duobės lygmenų, tuo tarpu, žemų energijų juostą lemia šuoliai iš lokalizuotų būsenų kartu su nemažu fononinių pakartojimų indėliu.

Reikšminiai žodžiai: InGaN, fotoliuminescencija, krūvininkų lokalizacija, krūvininkų-fononinų sąveika.

Tiesioginė karštųjų krūvininkų įtaka saulės elemento su p-n sandūra veikimui

Direct impact of hot carriers on the operation of a p-n junction solar cell

Oleksandr Masalskyi[1], Jonas Gradauskas[1,2], Steponas Ašmontas[2], Algirdas Sužiedėlis[2], Aldis Šilėnas[2], Aurimas Čerškus[1,2], Aleksej Rodin[2], Ihor Zharchenko[2]
[1]Vilnius Gediminas Technical University, Faculty of fundamental sciences, Saulėtekio av. 11, LT-10223 Vilnius
[2]Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius
oleksandr.masalskyi@vilniustech.lt

The Shockley-Queisser theory puts limits on efficiency of a single-junction solar cell [1]. It assumes that only photons having energy close to a semiconductor forbidden energy gap are used effectively in the formation of an electrical output signal. Residual extra energy of the high energy photons not used for the electron-hole generation is scored up only through the process of carrier thermalization, i.e. through the lattice heating, and this way influencing solar cell efficiency. Low energy photons are assumed to be not absorbed at all.

Our investigation is initiated by our confidence that photons having energy larger than the band gap as well as photons having energy smaller than the forbidden energy gap need to be accounted through the hot carrier phenomena participating in the photoresponse formation before the lattice heating.

In this work, we proceed experimental results demonstrating direct impact of the hot carriers on the operation of a single-junction solar cell. As objects of investigation, GaAs and Si p-n-junction were illuminated with ns-long laser pulses of 1.06 μm and 1.34 μm wavelength at different intensities (see Fig.1).

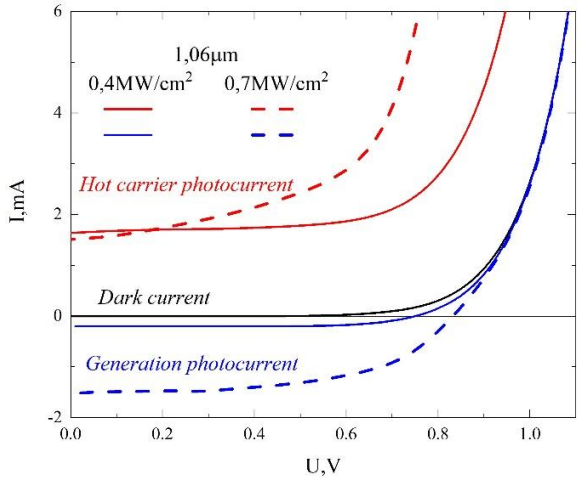


Figure 1. I-V characteristics of GaAs p-n junction in the dark (black line) and under pulsed 1.06 μm laser illumination: blue lines stand for photocurrent caused by carrier pair generation, and red ones represent the hot carrier photocurrent at different laser intensities (0.4 MW/cm^2, solid lines; and 0.7 MW/cm^2, dotted lines).

In addition, we state that the photoresponse signal consists of three components, and we propose a model of p-n junction as a first-order linear time-invariant (LTI) system

$$\tau \frac{dU}{dt} + U = \bar{U}(t), \qquad (1)$$

where τ represents the exponential decay constant typical of each component, $U = U(t)$ is a photovoltage function of time, and the forcing function $\bar{U}(t)$ depends on the laser pulse and on the physical phenomenon giving rise to a particular photoresponse component. The model allows to reveal the individual input of three components on photoresponse signal. The first, U_G, is a relatively slow component caused by a classical electron-hole pair generation. The second one, U_{HC}, is fast, follows the laser pulse shape and has opposite polarity; this is an inherent feature of the hot carrier photovoltage. The third one, U_T, has the same polarity as U_{HC} but is much slower; it is attributed to the thermoelectric electromotive force caused by the junction heating [2].

As for conclusion, photovoltage across a p-n junction consists of three simultaneous components arising due to electron-hole pair generation, hot carrier effect and semiconductor lattice heating after the thermalization. We have developed a model that allows revealing the individual input of each component. The hot carrier photovoltage might be the reason for still experimentally unattainable Shockley–Queisser limit, and we intend to initiate the PV community to revise the theory by taking into account the direct negative impact of hot carriers. As for application, the minimized hot carrier effect will raise the efficiency of a single-junction solar cell.

Keywords: hot carriers, p-n junction, silicon, GaAs, solar cell, Shockley-Queisser theory.

References

[1] W. Shockley, H. J. Queisser, J. Appl. Phys. **32**, 510 (1961).
[2] J. Gradauskas, S. Ašmontas, et al., Appl. Sci. **10**, 1 (2020).

Changes in generated carrier recombination dynamics upon photodegradation of $MAPbI_3$ perovskite

Dž. Litvinas[1], A. Kiligaridis[2], A. Yartsev[2], I. Scheblykin[2]

[1] Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2] Division of Chemical Physics, Department of Chemistry, Lunds Universitet, Sölvegatan 39, 223 62 Lund, Sweden
dziugas.litvinas@ff.stud.vu.lt

Hybrid perovskites are an exemplary material, synthesizable using solution processing methods, only similar in their fabrication to one more group of active media – organic semiconductors. Despite promising parameters, these perovskites suffer from various sources of degradation, such as oxygen [1] and water [2] [3] aided perovskite decomposition and defect formation, impeding the longevity of this class of materials. In particular, the degradation induced by high intensity light is still poorly understood in how it affects the photodynamics of charge carriers (only a few works try systematic investigation, such as [4]). However, light exposure is the factor most straightforward to control (t_{exp}, W etc.) and was chosen for this work.

To study the photoluminescence (PL) properties of the chosen solution processed $MAPbI_3$ multigrain film on a glass substrate, a custom-built photoluminescence microscopy setup [5] was used to measure PLQY(f, P) maps and PL decays. A pulsed 485 nm laser (150ps) was used to excite the sample through an objective lens of a wide-field fluorescence microscope. Five different pulse fluences P were used, ranging from $P_1 = 4.1 \cdot 10^8$ to $P_5 = 4.9 \cdot 10^{12}$ photons/cm^2, while the frequency $f \in$ [100Hz, 80MHz]. Employing the modified Shockley-Read-Hall model (SRH+) [5], analysis of the resulting PL decays and PLQY(f, P) maps (dubbed HORSEs) yielded detailed information on perovskite photodynamics through parameters such as defect density and non-fluorescent rates.

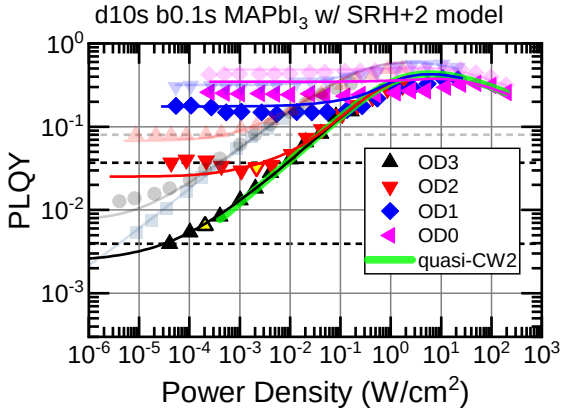


Fig. 1. Photodegraded $MAPbI_3$ PLQY(f, P) map – HORSE, fitted according to SRH+ and compared with a fresh $MAPbI_3$ HORSE.

Investigation of a $MAPbI_3$ film region in the photodegraded state required the use of the programming capabilities of the experimental setup, allowing to repeatedly bleach (for t_{bleach} = 0.1–1s) the initially degraded region (for t_{degr}(80MHz, P_5) = 10, 30s) during the HORSE data sequence or PL decay measurements, to prevent intentionally degraded $MAPbI_3$ dark recovery and photobrightening. Comparing SRH+ model fitting parameters for fresh and photodegraded perovskite region HORSEs, we report an increase in trap-mediated PL loss processes as well as emergence of rapid PL decay components. This points to an appearance of a second type of defects in the $MAPbI_3$ sample after high intensity light exposure. Furthermore, it can be speculated that the temporary induced defects are caused by reversible photochemical reactions within the perovskite at high light intensity and/or photo-assisted ion diffusion, since the timescale for dark recovery ~ 1 min – 10 h, agreeing with ion diffusion lifetimes [6].

[1] Aristidou, N., Haque, SA. et al. *Angew Chem Int Ed Engl*., **54**, 28, pp.: 8208-12 (2015).
[2] Frost, J. M., Walsh, A. et al. *Nano Lett*., **14**, 5, pp.: 2584–2590 (2014).
[3] Liu, L., Sychugov, I., et al. *J. Phys. Chem. Lett*., **10**, 864−869 (2019).
[4] Pranav H. Joshi et al. *AIP Advances* **6**, 115114 (2016)
[5] Kiligaridis, A., Scheblykin, I. G. et al. *Nat Commun* **12**, 3329 (2021).
[6] Levine, I., Kevin, D. *J. Phys. Chem. C*, **120**, 30, pp.:16399–16411 (2016)

Vienaašio sukinių suspaudimo fermioninių atomų optinėse gardelėse modeliavimas

Simulation of one-axis squeezing with atomic fermions in optical lattices

Mažena Mackoit-Sinkevičienė[1], Giedrius Žlabys[1], Tanausú Hernández Yanes[2], Marcin Płodzień[2], Emilia Witkowska[2], Gediminas Juzeliūnas[1]
[1]Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Saulėtekio av. 3, Vilnius 10257, Lithuania
[2]Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences, Lotników av. 32/46, Warsaw 02-668, Poland
mazena.mackoit@ftmc.lt, mazena.mackoit-sinkeviciene@ff.vu.lt

Enormous progress in developing strategies for surpassing classical limits on measurement precision in quantum metrology has been made [1]. A key element here is spin squeezing that is one of the most promising strategies for using entanglement to achieve a quantum advantage in practical high-precision sensing applications [2].

Estimation of the spin squeezing level is obtained as

$$\xi_s^2 = N\frac{\Delta^2\hat{S}_{\perp\min}}{\langle S\rangle^2} \qquad (1)$$

where $\langle S\rangle$ is the length of the mean collective spin and $\Delta^2\hat{S}_{\perp\min}$ is the minimal variance of the spin orthogonally to the mean spin direction i.e., spin squeezing is a quantum correlation with reduced fluctuations in one of the collective spin components.

Ultracold atomic Fermi gases in an optical lattice are used in the most precise and accurate optical lattice clocks (reaching precision record$\sim 3\times10^{-19}$ [3]), as the Pauli exclusion principle suppresses unwanted collisional frequency shifts. Furthermore, ultracold atomic gases in optical lattices are nearly perfect for realization of many condensed matter phenomena i.e., they offer various kind of Hubbard models with great flexibility of parameters [4] (Fig. 1).

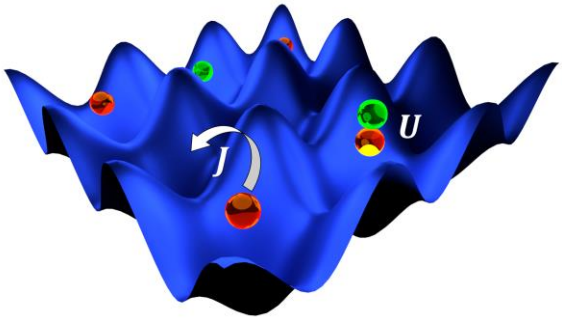


Fig. 1 A Fermi-Hubbard model with ultracold atoms trapped in the lowest band of an optical lattice. Due to Pauli's principle, tunnelling between lattice sites J is only possible if the final lattice site is empty or occupied with an atom with a different spin. Two atoms with opposite spin localized at the same lattice site have an interaction energy U. The J/U ratio and the filling determines the physics of the system.

Recently it was suggested that the interaction among identical atomic fermions needed for the spin squeezing can be induced via the spin-orbit coupling (SOC), which is generated by means of an additional laser that drives the clock transition [5].

In this work, we investigate spin-squeezed states in an optical lattice composed of ultra-cold fermions employing position-dependent SOC that can be induced in realistic experimental conditions. By choosing an appropriate propagation direction of the laser beam inducing the SOC and acting on a fermionic lattice with a sequence of such laser pulses we expect to realize efficient spin-squeezing. Additionally, we demonstrate that Hamiltonian suggested by K. Gietka [6]

$$\hat{H} = \hbar\chi\hat{J}_z^2 \qquad (2)$$

can be efficiently simulated with SOC and thus create a spin squeezing. The presented method might find application in different areas of ultraprecise metrology, where the quantum improvement is of great importance.

Key words: quantum metrology, optical lattices, spin squeezing, Fermi-Hubbard model.

References

[1] L. Pezz`e, A. Smerzi, M. K. Oberthaler, R. Schmied, and P. Treutlein, Rev. Mod. Phys. **90**, 035005 (2018).
[2] M. A. Perlin, Ch. Qu, A. M. Rey, Phys. Rev. Let. **125**, 223401 (2020).
[3] G. E. Marti *et al*., Phys. Rev. Lett. **120**, 103201 (2018).
[4] F. Schafer et al., Nat. Rev. Phys. **2**, 411 (2020).
[5] P. He et al., Phys. Rev. Research **1**, 033075 (2019).
[6] K. Gietka et al., Phys. Rev. A **92**, 043622 (2015).

3D spausdinimo technologija, skirta objektų iš keramikos kompozitinių medžiagų kūrimui

3D Printing Technology for Object Formation from Ceramic Composite Materials

Alireza Shahidi, Ada Steponavičiūtė, Vilius Stanelis, Genrik Mordas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lazerinių technologijų skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
ada.steponaviciute@ftmc.lt

Keramika pasižymi dideliu šiluminiu laidumu ir priklausomai nuo rūšies gali būti labai geras elektros laidininkas, arba izoliatorius, todėl kaip medžiaga turi itin didelį pritaikomumą. Įvairių rūšių keramika pasižymi dideliu kietumu, todėl atliekant frezavimą greitai nusidėvi įrankiai, o dėl medžiagos trapumo ją apdirbant atsiranda didelė gamybinio broko tikimybė. Pridėtinės gamybos technologijos leidžia įvardintas problemas eliminuoti, todėl 3D spausdinimas, nors dar ir ne itin plačiai taikomas, yra itin aktualus keramikinių objektų gamyboje.

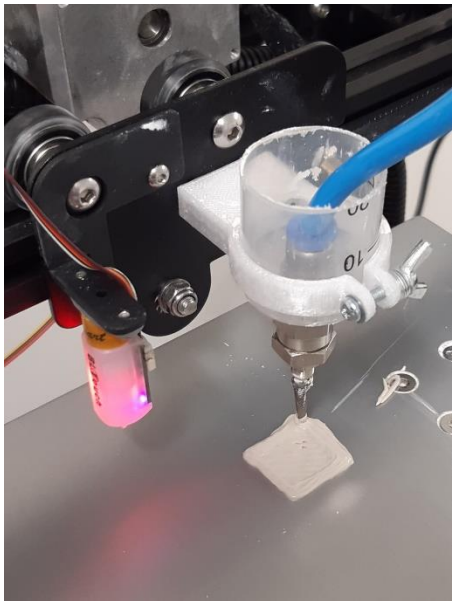
Mūsų tikslas – sukurti ir rinkai pasiūlyti pridėtinės gamybos metodą keramikinių objektų iš kompozitinių medžiagų kūrimui.

Keramikos 3D spausdinimui gali būti naudojama keramikinė medžiaga miltelių arba pastos pavidalu. Spausdinimo iš keramikos miltelių technologija yra vis dar ankstyvoje vystymo stadijoje ir nepasižymi aukšta spausdinimo kokybe [1].

Savo ruožtu, vystydami 3D spausdinimo technologiją, kurioje medžiaga yra pastos pavidalo, tikimės pasiekti geresnę spausdinimo kokybę. Spausdinimui gali būti naudojamas kaolinas, silicio oksidas (SiO_2), cirkonio oksidas (ZnO_2), aliuminio oksidas (Al_2O_3) bei kitos medžiagos.

Spausdinimas vyksta aukšto slėgio pastos padavimo sistemoje, turinčioje unikalios geometrijos vožtuvą. Vožtuvo pagalba pasta yra tiekiama į spausdinimo galvutę, kurios padėtis yra valdoma žingsniniais varikliais X ir Y ašimis Dekarto koordinačių sistemoje. Tolygų platformos judėjimą Z ašimi užtikrina priešingose platformos pusėse esantys du sinchronizuoti žingsniniai varikliai. Maksimalų visos sistemos stabilumą užtikrina valdiklis *Creality v2.2*.

Spausdinimas vyksta uždaroje 350x350x400 mm kameroje, kurioje yra palaikoma pastovi darbinė temperatūra (nustatoma kiekvienai naudojamai medžiagai individualiai). Ši spausdinimo technologija leidžia kurti sudėtingos geometrijos objektus. 1 paveiksle pavaizduotas formuojamas trimatis objektas.



1 pav. Trimačio objekto formavimas iš keramikinės pastos

Atspausdintas objektas išlaikomas uždaroje spausdinimo kameroje 2h, palaipsniui mažinant temperatūrą iki 20°C, siekiant išvengti staigaus temperatūros pokyčio poveikio atspausdintam objektui. Išdžiūvęs atspausdintas objektas kaitinamas krosnelėje 1000-1200°C temperatūroje 2h. Po kaitinimo gaunamas naudojimui tinkamas galutinis gaminys.

Reikšminiai žodžiai: 3D spausdinimas, keramika, kompozitinės medžiagos

Literatūra

[1] Y. Lakhdar, C. Tuck, J. Binner, A. Terry and R. Goodridge, *Additive manufacturing of advanced ceramic materials*, Progress in Materials Science, **116**, 2021

Itin plonų chromo dandų optinių savybių tyrimas

A study of ultrathin chromium films‘ optical properties

Alexandr Belosludtsev[1*], Anna Sytchkova[2*], Kazimieras Baltrusaitis[1], Tatjana Gric[1,3]
[1]Center for Physical Sciences and Technology, Savanoriu ave. 231, Vilnius 02300, Lithuania
[2]Optical Coatings Group, ENEA Casaccia, via Anguillarese 301, Rome 00123, Italy
[3]Department of Electronic Systems, VILNIUS TECH, Vilnius, Lithuania

Alexandr.Belosludtsev@ftmc.lt

Structural, optical, and electrical properties of ultrathin chromium films manufactured using magnetron sputtering were investigated. The films showed pure metallic chromium phase yet their refractive index and extinction coefficient result very different from previously reported in literature. Structural, electrical and optical properties of ultrathin chromium layers are discussed in detail. The obtained optical constants of ultrathin chromium films show a specific trend with the film thickness increase. Precise knowledge of optical constants of ultrathin chromium films is important for many electro-optical and optical applications.

Ultrathin metal films are widely used for optical applications, and in particular when deposited on dielectrics like glass or fused silica. The initial growth stages of ultrathin films are well known for non-linear changes in optical and structural properties of the films. The process of metal film growth on dielectrics has three stages: the formation of initial seeds and islands, the coalescence and the continuous stage. It is well known that at the initial stage, small isolated islands of metal start to form three dimensional islands on the dielectric substrate. The balance between the substrate surface energy and the energy of sputtered species determines the wetting angle of the formed islands. Hence, the type of the film growth, either Volmer-Weber[1] or Stranski–Krastanov mode. At the first stage, metal islands are not only transparent to visible and infrared radiation, but also their density remains constant. After percolation, three dimensional islands coalesce either keeping grain boundaries between them or fusing to form a boundary free island, depending on saturation and surface energies. The final continuous stage is described by the full merge of the islands and relatively insignificant change in the film reflectance and transmittance, as well in electrical and optical properties.

The aforementioned mechanisms of the film formation have been extensively studied for noble metals like Ag, Cu and Au, while for transition metals the available literature is extremely limited. Chromium is known for fast growth of ultrathin continuous films. Precise knowledge of the film properties and optical constants of ultrathin Cr may result crucial for many electro-optical and optical applications. In our recent paper,[2] the structural, electrical and optical properties of ultrathin sputtered chromium films were investigated and compared with literature data.

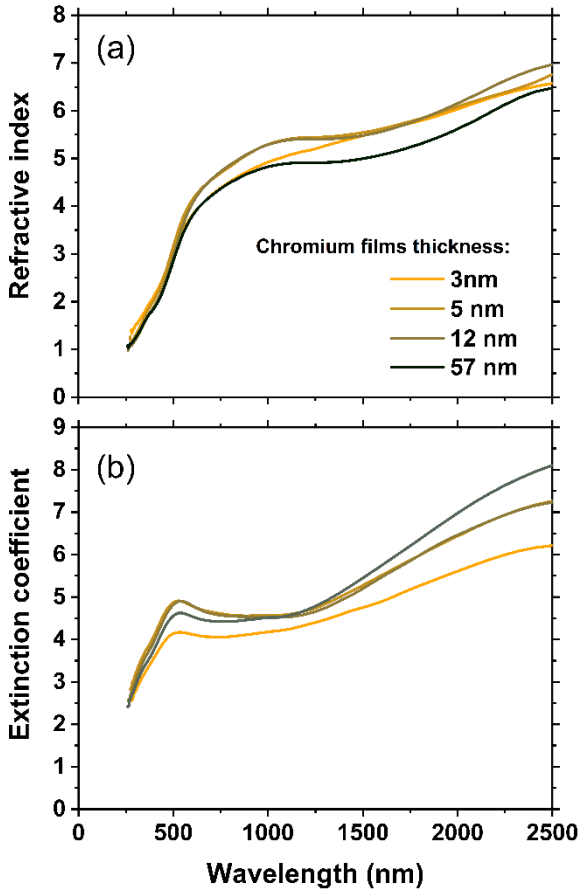


Fig 1. Optical constants of ultrathin chormium films.

Acknowledgment
This work was supported by the European Social Fund (project No 09.3.3-LMT-K-712-19-0203) under a grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT).

Literatūra

[1] A. Belosludtsev, N. Kyžas, Mater Lett **232**, 216-219 (2018).
[2] A. Sytchkova, Belosludtsev A., L. Volosevičienė, R. Juškėnas, R. Simniškis, Opt Mater, **121**, 111530 (2021).

Sluoksniuotų kompozitų su anglies nanovamzdeliais elektromagnetinis suderinamumas

Electromagnetic compatibility of composites with carbon nanotubes

Povilas Bertašius[1], Sergej Gaidukovs[2], Jan Macutkevič[1], Jūras Banys[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
[2]Rygos technikos universitetas, Kalku 1 g., LV-1658 Ryga, Latvia
pov.bertasius@gmail.com

Šiuo metu ypač aktuali yra masiškai naudojamų elektroninių prietaisų apsauga nuo perteklinio elektromagnetinės (EM) spinduliuotės fono. Patys prietaisai, kurių veikimas gali būti sutrikdytas EM bangų, ir yra EM šaltiniai. Todėl norint išlaikyti jų veiką stabilią, išorinės EM bangos turi būti nepraleidžiamos, o iš vidaus skleidžiamos – slopinamos. Šiai paskirčiai yra plačiai tyrinėjami polimerinai kompozitai su anglies nanovamzdelių, grafenu ar kitų anglies atmainų užpildu [1].

Anglies nanovamzdelių kompozitai yra patrauklūs EM bangų sugerčiai dėl ypač žemos elektrinės perkoliacijos koncentracijos – su vos apie 0.2 vol. % koncentracija gaunamos sparčiai išaugusios elektrinio laidumo vertės, išsaugant polimerinės mechanines sąvybes. Elektrinis laidumas yra reikalingas apsaugai nuo EM spindulių, tačiau per didelis laidumas gali sukelti per didelį impedanso su aplinka neatitikimą, lemiantį stiprius atspindžius. Vienas iš galimų sprendimo būtų yra palaipsniškas laidaus užpildo koncentracijos kėlimas, taip ne tik išsprendžiant staigų impedanso neatitikimą, bei sudarant papildomus slopinančius pasikartojančių atspindžių sluoksnius [2]. Pastebėta, kad maksimali apsauga kompozitų su anglies nanovamzdeliais mikrobangų diapazone pasiekiama su apie 8% tūrine koncentracija [3].

Naudojantis „melt-casting“ metodu, buvo sudaryta 1.5mm storio struktūra, turinti penkis apie 0.3 mm storio viena po kitos išdėstytus 0.2, 1, 3, 5, 8 vol. % anglies nanovamzdelių koncentracijos sluoksnius. Elektromagnetinio suderinamumo tyrimai buvo atlikti 20- 40 GHz diapazone, naudojantis formule:

$$SE_T\ (dB) = -10\log(T) = SE_A + SE_R + SE_M, \quad (1)$$

kur SE_T – praėjusios EM bangos energijos nuostoliai, SE_A – sugerta energija, SE_R – atspindėta energija, T – pralaidumo koeficientas. Taip pat atsižvelgta į efektyvią sugertį:

$$A_{eff=}(1 - T - R)/(1 - R), \quad (2)$$

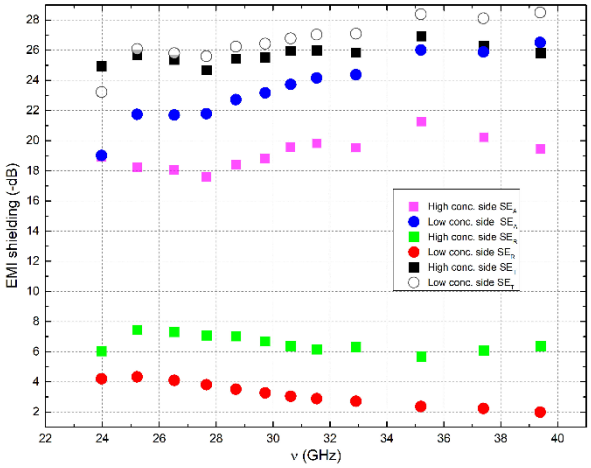
$$SE_A = -10\log(1 - A_{eff}), \quad (3)$$

kur R – atspindžio koeficientas. Atspindėta energija skaičiuojama pagal:

$$SE_R = -10\log(1 - R) \quad (4)$$

Sluoksniuotos struktūros kompozito elektromagnetinio suderinamumo tyrimų rezultatai pavaizduoti 1 pav. Apskritimais pažymėti duomenys, kai EM banga sklinda per sluoksnius anglies nanovamzdelių koncentracijos didėjimo kryptimi. Šia kriptimi sugerta EM bangos energija SE_A yra apie 23 dB ir 4 dB didesnė, nei tuo atveju, kai EM banga sklinda anglies nanovamzdelių koncentracijos mažėjimo kryptimi (pažymeta kvadratėliais, apie 19 dB). Atspindėta energija SE_R yra apie 3 dB ir 3 dB mažesnė nei kita puse (6 dB). Bendra slopinta energija beveik tokia pati abiejomis pusėmis (26 dB).

Sudarius makro lygmeniu sluoksniuoto kompozito struktūrą su anglies nanovanzdelių tūrinę koncentraciją palaipsniui kintančia nuo 0.2 iki 8 %, buvo sukurta medžiaga, turinti išilgai sluoksnių neizotropinį elektromagnetinį suderinamumą. Tokios sąvybės gali padėti paprastu būdu padidinti elektroninių prietaisų uždengimui skirtų medžiagų našumą, lyginant su homogeniniai kompozitais.



1 pav. Sluoksniuoto kompozito EM bangų pralaidumas, atspindys bei sugertis.

Reikšminiai žodžiai: Anglies nanovamzdeliai, kompozitai, elektromagnetinis suderinamumas.

Literatūra

[1] C.Wangabc, V. Murugados, J. Konge, Z. Heaf, X. Maig, Q. Shaoh, Y. Chen, L. Guoa, C. Liui, S. Angaiah, Z. Guoc, *Overview of carbon nanostructures and nanocomposites for electromagnetic wave shielding*, Carbon **140,** 696-733, 2018.

[2] S. Pande, B. P. Sing, R. B. Mathur, T. L. Dhami, P. Saini, S. K. Dhawan, *Improved Electromagnetic Interference Shielding Properties of MWCNT–PMMA Composites Using Layered Structures*, Adv. Mater. **21**, 710–715, 2009.

[3] Y. Shi, J. Li, Y. Tan, Y. Chen, M. Wang, *Percolation behavior of electromagnetic interference shielding in polymer/multi-walled carbon nanotube nanocomposites*, Composites Science and Technology, **170**, 70-76, 2019.

Masės pernašos modelio pritaikomumas išplėsto austenito tyrimui

Applicability of the mass transfer model to the study of expanded austenite

Paulius Andriūnas[1], Arvaidas Galdikas[1]
[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
paulius.andriunas@ktu.lt

Austenitinis nerūdijantis plienas (ANP) yra plienas, kuris turi paviršiuje centruotą kubinę (PCK) kristalinę gardelę, ir ne mažiau kaip 16 masės% chromo ir pakankamai nikelio ir (arba) mangano, kad išlaikytų šią struktūrą kambario temperatūroje. Atliekant tokio lydinio nitrinimą mažesnėje temperatūroje nei susidaro nitridai, galima padidinti paviršiaus kietumą, atsparumą dilimui ir atsparumą korozijai taip pat pakeisti magnetines savybes.

Daug darbų yra atlikta rodančiu, kad azoto difuzijos gylis ANP priklauso nuo kristalinės gardelės orientacijos. Azoto difuzijos gylis priklausomumas aiškinamas, kaip gardelės įtempių anizotropija, kuri sukėlę difuzijos aktyvinimo energijos priklausomybę nuo orientacijos.

Išplėstas austenitas yra žinomas kaip persotintas kietas tirpalas nerūdijančiame pliene, turintis netvarkingą PCK struktūrą ir iškraipytas gardelę. Didelis azoto kiekis, prasiskverbiantis į austenitą, buvo priskirtas azoto pagavimui oktaedrinėse tarpmazgiuose, kai lydinyje yra azotui, didelį gimiringumą turintis elementas chromas. Tyrimai parodė, kad chromo atomai svarbūs dėl sudaromo cheminio surišimo efekto, kai Cr atomai sukuria pagavimo vietas N.

Į mėginį prasiskverbiančio azoto kiekiui įtakos turi ne tik tūriniai, bet ir paviršiuje vykstantys procesai, kaip adsorbcija, desorbcija ir heterogeninės cheminės reakcijos.

Šio darbo tikslas sukurti programą, panaudojus publikuotą Arvaido Galdiko ir Teresos Moskaliovienės modelį [1] ir patikrinti ar gali modeliuoti išplėsto austenito azoto kiekio profilį.

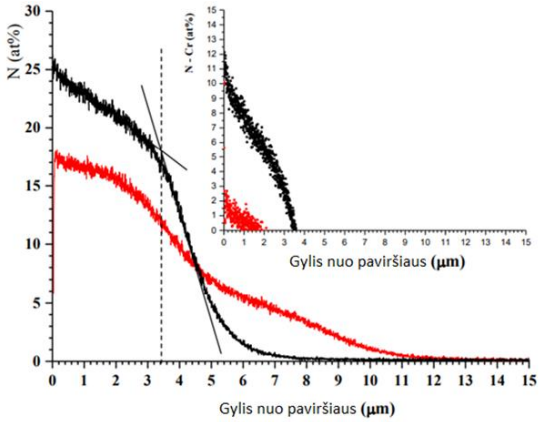
Darbe buvo naudojamas modelis publikuotas [1]. Modelyje yra įtraukta adsorbcija, antrasis Fiko dėsnis, difunduojančio azoto sukurti įtempiai ir kristalinės gardelės orientacija, ir azoto atomų pagavimas chromo atomais lydinyje.

$$\frac{\partial C_{Ndif}}{\partial t} = \phi_{0(hkl)} + \nabla_x\left(D\nabla_x C_{Ndif}\right) - \nabla_x\left(\frac{D\cdot V_N\cdot C_{Ndif}\cdot X_{stress(hkl)}}{k_B\cdot N_A\cdot T}\nabla_x C_{Nsum}\right) - \frac{\partial C_{Ntrap}}{\partial t} \quad (1)$$

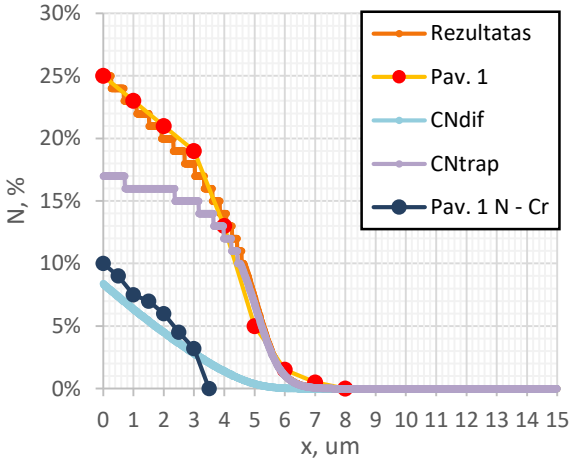
$$\frac{\partial C_{Ntrap}}{\partial t} = K\cdot\left[C_{Ndif}\left(H_t - C_{Ntrap}\right) - N_0\cdot C_{Ntrap}\cdot\exp\left(\frac{-E_B}{k_B T}\right)\right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{Nsum}}{\partial t} = \frac{\partial C_{Ndif}}{\partial t} + \frac{\partial C_{Ntrap}}{\partial t} \quad (3)$$

Rezultatai parodė, kad programa ir modelis gali tiksliai atvaizduoti išplėsto austenito bendrą azoto kiekio profilį, tačiau lyginant skirtumo tarp N ir Cr kiekio profilį nuo gylio su azoto koncentracija gardelėje (CNdif) kokybiškai gali parodyti tik iki pusės nitrinimo gylio su 20% paklaida.



1 pav. Induktyviai susietos plazmos optinės emisijos spektrometrijos azoto kiekio profiliai AISI 316L mėginį nitrinus 4 valandas 410°C temperatūroje prieš atkaitinimo procesą ir jo pabaigoje (atkaitintas 8 valandas 400°C temperatūroje ir 5 valandas 470°C temperatūroje). Papildomas paveikslas rodo skirtumo tarp N ir Cr kiekio raidą kaip gylio funkciją [2].



2 pav. Rezultatai gauti, panaudojus programą parašytą pagal minėtą masės pernešimo modelį.

Reikšminiai žodžiai: austenitinis nerūdijantis plienas; azotinimas; streso sukelta difuzija; pagavimas; kinetinis modeliavimas.

Literatūra

[1] Galdikas, A., Moskaliovienės T. The Anisotropic Stress-Induced Diffusion and Trapping of Nitrogen in Austenitic Stainless Steel during Nitriding. Metal, 1 Spalio 2020.

[2] Czerwiec, T., Andrieux, A., Marcos, G., Michel, H., Bauer Ph. Is "expanded austenite" really a solid solution? Mössbauer observation of an annealed AISI 316L nitrided sample. Journal of Alloys and Compounds, 30 Lapkričio 2019, Volume 811.

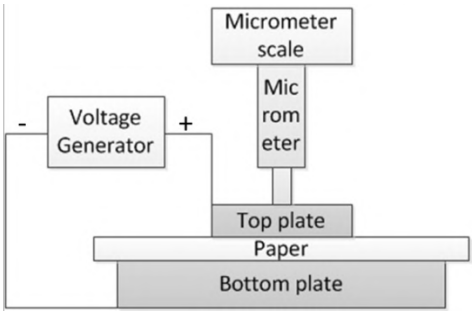
Popieriaus elektrostatinio spūdžio tyrimai

Investigations of electrostatic compression of paper

Robertas Maldžius, Tadeuš Lozovski, Jonas Sidaravičius
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
robertas.maldzius@ff.vu.lt

Celiuliozės ir atitinkamų cheminių medžiagų (priedų) mišiniai naudojami daugiasluoksnių struktūrų gamyboje: spausdintinės elektronikos grandinėms bei prietaisams skaitmeninėje spaudoje [1, 2]. Tokios struktūros veikia kintančios drėgmės ir temperatūros sąlygomis, dažnai veikiant elektriniam laukui. Todėl surištasis vanduo, esantis struktūrose, stipriai keičia ne tik elektrinius parametrus, bet ir struktūros geometriją. Paprasčiausiai sluoksniai brinksta, keičiasi atstumai tarp struktūrą sudarančių skaidulų ir kt. Turime sudėtingą teoriniam aprašymui terpę, kurios elektrinių parametrų – joninio laidumo, poliarizacijos ir kt. tyrimui gali būti taikomi tik eksperimentiniai metodai. Šiame kontekste tampa svarbus elektrostatinės sluoksnių deformacijos efektas.

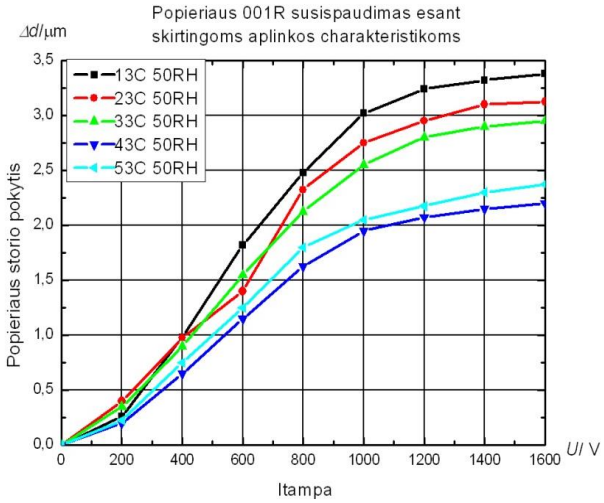
Šiame darbe pateikiami elektrostatinio spudžio tyrimų pagrindiniai rezultatai ir išvados popieriams su skirtingomis dangomis bei kalandravimu. Pasirinktos nuostovios įtampos šaltinis sukuria elektrostatinį lauką tiriamoje struktūroje, o jos deformacija išmatuojama mikrometru (1 pav.).



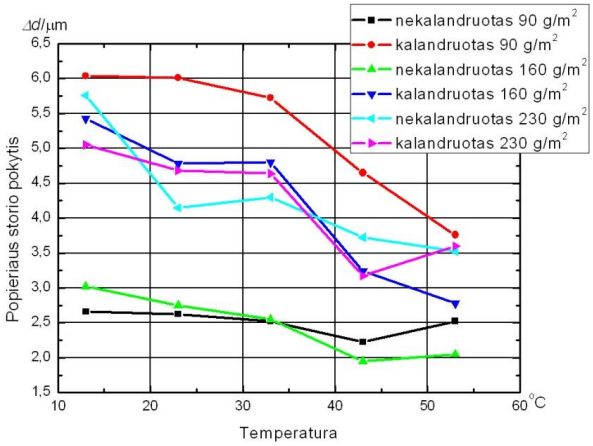
1 pav. Elektrostatinės deformacijos metodikos schema. Nuostovios įtampos šaltinio U = 2 kV ir gali būti keičiama.

Eksperimento esminės kreivės pateiktos 2 ir 3 pav., o darbo eigoje nustatyta, kad:

- Popieriaus deformacija priklauso ne tik nuo gramatūros (GSM), bet ir nuo dangos sluoksnio. Labai svarbios yra drėgmės bei temparatūros salygos.
- Popieriaus pagrindo paruošimas taip pat daro įtaką popieriaus susispaudimui: popieriai su nekalandruotais pagrindais susispaudė vidutiniškai du kartus daugiau, lyginant su kalandruoto pagrindo popieriais.
- Didesnis popieriaus padengimo sluoksnio storis atsakingas už žymesnes deformacijas.
- Deformacija yra žymesnė esant žemesnei santykinei aplinkos temperatūrai: 13 °C temperatūroje popierius susispaudžia du kartus daugiau, nei 53 °C temperatūroje.
- Daugkartinis popieriaus deformavimas neįtakoja į progresuojančią tolesnę deformaciją, t.y. atminties efekto nestebime. Tačiau pastebėta, kad popieriaus elektrostatinio pramušimo įtampa sumažėja apie 17 %.



2 pav. Popieriaus 160 GSM storio pokytis, keičiant įtampą skirtingose aplinkos temperatūrose



3 pav. Kalandruoto ir nekalandruoto popierių deformacijos, kai šaltinio įtampa fiksuota (1 kV), bet aplinkos temperatūra yra skirtinga

Reikšminiai žodžiai: elektrostatinė spūdis, elektrinis laidumas, popierius.

Literatūra

[1] Haisong Qi. Novel Functional Materials Based on Cellulose, Springer Briefs In Applied Sciences and Technology, 2017, 87 p., http://www.springer.com/series/8884

[2] Kirwan M.J. (Editor), Handbook of Paper and Paperboard Packaging Technology, 2nd Ed., Wiley-Blackwell, 2013, 407 p., ISBN 978-1-118-47091-6 (epdf/ebook)

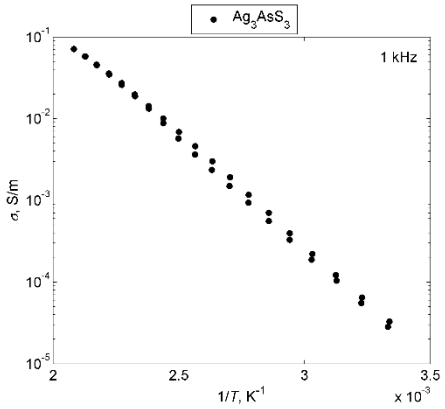
Prustito elektrinių savybių tyrimas kompleksinės pilnutinės varžos spektroskopija

Electrical properties investigation of proustite by complex impedance spectroscopy

Vilma Kavaliukė[1], Tomas Šalkus[1], Algimantas Kežionis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3 LT-10257, Vilnius
vilma.kavaliuke@ff.vu.lt

Prustitas (Ag_3AsS_3) kambario temperatūroje priklauso trigoninei singonijai (erdvinė grupė R3c) [1]. Ag_3AsS_3 miltelių termogravimetrinė analizė (TGA) parodė, kad 600-690 K temperatūrų intervale jie praranda 18% savo masės. Iš diferencinės terminės analizės (DTA) buvo nustatyta, kad virš 540 K temperatūros prasideda Ag_3AsS_3 miltelių skilimo reakcijos, kurios DTA kreivėje pasireiškia dviem smailėmis ties 660 ir 700 K. Tuo tarpu Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) analizė parodė, kad atkaitinus Ag_3AsS_3 miltelius 700 K temperatūroje 1 h gaunamas Ag_2S junginys, kas leidžia spręsti, kad skilimo reakcijų metu visas arsenas pasišalina lakių junginių pavidalu. Tuo tarpu prustito monokristalo XRD analizė parodė, kad junginys nekeičia struktūros iki pat 695 K, bet kristalo paviršiuje susiformuoja Ag_2S sluoksnis [2]. Literatūroje taip pat galima rasti ir daugiau Ag_3AsS_3 tyrimų pavyzdžių, kur nustatomos skirtingos Ag_3AsS_3 struktūrinės ir elektrinės savybės. Pavyzdžiui, Yang ir Taylor nustatė elektrinių savybių anomalijas Ag_3AsS_3 monokristaluose 111 K, 223 K, 306 K, 419 K ir 429 K temperatūrose[3]. Tuo tarpu Gagor ir bendraautoriai 295-543 K temperatūrų intervale Ag_3AsS_3 elektrinių savybių anomalijas stebėjo 450 K ir 502 K temperatūrose [2]. Yra žinoma, kad iki kambario temperatūros Ag_3AsS_3 elektrinės savybės priklauso nuo apšvietimo [2,4].

Šiame darbe prustito monokristalo elektrinės savybės (kompleksinis laidumas σ′, kompleksinė pilnutinė varža z′, elektrinis modulis m′ ir kompleksinė dielektrinė skvarba ε′) 300-480 K temperatūrų intervale buvo tirtos kompleksinės pilnutinės varžos spektroskopija 10-10^6 Hz dažnių diapazone 2 ir 4 elektrodų metodais. Ant stačiakampio gretasienio formos bandinio buvo suformuoti sidabro elektrodai, o keturių elektrodų metodui ant stačiakampio gretasienio sienelės priklijuotos platinos vielutės. Matavimai atlikti voltmetro-ampermetro metodu veikiančiu kompleksinės pilnutinės varžos spektrometru [5]. Prieš elektrinių savybių matavimus bandinys buvo laikomas tamsoje ilgiau nei 24 valandas. 1 paveiksle pavaizduotame grafike atidėta elektrinio laidumo 1 kHz dažnio elektriniame lauke priklausomybė nuo atvirkštinės temperatūros. Visame 300-480 K temperatūrų intervale Ag_3AsS_3 elektrinis laidumas priklauso nuo atvirštinės temperatūros pagal Arenijaus dėsnį ir laidumo anomalijos nestebimos.



1 pav. Ag_3AsS_3 elektrinio laidumo (f = 1 kHz) priklausomybė nuo atvirkštinės temperatūros

Reikšminiai žodžiai: prustitas, elektrinis laidumas, kompleksinės pilnutinės varžos spektroskopija.

Literatūra

[1] S.Allen,PhaseTransitions **6**, 1 (1985).
[2] A. Gagor, A. Pawlowski, A. Pietraszko, J. Solid State Chem. **182**, 451 (2009).
[3] S.R. Yang, K.N.R. Taylor, J. Appl. Phys. **69**, 420 (1991).
[4] K.A. Schonau, S.A.T. Redfern, J. Appl. Phys. **92**, 7415 (2002).
[5] A. Kežionis, P. Butvilas, T. Šalkusa, S. Kazlauskas, D. Petrulionis, T. Žukauskas, E. Kazakevičius, A. F. Orliukas, Rev. Sci. Instrum. **84**, 013902 (2013).

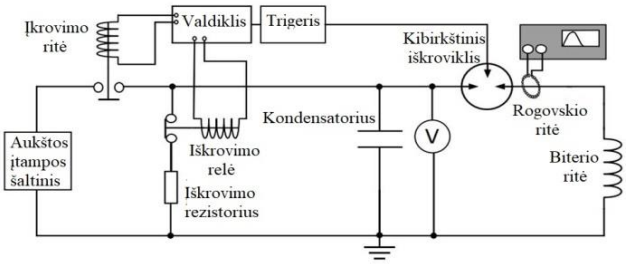
Didelės amplitudės mikrosekundinės trukmės magnetinių laukų matavimas, naudojant jutiklius iš manganitų sluoksnių

High amplitude microsecond duration magnetic field measurement using sensors based on manganite films

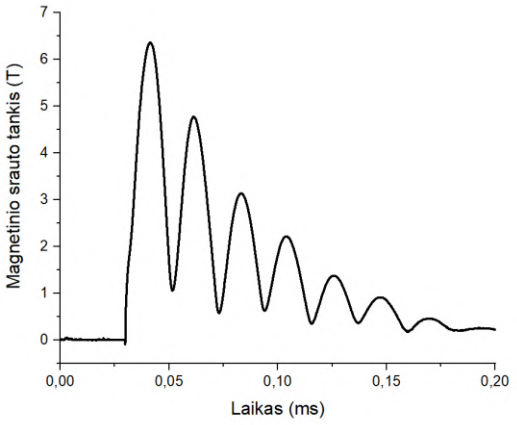
Modestas Čeikauskas[1], Justas Dilys[1], Voitech Stankevič[1], Valentina Plaušinaitienė[1,2], Nerija Žurauskienė[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Funkcinių medžiagų ir elektros inžinerijos skyrius, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Naugarduko g. 41, LT- 03225, Vilnius
modestas.ceikauskas@ftmc.lt

Pastaraisiais dešimtmečiais lantano manganitų sluoksniai (LaSrMnO), pasižymintys milžiniškos magnetovaržos reiškiniu, buvo visapusiškai tiriami dėl galimybės juos panaudoti magnetinio lauko jutiklių taikymams [1]. Tyrimų metu buvo parodyta, kad šie nanostruktūrizuoti sluoksniai dėl mažos magnetovaržos anizotropijos gali matuoti didelės amplitudės impulsinius magnetinius laukus, nepriklausomai nuo lauko krypties. Tokie jutikliai buvo naudojami, matuojant magnetinės difuzijos procesus magnetinėse svaidyklėse [2] ir matuojant magnetinio lauko pasiskirstymą impulsiniuose magnetuose, gebančiuose generuoti 1 – 100 ms trukmės impulsus, kurių amplitudė siekia 90 T. Tačiau metalų formavimo ar suvirinimo magnetiniais impulsais proceso metu yra naudojami gerokai trumpesni impulsai (20-30 μs). Be to, jutikliai turi veikti aukštesnėje nei kambario temperatūroje, nes metalų formavimo/suvirinimo magnetiniais impulsais proceso metu, magnetinio lauko matavimo vietoje temperatūra staigiai pakyla. Buvo parodyta, kad nanostruktūrizuotų $La_{1-x}Sr_xMn_yO_3$ sluoksnių varža ir magnetinės savybės stipriai priklauso nuo Mn pertekliaus [3]. Mangano kiekiui sluoksnyje (y) esant y>1, padidėja metalas-izoliatorius virsmo temperatūra bei jutiklio magnetovarža.

Šiame darbe bus pristatyti tyrimų rezultatai, gauti matuojant trumpus (20-30 μs) didelės amplitudės (6-8 T) impulsinius magnetinius laukus, generuojamus metalų formavimo magnetiniais impulsais proceso metu. Taip pat bus analizuojama magnetinio impulso forma ir magnetinio lauko pasiskirstymas magnetinėje ritėje.



1 pav. Trumpų magnetinių impulsų generatoriaus schema



2 pav. Magnetinio lauko dinamika ritės centre

Reikšminiai žodžiai: manganitų sluoksniai, mikrosekundžių trukmės magnetinių impulsų matavimas

Literatūra

[1] D. Pla, C. Jimenez and M. Burriel, Adv. Mater. Interfaces 4, 1600974 (2017).
[2] M. Schneider, O. Liebfried, V. Stankevič, S. Balevičius, and N. Žurauskiene, IEEE Trans. Magn. 45, 1 (2009).
[3] N. Žurauskienė, V. Stankevič, S. Keršulis, J. Klimantavičius, Č. Šimkevičius, V. Plaušinaitienė, M. Vagner, S. Balevičius, IEEE Trans. Plasma Sci. vol. 47, 4530 (2019).

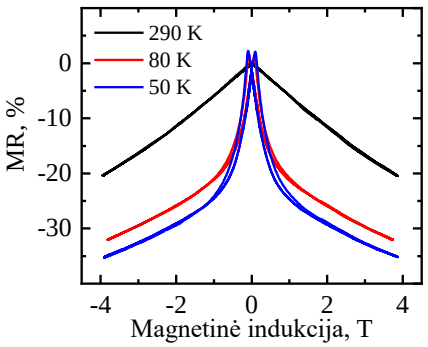
Magnetinių laukų matavimas žemose temperatūrose naudojant plonus manganitų-kobaltitų polikristalinius sluoksnius

Magnetic field measurement at low temperatures using thin polycrystaline manganite-cobaltite films

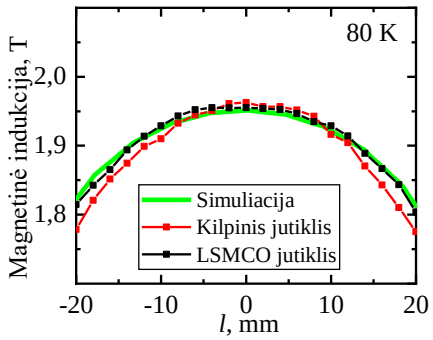
Jorūnas Dobilas[1,2], Vakaris Rudokas[2], Milita Vagner[2,3] Voitech Stankevič[2], Nerija Žurauskienė[2]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222, Vilnius
[2]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-02300 Vilnius
[3]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius
jorunas.dobilas@ff.stud.vu.lt

Augant magnetovaržinių jutiklių pasaulinei rinkai svarbi naujų medžiagų ir jų struktūrų paieška: praplečiant tokių jutiklių veikimo magnetinio lauko ir temperatūros ruožus. Buvo parodyta, jog nanostruktūrizuoti manganitų sluoksniai, pasižymintys kolosalia magnetovarža (CMR) [1], gali būti užauginti su sumažinta magnetovaržos anizotropija. Šie plonieji sluoksniai buvo panaudoti kuriant CMR-B-skaliarinius jutiklius [2], galinčius išmatuoti magnetinio lauko amplitudę nepriklausomai nuo lauko krypties. Taip pat buvo nustatyta, jog iš dalies pakeitus manganą į kobaltą $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ medžiagoje galima padidinti magnetovaržą kambario temperatūrose [3]. Nanostruktūrizuotiems sluoksniams, kuriuos galima nagrinėti kaip aukštos struktūrinės kokybės kristalitų ir netvarkių tarpkristalitinių sričių tinklą, šis mangano pakeitimo kobaltu efektas magnetinėms ir krūvio pernašos savybėms dar mažai ištirtas, todėl tolimesni manganitų-kobaltitų sluoksnių tyrimai yra svarbūs.

Šiame darbe pateikiama nanostruktūrizuotų $La_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1.07}Co_{0.12}O_3$ (LSMCO) sluoksnių, užaugintų naudojant cheminio nusodinimo iš metalo-organinių medžiagų garų fazės (MOCVD) metodą ant polikristalinio Al_2O_3 padėklo 750 °C temperatūroje, magnetovaržos tyrimų analizė. Šie sluoksniai buvo panaudoti, kuriant mangetinių laukų jutiklius, galinčius veikti žemose (<100 K) temperatūrose. Magnetovarža ir jautrumas magnetiniems laukams buvo ištirtas 50-100 K temperatūrų ruože ir jutiklio kalibraciniai duomenys buvo išsaugoti magnetinių laukų matavimo įrangoje. Tokio tipo jutiklis buvo panaudotas išmatuoti solenoido formos 46 apvijų ir 20 sluoksnių impulsinio magneto ašinį magnetinio lauko pasiskirstymą. Matavimo rezultatai buvo palyginti su išmatuotais magnetiniais laukais naudojant kilpinį jutiklį ir su matematiniu modeliu, sukurtu naudojant "COMSOL Multiphysics" programinį paketą.



1 pav. Magnetovaržos priklausomybė nuo magnetinės indukcijos skirtingose temperatūrose



2 pav. Impulsinio magneto ašinis magnetinio lauko pasiskirstymas matuojant su manganito-kobaltito LSMCO jutikliu ir su kilpiniu jutikliu. Palyginimui pateikti "COMSOL Multiphysics" simuliacijos rezultatai

Reikšminiai žodžiai: magnetovarža, magnetiniai laukai, magnetinio lauko jutikliai.

Literatūra

[1] D. Pla et al. Adv. Mater. Interfaces 4 (8) p. 1600974 (2017).
[2] S. Balevičius et al. Appl. Phys. Lett. 101 p. 092407 (2012).
[3] Jifan Hu et al. J. Appl. Phys. 91 p. 8912 (2002).

Hibridinis magnetovaržinis jutiklis iš manganito-grafeno struktūros, suformuotos ant Al_2O_3 padėklo

Hybrid magnetoresistive sensor based on manganite-graphene structure prepared on Al_2O_3 substrate

Mykola Koliada[1], Nerija Žurauskienė[1,2], Rasuolė Lukošė[1], Skirmantas Keršulis[1], Voitech Stankevič[1,2], Valentina Plaušinaitienė[1,3], Milita Vagner[1,3], Saulius Balevičius[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[2]Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Elektronikos fakultetas, Naugarduko g. 41, 03227 Vilnius
[3]Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Naugarduko g. 24, 03225 Vilnius
mykola.koliada@ftmc.lt

Magnetinių laukų matavimai, pasiekus erdvinę rezoliuciją iki mikro-nano skalių, yra labai svarbūs magnetometrijoje, magnetinės atminties elementų kūrime ir kt. taikymuose [1]. Yra siekiama sukurti mažų matmenų jutiklius su padidintu jautriu bei išplėstomis jų funkcinėmis galimybėmis. Modernių medžiagų su specifinėmis savybėmis parinkimas yra labai svarbus, kuriant magnetovaržinius jutiklius, kurių pasaulinė rinka auga sparčiau nei Holo jutiklių. Feromagnetiniai oksidai, tokie kaip manganitų plonieji sluoksniai, pasižymi neigiama kolosalia magnetovarža (*CMR*). Šis reiškinys buvo panaudotas, kuriant stipraus impulsinio magnetinio lauko jutiklius iš nanostruktūrizuotų manganitų sluoksnių [2]. Tokių jutiklių magnetovarža praktiškai nepriklauso nuo magnetinio lauko krypties manganito sluoksnio plokštumos atžvilgiu, todėl jie gali būti panaudoti absoliutinės magnetinio lauko vertės matavimams (CMR-B-skaliariniai jutikliai). Paprastai manganitų *MR* yra didelė silpnuose ir vidutiniuose magnetiniuose (*B*) laukuose [3], tačiau ji įsisotina, esant stipriems laukams.

Siekiant sukurti mažų matmenų jutiklius lokaliems magnetinio lauko matavimams, didelio mokslininkų susidomėjimo sulaukė dvidimensinės (2D) puslaidininkinės medžiagos, tokios kaip grafenas [4]. Jos pasižymi Lorentzo jėgos indukuota teigiama magnetovarža. Tačiau grafeno *MR* silpnuose laukuose yra maža dėl klasikinės kvadratinės *MR*(*B*) priklausomybės, tuo tarpu stipriuose laukuose ji didelė ir tiesinė net iki 60 T ir daugiau dėl tam tikrų kvantinių efektų [5].

Siekiant išmatuoti impulsinius magnetinius laukus įvairioje pramoninėje, o taip pat ir mokslinių laboratorijų įrangoje, jutikliai turi atitikti tam tikrus specifinius reikalavimus, susijusius su jų konstrukcija bei su matuojamo impulso trukme ir amplitude (didelė skyriamoji laiko geba trumpiems impulsams bei praplėstas matuojamo lauko ruožas stiprių magnetinių laukų matavimui). Todėl buvo pasiūlytas hibridinis jutiklis iš manganito/grafeno struktūros, pasižymintis padidintu signalo atsaku bei jautriu, lyginant su atskirais magnetinio lauko jutikliais iš manganito sluoksnio arba grafeno [6]. Tačiau siekiant sukurti magnetinio lauko jutiklį, pasižymintį dideliu jautriu plačiame magnetinių laukų ruože bei galinčiu matuoti lokaliai lauko pasiskirstymą, reikalingi tolimesni tokios hibridinės struktūros iš manganito ir grafeno tyrimai.

Šiame darbe pateikiami hibridinių magnetinio lauko jutiklių magnetovaržos ir jautrio tyrimai impulsiniuose magnetiniuose laukuose iki 20 T. Hibridiniai jutikliai buvo pagaminti, suformuojant ant abiejų to paties Al_2O_3 padėklo pusių tokius sluoksnius: iš vienos pusės – nanostruktūrizuoto manganito La-Sr-Mn-Co-O sluoksnį, užaugintą impulsinio injekcinio MOCVD būdu, iš kitos padėklo pusės – vieną/kelis grafeno sluoksnius, pernešus juos nuo vario cheminio ėsdinimo būdu. Buvo pademonstruota, kaip galima padidinti sukurto hibridinio jutiklio atsako signalą ir jautrį, o taip pat paderinti magnetinių laukų ruožą, atitinkantį didžiausią jutiklio jautrį, paslenkant jį tiek į silpnesnių, tiek į stiprių laukų sritį, kas reikalinga įvairiems magnetinio lauko matavimo taikymams.

Reikšminiai žodžiai: plonieji sluoksniai, manganitai, grafenas, magnetovarža, magnetinio lauko jutikliai.

Literatūra

[1] D. Pla, C. Jimenez and M. Burriel, Adv. Mater. Interfaces **4**, 1600974 (2017).
[2] T. Stankevič, L. Medišauskas, V. Stankevič, S. Balevičius, N. Žurauskiene, O. Liebfried and M. Schneider, Rev. Sci. Instrum. **85**, 044704 (2014).
[3] M. Ziese, Rep. Prog. Phys. **65**, 143 (2002).
[4] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, Nature, **438**, 197 (2005).
[5] F. Kisslinger, C. Ott, C. Heide, E. Kampert, B. Butz, E. Spiecker, S. Shallcross, H.B. Weber, Nat. Phys. **11**, 650 (2015).
[6] R. Lukose, N. Zurauskiene, S. Balevicius, V. Stankevic, S. Kersulis, V. Plausinaitiene, R. Navickas, Nanotechnology **30**, 355503 (2019).

$0.7Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$0.3PbTiO_3$ (PMN-0.3PT keramini sluoksniai pagaminti tepimo metodu

$0.7Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$0.3PbTiO_3$ (PMN-0.3PT) ceramic films prepared by tape casting method

Tomas Kudrevičius[1], Artyom Plyushch[1,2], Maksim Ivanov[1],·Šarūnas Svirskas[1],
Valentina Plaušinaitienė[3],·Algirdas Selskis[4], Polina Kuzhir[5,2], Jūras Banys[1]
[1]Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 9, Vilnius LT-10222, Lithuania
[2]Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University, Bobruiskaya 11, Minsk 220030, Belarus
[3]Department Inorganic Chemistry, Vilnius University, Naugarduko 24, Vilnius LT-03225, Lithuania
[4]Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio 3, Vilnius LT-10257, Lithuania
[5]Institute of Photonics, University of Eastern Finland, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu, Finland
artyom.plyushch@ff.vu.lt

Tape casting is one of the most popular wet-shaping manufacturing technologies of ceramic films in large areas. It is one of the main ferroelectric film manufacturing technologies. Wide range of the applications of the ferroelectrics includes multilayered capacitors and energy storage, biomaterials, piezoelectric actuators or sensors. Non-aqueous tape casting requires different organics like alcohols, ketones, oils as a solvent. Despite short evaporation time, these liquids have environmental and safety issues. An aqueous tape casting is the eco-friendly alternative. The works devoted to waterbased tape casting of the ferroelectrics are still rare [1,2].

Commercially available by American Elements PMN-0.3PT powder was used for the preparation of the films. A solution of an ammonium salt of an acrylic polymer in water, Dispex AA4040 (BASF) was used as a surfactant. Luvitec K 90 powder by BASF, a water-soluble polyvinylpyrrolidone (PVP) was used as a binder. Both binder and surfactant are eco-friendly polymers.

Several suspensions were tested for the determination of the optimal concentration of surfactant (see Fig. 1). The dependences of the viscosity versus shear rate and surfactant loading demonstrate, that the minimal μ is achieved with the surfactant content of 0.46 g, or 0.0137 g per 1 gram of solid content (highlighted with arrow). The solid PVP binder was dissolved directly in the slurry, and after mixing and defoaming, the obtained suspensions were cast using the homemade doctor blade technique. The doctor blade height was 0.25 mm. Two series of samples were prepared. The first series made with variable binder loading and a fixed water/solids ratio of 19 wt. %. The second made with a fixed binder/solids ratio of 1.37 wt. % and variable water content.

It was shown, that the density of the calcined films depends on the binder amount and does not depend on the water content and reaches up to 98 % for the sample with minimal binder loading. As a result, highly dense (up to 98 %) translucent ceramic films with thickness down to 70 μm (see Fig. 2) are prepared. The dielectric permittivity, polarization and pyroelectric coefficient of the ceramic films are investigated. Above room temperature, the sample undergoes two phase transitions at 100 and 175ºC. The dielectric permittivity and polarisation are high in comparison to the ceramics, synthesized using other methods (spark plasma sintering, uniaxial pressing.

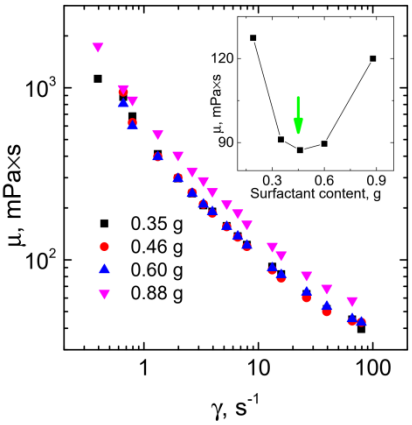


Fig 1. Viscosity of the slurries with different surfactant content *vs* the shear rate. Inset: the comparison of the viscosities at the shear rate of $\gamma = 13.2\ s^{-1}$.

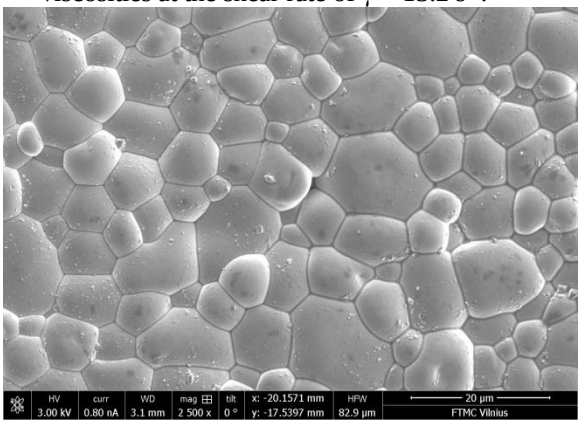


Fig 2. Scanning electron microscopy of the calcined ceramics with the density of 98 %

Keywords: Tape casting, PMN-PT, dielectric properties, ferroelectric properties.

Literature

[1] K. Prabhakaran, E.M. Jayasingh, S. Raghunath, C. Durgaprasad, S. Sharma, J. Mater. Process. Technol. 209(8), 4217 (2009)
[2] R.J.N. Quintero, S. Guillemet, J.A. Aguilar-Garib, M.E.R. Melo, B. Durand, J. Ceramic Process.Res. 13(2), 101 (2012)

Acknowledgement

This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-LLT-20-4.

Multiferoinės kompozitinės medžiagos fosfato matricų pagrindu

Phosphate matrix based multiferroic composite materials

Artyom Plyushch[1,2], Jan Macutkevič[1] , Robertas Grigalaitis[1], Aliaksei Sokal[3], Konstantin Lapko[3], Alexander Kudlash[3], Nerijus Mačiulis[1], Dzmitry Adamchuk[4], Vitaly Ksenevich[4], Dzmitry Bychanok[2], Algirdas Selskis[5], Polina Kuzhir[2,6] and Juras Banys[1]

[1]Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania
[2]Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 220006 Minsk, Belarus
[3]Faculty of Chemistry, Belarusian State University, Nezalezhnastsi Ave. 4, 220030 Minsk, Belarus
[4]Faculty of Physics, Belarusian State University, Nezalezhnastsi Ave. 4, 220030 Minsk, Belarus
[5]Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[6]University of Eastern Finland, Yliopistokatu 7, FI-80101 Joensuu, Finland
artyom.plyushch@ff.vu.lt

The materials, which simultaneously exhibit two or more ferroic orders are known as multiferroics. The different ferroic ordering parameters do not act independently, but coupled. The single-phase multiferroics are rare, their coupling coefficients are weak and appears at low temperatures. The two-phase composites with ferroelectric and ferri- ferromagnetic phases is a prospective alternative. The critical point in these composite materials synthesis is the reactions at the interfaces between the different phases upon sintering.

As an alternative, the matrix-based composite approach may be proposed. Aluminium phosphate ceramics are the perfect candidate for the role of the matrix: it is chemically and thermally stable, the hardening temperature is relatively low (20–300 ºC). We report on the study of the two series of the phosphate-based composite systems. The first system is the composites filled with the mixture nanosized $BaTiO_3$ and Fe_3O_4. The second system is the composites filled with $0.7Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$0.3PbTiO_3$ (PMN-0.3PT) and pressed under different pressures (3, 6 and 8 tonns).

Ceramic composites consist of 3 components, i.e., a binder ($Al(H_2PO_4)_3$), a filler (a mixture of Al_2O_3 and AlN for the first system, and MgO for the second), and a functional filler. The components were mixed in a mortar for 10 min and uniaxially pressed into the 10 mm tablets. After 24 h at ambient temperature, samples were thermally treated up to 300 ºC with a heating rate of 1 ºC/min.

The comparative X-ray diffraction analysis of the sample filled with $BaTiO_3$ and Fe_3O_4 (BTFO) and the phosphate matrix is presented in Fig. 1. The XRD indicates the presence of the barium titanate, magnetite and matrix peaks (Al_2O_3 and AlN). The small amount of the amorphous phase is expected as a product of the acid-base reactions, but in the studied case the halo was not detected. No additional peaks of possible side products were detected.

The electromechanical properties and hysteresis loop of the PMN-0.3PT filled samples were measured at the frequency of 10 Hz at room temperature (Fig. 2). The shapes of the displacement and P-E loops are not so sharp, compared to the pure PMN-0.3PT ceramics. This difference might relate to the impact of the matrix. It effects on the overall elastic properties of the composite and introduces additional losses to the system.

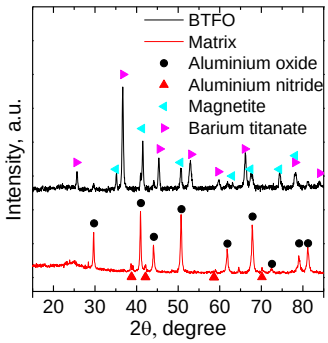


Fig 1. X-ray difraction pattern for the matrix and composite filled with $BaTiO_3$ and Fe_3O_4.

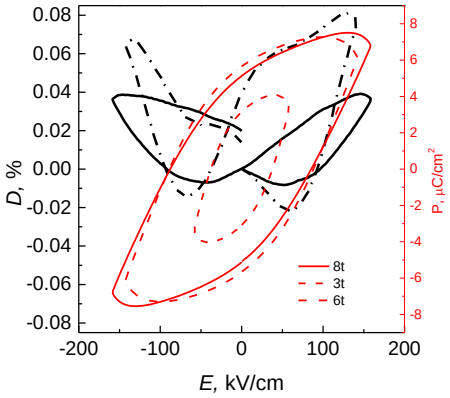


Fig 2. The strain and P-E hysteresis loops of the PMN-0.3PT filled sample.

Keywords: multiferroic composites, phosphates

Literature

[1] Grigalaitis, R. et al. Ceram. Int., 40, 6165–6170, (2014).

Acknowledgements

A.P. is supported by the European Social Fund under the No 09.3.3-LMT-K-712-19-0146 “Development of Competences of Scientists, other Researchers and Students through Practical Research Activities”.

Kalcio įtaka dielektrinei $BaZr_xTi_{1-x}O_3$ kietųjų tirpalų relaksacijai

Dielectric relaxation in Ca-modified $BaZr_xTi_{1-x}O_3$ solid solutions

Paulius Jankauskas[1], Šarūnas Svirskas[1], Lucjan Kozielski[2], Jūras Banys[1]
[1]Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[2]University of Sylesia, Faculty of Exact and Technical Sciences, Zytnia st. 10, 41-200 Sosnowiec, Poland
sarunas.svirskas@ff.vu.lt

Barium titanate (BTO) is a first inorganic material where the ferroelectricity was discovered. Barium titanate has a perovksite structure in which ferroelectricity occures 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 a 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 tempreature. Unfortunately, the loss and energy storage density of such capacitors are strongly dependant on the domain structure of the ferroelectric phase of BTO. In order to maximize the energy storage density and decrease the loss which arise due to domain wall motion, it is necessary to modify BTO to pin the domains or reduce their density.

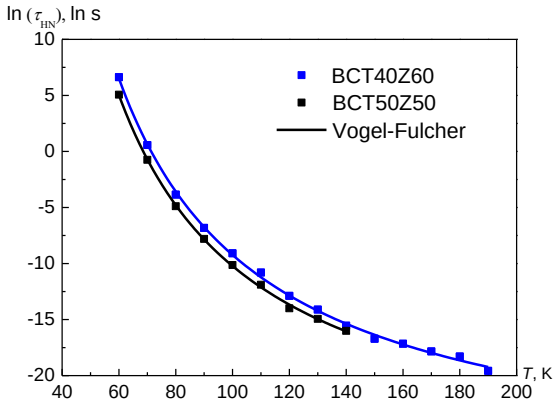


Fig. 1 Temperature dependence of Havriliak-Negami relaxation time in BCZT solid solutions.

One of effective ways to diminsh domains and their walls is to incorporate different ions in the A and/or B sites of perovskite lattice. The most popular ions to introduce instead of titanium are Zr^{4+} [2] , Sn^{4+} [3,4], Ce^{4+} [5]. These isovalent substitutions diminishes ferroelectric behaviour. A gradual transition from ferroelectric to relaxor properties are observed. The dielectric anomaly is shifted to lower temperature with an increase of dopant concentration. This is attractive feature since the paraelectric phase is stabilised at room temperature. Thus, it is a good feature for potential application since the losses will be diminished while frequency independant large permittivity persits.

In this contribution we investigate how 10 percent of calcium ions at the A-site modifies the dielectric relaxation for two prominent $BaZr_xTi_{1-x}O_3$ (x = 0.5 and 0.6) compositions. Figure 1 represents the temperature dependence of Havriliak-Negami relaxation time in both compositions. It will be revealed that the dielectric anomaly is further shifted to lower temperatures. Calcium ions do not modify polar fluctuations in these materials.

ACKNOWLEDGMENT

This project has received funding from European Social Fund (project No 09.3.3-LMT-K-712-19-0052) under grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT).

Keywords: dielectric spectroscopy, ferroelectricity, perovskites, phase transitions, relaxor ferroelectrics

References

[1] P. W. Forsbergh, *Domain Structures and Phase Transitions in Barium Titanate*, Phys. Rev. **76**, 1187 (1949).

[2] D. Nuzhnyy, J. Petzelt, M. Savinov, T. Ostapchuk, V. Bovtun, M. Kempa, J. Hlinka, V. Buscaglia, M. T. Buscaglia, and P. Nanni, *Broadband Dielectric Response of Ba(Zr,Ti)O_3 Ceramics: From Incipient via Relaxor and Diffuse up to Classical Ferroelectric Behavior*, Phys. Rev. B **86**, 014106 (2012).

[3] N. Horchidan, A. C. Ianculescu, C. A. Vasilescu, M. Deluca, V. Musteata, H. Ursic, R. Frunza, B. Malic, and L. Mitoseriu, *Multiscale Study of Ferroelectric–Relaxor Crossover in BaSnxTi1−xO3 Ceramics*, Journal of the European Ceramic Society **34**, 3661 (2014).

[4] V. V. Shvartsman, J. Dec, Z. K. Xu, J. Banys, P. Keburis, and W. Kleemann, *Crossover from Ferroelectric to Relaxor Behavior in BaTi1− x Sn x O3 Solid Solutions*, Phase Transitions **81**, 1013 (2008).

[5] G. Canu, G. Confalonieri, M. Deluca, L. Curecheriu, M. T. Buscaglia, M. Asandulesa, N. Horchidan, M. Dapiaggi, L. Mitoseriu, and V. Buscaglia, *Structure-Property Correlations and Origin of Relaxor Behaviour in BaCexTi1-XO3*, Acta Materialia **152**, 258 (2018).

Neįprasta *trans*-stilbeno fluorescencinių savybių priklausomybė nuo temperatūros

Unual temperature dependence of the fluorescence properties of *trans*-stilbene

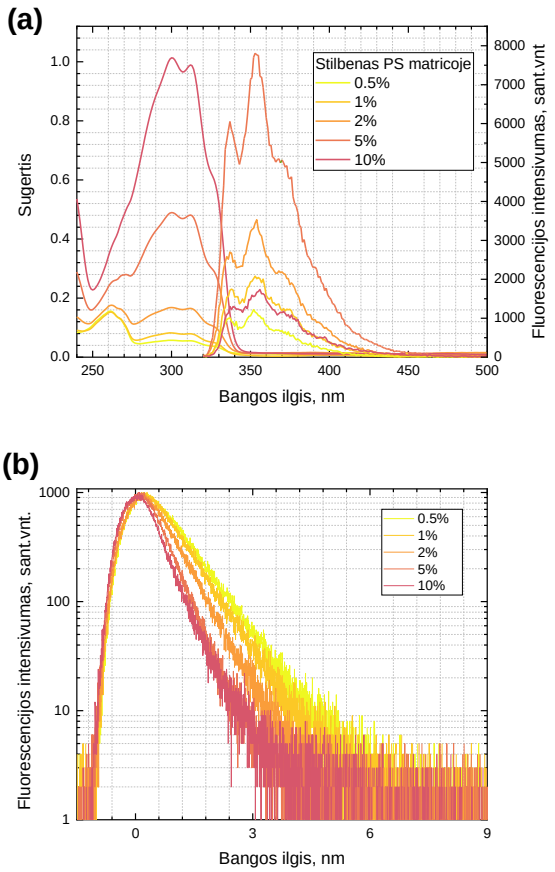
Gabrielė Kareivaitė[1], Renata Karpič[1], Mindaugas Mačernis[2], Darius Abramavičius[2], Leonas Valkūnas[1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Cheminės fizikos institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
gabriele.kareivaite@ff.stud.vu.lt

Organinių molekulių įvairovė, ypatingai diariletilenai, dėl savo jautrumo išoriniam poveikiui yra laikomi perspektyviais praktikoje kuriant labai jautrius šviesai prietaisus bei jų komponentus. Šie molekuliniai junginiai pasižymi specifinėmis fotocheminėmis savybėmis, tokomis kaip *trans-cis* izomerizacija bei fluorescencijos trukmės kintamumas priklausomai nuo aplinkos sąlygų. Stilbenas yra vienas iš tokių molekulių pavyzdžių. Taip pat jis yra laikomas pavyzdine molekule fotoindukuotų izomerizacijos procesų tyrimuose siekiant plėsti jo praktinio panaudojimo tikslus. [1]. Stilbeno funkcionaliosios sąvybės sėkmingai buvo panaudotas jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriuose [2]. Nuo praėjusio amžiaus 60-ųjų vidurio stilbeno junginiai buvo intensyviai tiriami prie skirtingų sąlygų ir kaip tirpalai, ir kaip kietosios matricos, esant skirtingam slėgiui ar temperatūrai [3]. Neseniai Ramano spektroskopijos ir kvantinės chemijos modeliavimo metodais buvo identifikuota *trans-cis* izomerizacijos proceso reakcijos koordinatė [4]. Šie tyrimai rodo kooperatyvinės eksitoninės būsenos susidarymo galimybes kondensuotose fazėse, kai toks molekulinės izomerizacijos procesas būtų slopinamas. Tačiau sisteminių sužadinimo dinamikos kietajame būvyje tyrimų vis dar trūksta.

Siekdami užpildyti šią spragą, mes atlikome lyginamuosius tyrimus nagrinėdami polikristalino, įvairaus dydžio agregatų ir molekulinio stilbeno fluorescencijos spektrus bei jų gesimą plačiame temperatūros diapazone, nuo 15 K iki kambario temperatūros. Gauti rezultatai pademonstravo neįprastą spektrinių savybių priklausomybę esant žemoms temperatūroms, kuri yra siejamas su agregacijos sukelta greita eksitoninė difuzija kietosiose stilbeno formose.

Šio darbo tikslas ištirti sužadinimo dinamikos ypatumus, analizuojant stacionarios fluorescencijos spektrų pokyčius ir fluorescencijos gesimo dinamiką plačiame temperatūrų diapazone, nuo 15 K iki kambario temperatūros. Buvo paruoštos *trans*-stilbeno junginio skirtingų koncentracijų plėveles polistereno (PS) matricoje, kuri yra skaidri stilbeno junginio atvejų, ir ištirtos šių bandinių spektroskopines savybės.

Skirtingų mėginių fluorescencinio gesinimo dinamika įvairiose temperatūrose rodo agregacijos sukeltą eksitono difuziją kietuose stilbeno formose, kas būtent ir atsispindi fluorescencijos spektruose.



Pav. 1. Sugerties ir fluorescencijos stelbeno įmobilizuoto PS matricoje (a) spektrai bei fluorescencijos gesimo kinetiku preklausomybė nuo stilbene koncentracijos (b), λ_{zad}=300nm.

Keywords: trans-stilbene; fluorescence, exciton dynamic.

Literature

[1] D. H. Waldeck, Chem. Rev. , 1991, 91, 415-436.
[2] S. K. Lee, Y. H. Cho, B. H. Kang, W. G. Lee, J. K. Kim, Y. K. Kim, G. D. Kim and N. Z. Galunov, Prog. Nuclear Sci. Techn., 2011, 292-295.
[3] G. R. Fleming, S. H. Courtney and M. W. Balk, J. Stat. Phys. , 1986, 42, 83-104.
[4] S. Takeuchi, S. Ruhman, T. Tsuneda, M. Chiba, T. Taketsugu and T. Tahara, Science, 2008, 322, 1073-1077.

Fano tipo rezonansas moduliuotose vienasluoksnėse dangose šviesos kampiniam ir dažniniam selektyvumui

Fano-like resonances in modulated single-layers for angular and frequency selectivity of light

Julianija Nikitina[1,2], Ceren Babayigit[3], Kęstutis Staliūnas[4,5], Lina Grinevičiūtė[1,2]
[1] Center for Physical Sciences and Technology, Savanorių ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania
[2] Laser Research Center, Vilnius University, Saulėtekio Ave. 10, Vilnius LT-10223, Lithuania
[3] University of California, Irvine, California 92697, United States
[4] ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain
[5] UPC, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona), Spain
julianija.nikitina@ff.vu.lt

Modern tendency to miniaturize laser systems and enhance its laser power, evoke the need to create novel optical elements with periodically modulated inner nanostructure, as photonic crystals. Artificially created refractive index modulation in such structures forms the allowed and forbidden energy bands, that are useful to manipulate light propagation in various ways. And yet, when the required refractive index periodicity decreases to nano-scale (<100 nm), the possibilities of state-of-the-art lithography to fabricate such photonic crystals are restricted. Therefore, multidimensional photonic crystals are quite rare in practice.

One of alternative fabrication method is conformal deposition of thin films on structured surface, where every layer repeats initial surface modulation. Among physical vapour deposition technologies, ion beam sputtering shows most promise in conformal deposition, since its energetic particles tend to form highly dense and smooth layers. The practical value of such complex multilayer nanostructures has been demonstrated in Ref. [1], however its optical characteristics deviate from "ideal" one, i.e., theoretical predictions. Here, the discrepancies arise due to various reasons, such as modulation extinction after the thickness of deposited layers reaches several microns, distortion of modulation form etc.

Keeping the above discussions in mind, this work was of a more fundamental nature and was aimed to investigate the growth process of ion beam sputtered single layers on periodically modulated surfaces using different optically transparent materials, as hafnium, niobium, tantalum and silicon oxides. As the results show, replicability of surface modulation depends on material of choice. Among investigated materials, silica layer showed the most rapid smoothening of modulation, which can be associated with its "light" atoms (relatively small molecular weight), that are easier scattered by residual gasses and form low-density layers. Speaking of optical properties, when the periodically modulated single-layer structure with high refractive index is surrounded by a low refractive index media (see Fig. 1a), it features Fano-like resonance phenomena due to coupling of thin film waveguided modes with Fabry-Perot modes [2]. This phenomenon results in the appearance of extremely low transmittance lines in the transmittance (Θ, λ) maps (Fig. 1b). Also, these resonance lines show sensitivity with respect to the angle and the wavelength of the incident light, which can serve as a demonstration of spatial and spectral filtering in such compact photonic single-layer structures.

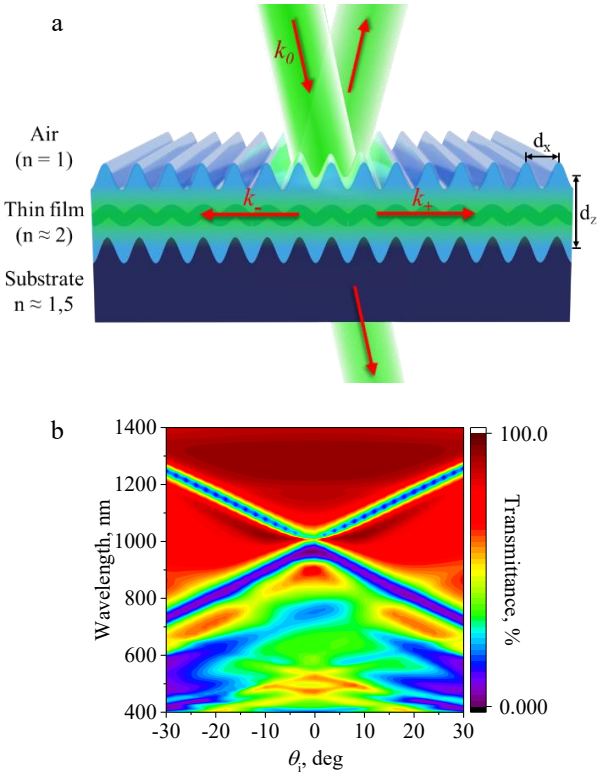


Fig 1.a. The schematic representation of Fano-like resonance in periodically modulated single-layer photonic structure; b. Transmission map in a plane (Θ, λ) for 0.2 μm thick tantalum oxide structured layer [2].

Key words: optical coatings, ion beam sputtering, nanostructured surface, angular and frequency selectivity.

Literature

[1] L. Grineviciute, C. Babayigit, D. Gailevičius, M. Peckus, M. Turduev, T. Tolenis, M. Vengris, H. Kurt, K. Staliunas, Adv. Optical Mater. 2001730, 2021
[2] L. Grineviciute, J. Nikitina, C. Babayigit, K. Staliunas, Applied Physics Letters 118, 131114, 2021

Temperatūrinės ir dažninės $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ elektrinių savybių ypatybės

Temperature and Frequency Dependent Electrical Properties of $Bi_{1-x}La_xFeO_3$

Saulius Daugėla[1], Nikita Liedienov[2], Aleksey Pashchenko[2], Valentina Sycheva[3], Dmitrii Tatarchuk[4], Yurii Didenko[4], T. Šalkus[1], A. Kežionis[1]

[1] Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio ave. 3, LT-10222 Vilnius, Lithuania
[2] Donetsk Institute for Physics and Engineering Named After O. O. Galkin, NASU, 03028 Kyiv, Ukraine
[3] Donetsk Institute for Physics and Engineering Named After O. O. Galkin, Donetsk, Ukraine
[4] National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky KPI", 03056 Kyiv, Ukraine
saulius.daugela@ff.vu.lt

Bismuth ferrite doped with lanthanum is a perspective multiferroic material for application in electronics and spintronics [1]. The synthesis, structure, valency, dielectric, magnetic and optical properties have been already analysed and reported [2-5], but still remains the lack of the investigation of the electrical properties at different temperatures and frequencies.

Ceramic samples of $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ (x=0.10, x=0.15, x=0.20) were sintered by rapid liquid-phase sintering (RLS) method [1,2]). The hexagonal *R*3*c* (ICDD: 98-001-5299) perovskite structure was reported by XRD measurements [3].

The electrical properties of $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ were investigated by the method of the impedance spectroscopy. The measurements of the sintered ceramics were performed in the frequency range of 10 Hz – 3 GHz and 300-800 K temperature interval.

All the conductivity values were taken from the Arrhenius representation. The total conductivity value is $2.47 \cdot 10^{-7}$ S/m for $Bi_{0.85}La_{0.15}FeO_3$ and $1.22 \cdot 10^{-7}$ S/m for $Bi_{0.8}La_{0.2}FeO_3$ at 500 K on the heating stage. Activation energies remain almost the same in all temperature ranges and are about 1.12-1.15 eV with possible tenuous transition point and insignificant inflection at 640 K for both compounds. The total conductivity value of $Bi_{0.9}La_{0.1}FeO_3$ is $6.22 \cdot 10^{-8}$ S/m at 500 K on the heating stage. Activation energy decreases from 1.34 eV to 1.15 eV at about 660 K temperature point. Inflection is slightly more apparent and conductivity value is smaller than that of the samples with higher concentration of lanthanum. On the cooling stage all the electrical characteristics tends to become almost the straight-line type on the Arrhenius representation plane.

The dielectric permittivity values are 14.0 for $Bi_{0.9}La_{0.1}FeO_3$, 13.2 for $Bi_{0.85}La_{0.15}FeO_3$ and 14.7 for $Bi_{0.8}La_{0.2}FeO_3$ at 300 K temperature and 1 GHz frequency.

Keywords: ceramics, multiferroic, ionic conductivity, impedance spectroscopy.

References

[1] G. Catalan, and J.F. Scott, Adv. Mater. **21**, 2463-2485 (2009).
[2] N.A. Liedienov, A.V. Pashchenko, V.A. Turchenko, V.Ya Sycheva, A.V. Voznyak, V.P. Kladko, A.I. Gudimenko, D.D. Tatarchuk, Yu.V. Didenko, I.V. Fesych, I.I. Makoed, A.T. Kozakov, and G.G. Levchenko, Ceram. Int. **45**, 14873-14879 (2019).
[3] A.V. Pashchenko, N.A. Liedienov, Q. Li, I.I. Makoed, D.D. Tatarchuk, Y.V. Didenko, A.I. Gudimenko, V.P. Kladko, L. Jiang, L. Li, V.G. Pogrebnyak, and G.G. Levchenko, Mat. Chem. and Phys. **258**, 123925 (2021).
[4] Z. Jian, N.P. Kumar, M. Zhong, H. Yemin, and P.V. Reddy, J. Magn. Magn. Mater. **386**, 92-97 (2015).
[5] E.K. Abdel-Khalek, I. Ibrahim, T.M. Salama, A.M. Elseman, and M.M. Mohamed, J. Magn. Magn. Mater. **465**, 309-315 (2018).

Stroncio titanato plonųjų sluoksnių auginimas impulsinio lazerinio nusodinimo metodu

Growth of Strontium Titanate film by Pulsed Laser Deposition

Vadzim Haronin[1], Sarunas Svirskas[1], Algirdas Selskis[1], Robertas Grigalatis[1], Juras Banys[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
vadzim.haronin@ff.vu.lt

Thin films of the metallic perovskite oxide are one of the most frequently studied samples. This dominance is primarily related to the unique diversity and correlation of electronic, magnetic, and optical phenomena observed in this class of materials. One of the solid candidate from that list is a Strontium Titanate oxide (STO). Strontium Titanate is a centrosymmetric paraelectric material with a cubic perovskite-type structure. It brings great attention because of possible applications in high-frequency agile devices, such as phase shifters, filters, delay lines, and tunable oscillators.

Properties of that kind of film depend heavily on the microstructure, epitaxial strain, and crystalline quality imposed by the underlying substrate. One of the best matches for STO film is Strontium ruthanate (SRO). SRO has a slight lattice mismatch with $SrTiO_3$ film (STO a = 3.905Å, SRO a = 3.93Å) [1], but also the fact that $SrRuO_3$ has become the standard electrode material in a broad range of all-oxide devices, especially for use in new data-storage technologies, bring us to using it as an electrode in our structure.

Both of these films were prepared by the Pulsed Laser Deposition technique (PLD). Pulsed laser deposition (PLD) is a PVD technique wherein a high-power pulsed laser beam is focused inside a vacuum chamber to hit a target of the material to be deposited. This material is vaporized from the target (as a plasma plume) and is then coated as a thin layer on a substrate.

To test STO film planar capacitor structure was planned and prepared. SRO film was deposited on a cleaned STO substrate (100). Then on top of our bottom contact, STO film was coated. Top contact was made by the thermal evaporation of silver through the mask. The scheme of the prepared sample is a view in Fig. 1.



Fig. 1. Scheme of the structure (not in scale)

Fig. 2a shows a cross-sectional scanning electron microscope (SEM) image and fig. 2b energy-dispersive spectroscopy (EDS) was used to estimate the thickness of the film. The overall thickness of these 2 films is around 300 nm by detection of Ru element, which cannot be observed in STO film or substrate on its own. The detailed intensity of the elements that clarify the approximate thickness of films was plotted in Fig. 2b. The thickness of the STO and SRO films that was measure by SEM-EDS is around 170 nm and 130 nm accordingly.

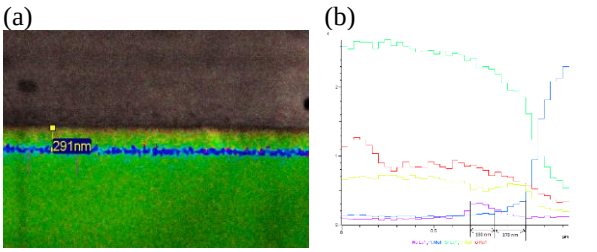


Fig. 2. SEM cross-section image of the sample with inset of EDS intensity of elements

The structural properties of the films were characterized by x-ray diffraction (XRD) using a Rigaku 9KW diffractometer with Cu Kα radiation. According to θ-2θ scan, STO film is polycrystal with the strongest peak on (111) and (110) position which can be explained by preferential growth of STO film in this direction on a way from amorphous to single-crystal film [2]. The polycrystallinity of this film was caused by poor crystallinity of SRO with an observed peak 2θ = 54.41 Å, which corresponds to peak (116) (Fig. 2). Also, a small (100) peak on that scan was attributed to our STO substrate.

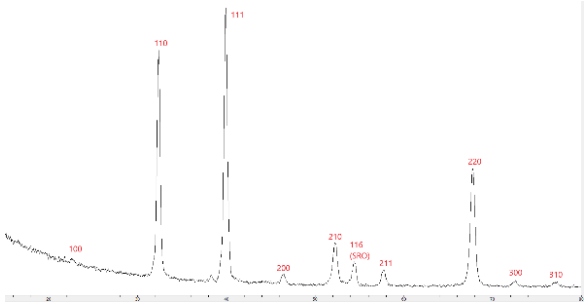


Fig. 2. θ-2θ scan of the STO films on SRO film.

Keyword: Ferroelectric films; $SrTiO_3$; $SrRuO_3$; PLD.

Literature

[1] Ban, Z.-G & Alpay, S. Pamir & He, Feizhou & Wells, Barrett & Xi, X.. (2004). Multiple relaxation mechanisms in SrTiO3/SrRuO3 heterostructures. Applied Physics Letters. 84.
[2] R. Wordenweber et al. / Journal of the European Ceramic Society 27 (2007) 2899–2902.

Dielektrinės dispersijos metastabiliuose $BiCrO_3$ and $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$ junginiuose ypatumai

Peculiarities of the dielectric dispersion in metastable perovskites $BiCrO_3$ and $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$

Robertas Grigalaitis[1], Vaidotas Paukšta[1], Jūras Banys[1], João Pedro Cardoso[2], Andrei N. Salak[2], Davide Delmonte[3], Edmondo Gilioli[3]
[1] Faculty of Physics, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, Vilnius, LT-10226 Lithuania
[2] Department of Materials and Ceramics Engineering and CICECO - Aveiro Institute of Materials, 3810-193 Aveiro, Portugal
[3]IMEM-CNR, Parco Area delle Scienze 37/a, 43124 Parma, Italy
robertas.grigalaitis@ff.vu.lt

$BiCrO_3$ belongs to the family of perovskite multiferroics which can be produced by high-pressure synthesis route. This compound stabilizes in centrosymmetric *C*2/*c* structure, which reversibly transforms to the nonpolar *Pnma* one at 410 K [1]. This phase transition is accompanied by the dielectric anomaly first reported by S. Niitaka *et al*. [2]. A substitution of Cr^{3+} by Sc^{3+} results in a shift of the transition to higher temperatures and increase of the range of coexistence of the *C*2/*c* and *Pnma* phases [3]. Besides, the negative jump of the unit cell volume upon increasing temperature observed in $BiCrO_3$ [1] becomes bigger in $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$. Therefore, it was interesting to examine these compositions to see how the bigger Sc^{3+} ion distorts the lattice and changes the dielectric and other functional properties.

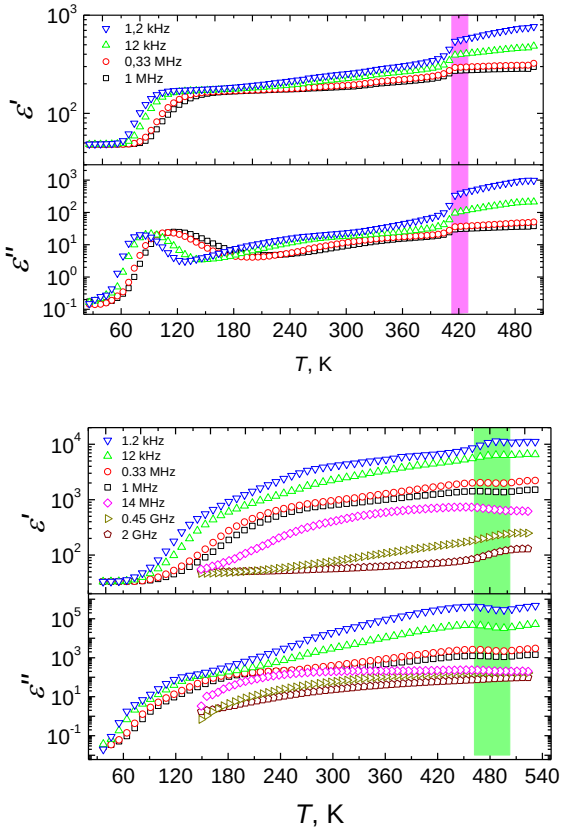
The complex dielectric permittivity was measured with the HP4284A LCR meter and the vector network analyzer Agilent 8714ET in the frequency ranges of 20 Hz – 1 MHz and 2 MHz – 3 GHz, respectively. The temperature range of 40−530 K was covered using a custom made cryostat with a rate of temperature change of 1 K/min.

Dielectric studies have shown a considerable dispersion and big losses for both $BiCrO_3$ and $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$ ceramics. While the dielectric anomaly for $BiCrO_3$ is quite clearly seen, Sc^{3+} substituted compound shows only a weak kink of the dielectric curves in the region of phase transition (1 pav.).

The reason for this is the increased electrical conductivity due to charge accumulation at grain boundaries leading to the Maxwell-Wagner-Sillars relaxation. The electrical conductivity analysis was performed using the Almond−West formalism:

$$\sigma(\omega) = \sigma_{DC} + A\omega^S,$$

from which the frequency-independent (DC) conductivity σ_{DC} was extracted. At temperatures above the phase transition the value of activation energy for $BiCrO_3$ is about 0.31 eV. In phase transition region we see a gradual change in both the values of the DC conductivity and activation energy which increases to 0.49 eV. For $BiCr_{0.9}Sc_{0.1}O_3$ compound the *Pnma*−*C*2/*c* transition is accompanied by an increase in the dc conductivity and a decrease in activation energy from 0.34 eV to 0.23 eV which is the opposite behavior as compared with that of $BiCrO_3$. Anyway, a clear change in the DC conductivity behavior for both compounds at the phase transition temperature is another confirmation of the phase transition in these materials.



1 pav. Temperature dependence of undoped (top picture) and Sc-doped (bottom picture) $BiCrO_3$ at selected frequencies.

Reikšminiai žodžiai: dielectric dispersion, phase transition, metastability, perovskite.

Literatūra

[1] A. A. Belik *et al*. Chem. Mater. 2008, 20 (11), 3765−3769.
[2] S. Niitaka, *et al*. Solid State Ionics 2004, 172 (1-4), 557−559.
[3] J. P. Cardoso *et al*. Inorg. Chem. 2020, 59 (13), 8727−8735.

Dvigubos histerezės kilpos $Sn_2P_2S_6$ kristaluose

Double hysteresis loops in $Sn_2P_2S_6$

Ilona Zamaraitė[1], Andrius Džiaugys[1], Ruslan Yevych[2], Mihail Medulych[2], Juras Banys[1], Yulian Vysochanskii[2]
[1]Vilnius University, Vilnius, Lithuania
[2]Uzhgorod University, Uzhgorod, Ukraine
ilona.zamaraite@ff.vu.lt

For $Sn_2P_2S_6$ (SPS) ferroelectrics the second order phase transition at T_0 ~ 337 K with mixed displacive – order/disorder character is occurred [1]. Observed evolution of the soft mode spectrum is enough complicate – several low energy optic branches linearly interact at heating and relaxational central peak growths near the phase transition temperature. By DFT methodology it was found [2] that local potential for the spontaneous polarization fluctuations in SPS ferroelectrics has three – well shape. This peculiarity is related to Sn^{2+} cations electron lone pair stereoactivity [2, 3] and to valence fluctuations P^{4+} + P^{4+} - P^{3+} + P^{5+} inside $(P_2S_6)^{4-}$ anions [4]. Microscopic origin of ferroelectric lattice instability in SPS can be described as second order Jahn-Teller effect and their thermodynamics is considered in the frame of Blume-Emery-Grffiths model. At accounting of electronic correlation, the presentation of Anderson's electron pairs flipping can be involved. At this the electronic recharging and lattice instability can be presented as pseudospin fluctuations in anharmonic potential with complicate shape. The anharmonic quantum oscillator (AQO) model is proposed [4] for description of temperature–pressure phase diagram of SPS (Fig. 1). This model we generalize by taking onto of two inequal interacting systems of oscillators and applicate for analysis of ferroelectric dynamics at temperature and pressure variation.

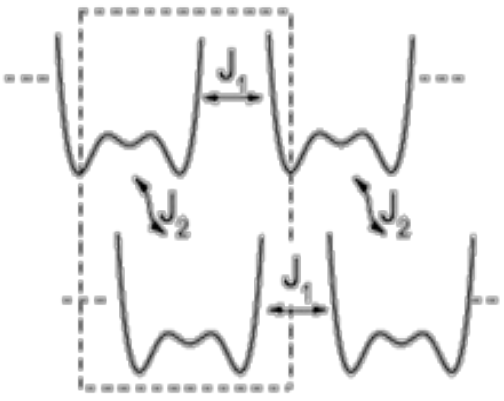


Fig. 1 The AQO model

As direct confirmation of three-well shape of the local potential in SPS, we present our observation of antiferroelectric – like double dielectric poops in this proper uniaxial ferroelectrics. Qualitively this phenomenon can be explained as repopulation of pseudospins between possible three states (-1, 0 +1) during repolarization process at external electric field influence. The calculations give us the stable and metasrable solutions which describe ferroelectric and antiferroelectric phases and corresponding types of loops depending on parameters of AQO model. The temperature – electric field diagram in the parameters of AQO model is described. Experimental condition for realization of "ferroelectric" or "antiferroelectric" loops are investigated.

Literatūra

[1] Yu. Vysochanskii, T. Janssen, R. Currat, R. Folk, J. Banys, J. Grigas, and V. Samulionis. *Phase transitions in ferroelectric phosphorous chalcogenide crystals* (Vilnius University Publishing House, 2008)
[2] K. Z. Rushchanskii, Yu. Vysochanskii, D. Strauch. Phys. Rev. Lett. **99**, 207601-1 (2007).
[3] K. Glukhov, K. Fedyo, J. Banys, Yu. Vysochanskii. Int. J. Mol. Sci. **13**, 14356 (2012).
[4] R. Yevych, V. Haborets, M. Medulych, A. Molnar, A. Kohutych, A. Dziaugys, Ju. Banys, Yu. Vysochanskii. Low Temp. Phys. **42**, 1477 (2016).

Dipolio tvarkymosi ypatumai mišriuose katijonų halidų perosvkituose

Peculiarities of dipolar ordering in mixed cation halide perovskites

Sergejus Balciunas[1], Mantas Simenas[1], Sarunas Svirskas[1], Martynas Kinka[1], Vytautas Samulionis[1], Robertas Grigalaitis[1], Juras Banys[1], Andrius Garbaras[2], Anna Gagor[3], Miroslaw Maczka[3], Adam Sieradzki[4]
[1]Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania.
[2]Mass Spectrometry Laboratory, Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania.
[3]Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences PL-50-950 Wroclaw, Poland.
[4]Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences PL-50-370 Wroclaw, Poland.
sergejus.balciunas@ff.vu.lt

The methylammonium (MA) lead halides $MAPbX_3$ (where X = I, Br, Cl) are popular perovskite materials among scientists and industry due to their perspectives in effective and cheap solar cells. During the past decade, the power conversion efficiency of cells based on these hybrid compounds exceeded more than 20%. A high performance of these materials results from several physical properties such as large absorption coefficient, optimal bandgap, long carrier diffusion length, low exciton binding energy, exceptional defect tolerance. However, a successful application of hybrid perovskite solar cells is mainly prevented by their lead toxicity and poor both thermal and water stability.

The most stable and efficient solar cells are obtained by using perovskites with mixed cations at the A-site. The most popular alternatives to MA are formamidinium and Cs^+ ions. A Dimethylammonium (DMA) cation has been introduced recently as an alternative A-site modification for these compounds. Several investigations have shown that during certain synthesis procedures high quantities of DMA may be unintentionally introduced into $MAPbI_3$ and $CsPbI_3$. These modifications stabilize the preferable cubic phase of $MAPbI_3$ and leads to the enhanced performance at ambient condition.

In the field of classical inorganic perovskites it is well known that mixing may significantly perturb structure of resulting compound. Thus, the long-range order can be suppressed and frustrated phases may appear. The dielectric permittivity behavior of lead halides seem to be especially informative for the performance of the perovskite cells, as their relatively high value of the dielectric permittivity results in a pronounced defect tolerance and low exciton binding energy. However, a complete understanding of mixing effects on the dielectric permittivity dynamics and structural phase behavior is still absent. Here, we present a multitechnique experimental study of the mixed hybrid perovskite $MA_{1-x}DMA_xPbBr_3$. Our results show that structural phase transitions are significantly suppressed even for a low substitution of the DMA cations. For higher DMA levels, the long-range dipolar order disappears and dipolar glass dielectric behavior dominates in the dielectric spectra.

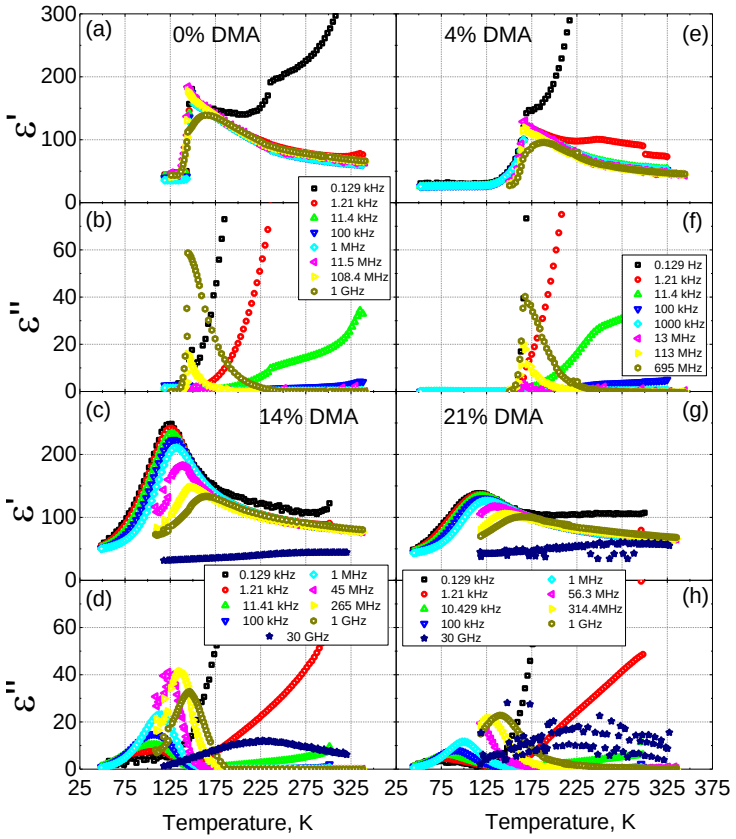


Fig. 1. *Temperature dependence of the real (a,e,c,g) and imaginary (b,f,d,h) parts of dielectric permittivity for* $MA_{1-x}DMA_xPbBr_3$ *crystals.*

Keywords: Perovskites, dielectric permittivity, phase transition, halides, solar cell absorbers.

ZIF metalo organinių karkasų ligandų dinamikos tyrimas dielektrinės spektroskopijos metodu

Investigation of linker rotation dynamics in ZIF family metal-organic frameworks using broadband dielectric spectroscopy

M. Kinka[1], S. Balčiūnas[1], M. Varnauskas[1], R. Grigalaitis[1], A. Solovjovas[1], F.-K. Shieh[2]
[1] Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania
[2] Department of Chemical Engineering, National Taiwan University, Taipei 10617, Taiwan
martynas.kinka@ff.vu.lt

MOFS or metal-organic frameworks are clusters of polytopic organic ligands, which connect metal ions through coordination bonds. Choosing specific metal centers and design of organic linkers allows relatively simple tuning of properties of these materials towards enhancement of their capabilities. Recent studies have shown, that often organic linkers possess some type of flexibility or rotational mobility, which is a contrasting characteristic in respect to other porous materials like zeolites and might be responsible for unique properties of MOFs [1].

Zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs) are subclass of metal-organic frameworks consisting of tetrahedrally-coordinated transition metal ions binded by imidazolate linkers. ZIFs are promising compounds due to their thermal, chemical stability and high porosity. ZIFs are used for gas adsorption and separation, catalyzation, chemical sensors- electronic devices, drug delivery

One of the most attractive MOFs among the ZIF family for gas separation is ZIF-8, which has Zn^{2+} core connected by 2-methylimidazole linkers. This zeolitic framework has narrow size 3.4 Å- diameter 6-ring windows which interconnect larger cavities of 11.6 Å in diameter. It was found, that despite ZIF-8 should separate smaller molecules than its 6-ring windows size, some larger molecules (methane, nitrogen) are also adsorbed by this framework. Such adsorption was clarified by 2-methylimidazole linker gate- opening (breathing) principle.

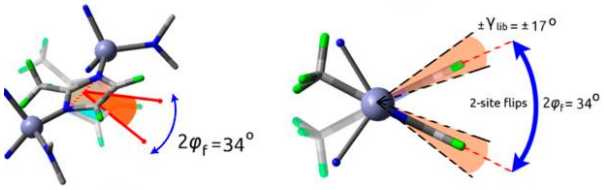


Fig. 1 ZIF-8 linkers motional model [2]. Upon heating, the fast twosite flips are followed by fast librations on the equilibrium positions sites. At high temperatures the librations amplitude is comparable with flips amplitude, thus increasing considerably the ZIF-8 windows aperture.

Our investigations of dielectric properties of ZIF-90 MOFs showed, that broadband dielectric spectroscopy can be used to probe linker rotation dynamics and the influence of adsorbed molecules [3] in FOFs. In order to investigate the influence of interexchange of different metal centers and organic linkers we further investigated dielectric properties of ZIF-8, ZIF-67 and ZIF-90 in the 1 Hz – 1MHz frequency and 200 K – 500 K temperature ranges. Investigated ZIFs were synthesized following a novel environmentally friendly synthesis method using water as a solvent. Analysis of measured complicated dielectric spectra allowed us to distinguish several relaxation processes caused by lattice and adsorbed polar molecule dynamics. Temperature evolution of these relaxation processes and influence of surrounding gas atmosphere was analysed in order to identify and characterise linker rotations in these MOFs.

Keywords: MOF, ZIF, linker rotation, dielectric spectroscopy.

Literatūra

[1] A. Gonzalez-Nelson et al., Nanomaterials 2019, 9, 330; doi:10.3390/nano9030330
[2] D. I. Kolokolovet al., J. Phys. Chem. C 2015, 119, 27512 − 27520; doi: 10.1021/acs.jpcc.5b09312
[3] S. Balciunas et al., J. Phys. Chem. C 2019, 123, 631−636; doi: 10.1021/acs.jpcc.8b10862

Pereinamųjų metalų oksidų ALD sluoksnių tyrimai GaN optoelektronikos taikymams

Investigation of ALD transition metal oxide films for GaN optoelectronic‘s applications

Roland Tomašiūnas[1], Ignas Reklaitis[1], Tadas Malinauskas[1], Sandra Stanionytė[2], Riina Ritasalo[3], Martin Mandl[4], Sebastian Taeger[4], Martin Strassburg[4]
[1] Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius, Lithuania
[2] State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio ave. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[3] Picosun Oy, Tietotie 3, 02150 Espoo, Finland
[4] OSRAM Opto Semiconductors GmbH, Leibnizstr. 4, 93055 Regensburg, Germany
rolandas.tomasiunas@ff.vu.lt

Anticipation for the oxide barrier layers to fulfill simultaneously a complex of requirements for current spreading, passivation, light extraction, encapsulation, or chemical stability within the process flow of optoelectronic device manufacturing is high. Besides that, the electrical characteristics for the device operation are essential, meaning the stable flat-band, the low leakage current, the high breakdown strength, etc. That’s why the efforts of the oxides community pay off with the appearance of new oxides, new bilayer, or even multilayer combinations featuring better, more persistent, qualities.

The atomic layer deposition (ALD) is among the most popular oxide deposition techniques, providing uniform deposition of conformal ultra-thin films with controllable thickness, even on complex three-dimensional surfaces. Not a surprise that the GaN optoelectronic industry has this technique more and more integrated into their production lines of LED, LD, MOS, and other devices.

In this work, we present a study about a series of transition metal oxides, HfO_2, ZrO_2, Ta_2O_5, TiO_2, Nb_2O_5, and Y_2O_3 but also SiO_2 and Al_2O_3 as a reference, ALD deposited on silicon or GaN substrates. The key issue was to focus on thermal and electrical stability. We correlate the oxide layer surface morphology with the post-annealing phase transformation while showing selective crystallization kinetics for the ALD oxide on silicon and GaN, in the view of deposition temperature, and oxidant [1]. A high breakdown field beneficial for insulation layers, we demonstrate for the oxides deposited at a lower temperature of ≤125°C, in particular HfO_2, ZrO_2, Ta_2O_5/H_2O (oxide/oxidant), and Al_2O_3. For the oxide-GaN interface at zero gate voltage and under unstressed condition, we have observed a qualitative feature demonstrating different dependence of the net fixed charge in the oxide or/and at the interface with the deposition temperature, namely, an increase of positive charge for oxidant water and an increase of negative charge for oxidant ozone. Best interface quality, least charge, and only slightly influenced by the deposition temperature, we have observed for the ZrO_2/H_2O. Instead, the highest temperature dependence – observed for the Al_2O_3/H_2O [2]. Comparatively, we discuss the C-V hysteresis resulting from the variation of interface trapping state concentration and their changes in the course of the crystallization. Worth mentioning that the comparative study on a variety of oxides deposited and investigated was performed on the same trial.

This research was executed within a project FLINGO under the M-ERA.NET scheme and was funded by the Research Council of Lithuania (grant No.M-ERA.NET-2/2016), German Federal Ministry of Education and Research (BMBF), and Finnish national funding agency.

Keywords: ALD, oxide, film, GaN, silicon, annealing, electrical breakdown, interface.

Literatūra

[1] I. Reklaitis, E. Radiunas, T. Malinauskas, S. Stanionytė, G. Juška, R. Ritasalo, T. Pilvi, S. Taeger, M. Strassburg, and R. Tomašiūnas., Surf. Coat. Technol. **399**, 126123 (2020).
[2] R. Tomašiūnas, I. Reklaitis, E. Radiunas, G. Juška, R. Ritasalo, T. Pilvi, M. Mandl, S. Taeger, and M. Strassburg. 21st Int. Conf. on Transparent Optical Networks, ICTON '19, 2019, Anger, France. IEEE Proc., We.E4.5, 2019 (ISBN: 978-1-7281-2779-8/19).

Termografinių fosforų spektrinių savybių charakterizavimas optinės termometrijos taikymams

Characterization and spectral properties of thermographic phosphors for optical thermometry appliations

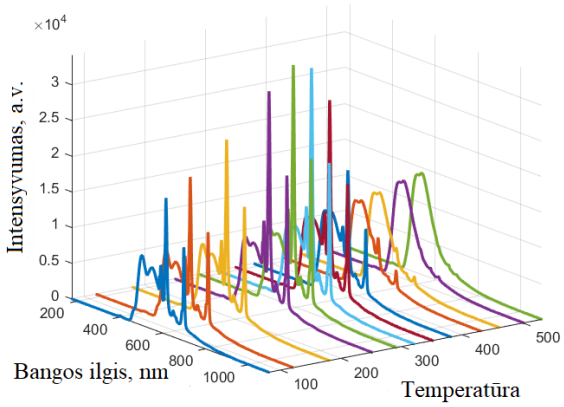
Anastasija Supranovič[1], Akvilė Zabiliūtė-Karaliūnė[1], Artūras Katelnikovas[2], Pranciškus Vitta[1]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
[2]Chemijos Institutas, Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas, Naugarduko 24, 03225 Vilnius
anastasija.supranovic@ff.stud.vu.lt

Paviršiaus temperatūros matavimas yra esminis daugelio pramoninių procesų ir jų optimizavimo veiksnys. Norint atlikti tikslius temperatūros matavimus, galima taikyti daugelį įvairių jutiklių ir prietaisų, pavyzdžiui, termoporas, termistorius ar infraraudonosios spinduliuotės (IR) matuoklius. Temperatūros jutikliai, tokie kaip termoporos, turi kontaktą su paviršium, kas savo ruožtu turi įtakos prietaiso tikslumui ir todėl tokie sensoriai nejaučia temperatūros svyravimų mikronų skalėje.[1] Dėl to paviršiaus temperatūros įvertinimui labiau tinka bekontakčiai termometrai. Nors IR termometrai ir suteikia bekontakčio matavimo galimybę, tačiau jų signalai gali būti paveikti šiluminės foninės spinduliuotės. Kita prieš tai minėtų metodų alternatyva yra fosforų termometrija, kuri veikia liuminescencinių fosforų pagrindu. Tokie termometrai pagrįsti fosforų fotoliuminescencijos (FL) intensyvumo, spektro formos ar FL gesimo trukmės priklausomybe nuo temperatūros.[1,2]

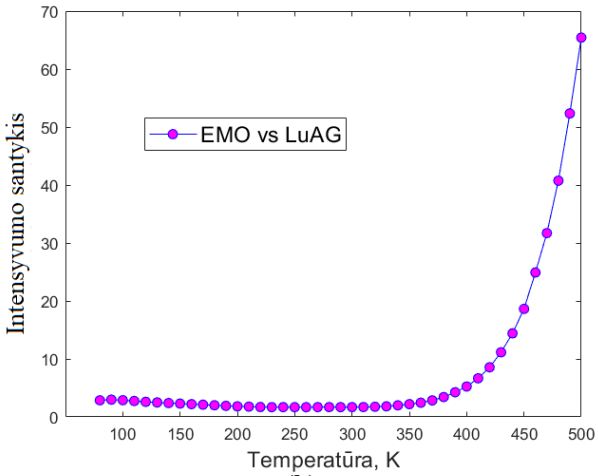
Šiuo tyrimu siekiama ištirti retųjų žemių elementų pagrindu sintetintų fosforų pritaikomumą optinei termometrijai, panaudojant FL spektro smailių intensyvumo santykio metodiką. Šiame darbe nagrinėjamos termografinių $Lu_3Al_5O_{12}$:0.5%:Ce^{3+} (LuAG) ir $Eu_2Mo_4O_{15}$ (EMO) fosforų spektrinės savybės bei vertinamas jų tinkamumas optiniam termometrui. Bandiniai buvo ruošiami maišant 30 wt% fosforo miltelių su silikonu ir paliekant sustingti 0.5 mm gylio formelėse.

Temperatūrai jautrių fosforų savybės ištirtos taikant kelis metodus. Šiame darbe įvertinti fosforų kvatiniai našumai (QE) bei atlikti šiluminiai FL matavimai kriostate, o fosforų spektrų priklausomybė nuo temperatūros parodyta 1 (a) pav. Iš gautų spektrų apskaičiuoti FL intensyvumo santykiai tarp skirtingų EMO smailių bei tarp EMO ir LuAG fosforų (1 (b) pav.). Tyrimo metu taip pat apskaičiuotos jautrumo funkcijos (*angl. sensitivity*) vertės ir įvertinta optinio termometro (arba EMO ir LuAG fosforu pasiekiama) rezoliucija.

Kaip ir tikėtasi, FL spektrai parodė, kad EMO fosforas yra jautresnis aplinkos temperatūros pokyčiams, tuo tarpu LuAG yra stabilesnis keičiantis temperatūrai. Aukščiausia pasiekta jautrumo vertė $S_A = 0.028\ K^{-1}$ prie 450 K ir 1.4 K rezoliucija pagrindžia šių dviejų fosforų tinkamumą optiniam termometrui.



(a)



(b)

1 pav. Išmatuota $Lu_3Al_5O_{12}$:0.5%:Ce^3 ir $Eu_2Mo_4O_{15}$ fosforų mišinio FL spektrų priklausomybė nuo temperatūros (a) ir apskaičiuotas jų smailių intensyvumo santykis (b).

Reikšminiai žodžiai: fosforai, fotoliuminescencija, optinė termometrija.

Literatūra

[1] X. Wang, Q. Liu, Y. Bu, RSC Adv **105**, 86219–86236 (2015).
[2] Y. Zhao, X. Wang, Y. Zhang, Y. Li, J. Alloy. Compd. **817** (2020).

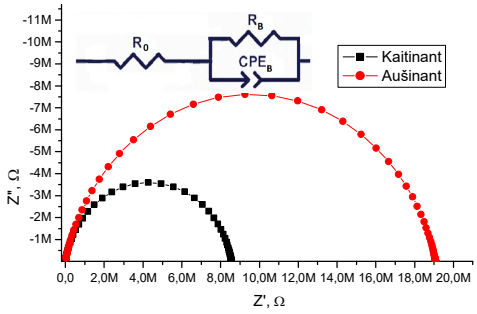
Plonų 6ScAlSZ sluoksnių, suformuotų garinant elektronų spinduliu, savybių tyrimas

Investigation of the properties of 6ScAlSZ thin ceramic films formed by e-beam evaporation

Darius Virbukas[1,2], Mantas Sriubas[1], Nursultan Kainbayev[1,3], Kristina Bočkutė[1], Giedrius Laukaitis[1]
[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[2]Kauno kolegija, Technologijų fakultetas, Pramonės pr. 20, LT-50468 Kaunas
[3] Kazachstano Al-Farabi nacionalinis universitetas, Šiluminės ir techninės fizikos katedra, 71 Al-Farabi Ave., 050040 Almata, Kazachstanas
darius.virbukas@ktu.lt

Nelegiruotas ZrO_2 pasižymi žemu deguonies jonų laidumu dėl mažos deguonies vakansijų koncentracijos ir polimorfinio pobūdžio. ZrO_2 elektrolitų joninis laidumas priklauso nuo priemaišų atominių spindulių, priemaišų koncentracijos, elektrostatinės sąveikos tarp priemaišų ir deguonies vakansijų bei fazinės sudėties. Nustatyta, kad optimali priemaišų koncentracija yra apie 8–10 mol.%. Laidumas mažėja esant didesnei ar mažesnei priemaišų koncentracijai dėl priemaišų klasterių formavimosi arba mažos deguonies vakansijų koncentracijos. Cirkonio dioksidas, legiruotas 6 mol% Sc (6ScSZ), turi vieną didžiausią joninį laidį 1000°C temperatūroje. Tačiau laidumas tampa lygus arba mažesnis nei YSZ laidumas esant 500°C dėl padidėjusios aktyvacijos energijos. Norint padidinti deguonies joninį laidumą ir kubinės fazės stabilumą, 6ScSZ galima legiruoti nedideliais kiekiais (0,5–2 mol%) CeO_2, Gd_2O_3, Sm_2O_3, Bi_2O_3, Yb_2O_3 ir Al_2O_3 [1]. Legiruojant Al_2O_3, gali pasikeisti kristalinė 6ScSZ struktūra, turinti įtakos mechaninėms ir elektrinėms savybėms [2]. Be to, skirtingi formavimo metodai ir jų pasirinkti technologiniai parametrai irgi lemia legiruoto ScSZ joninį laidį.

Šiame darbe nagrinėjamos skandžio ir aliuminio oksidu stabilizuoto cirkonio oksido (ZrO_2:Sc_2O_3:Al_2O_3 93:6:1 mol%) (6ScAlSZ) plonų sluoksnių, suformuotų garinant elektronų spinduliu, savybės.



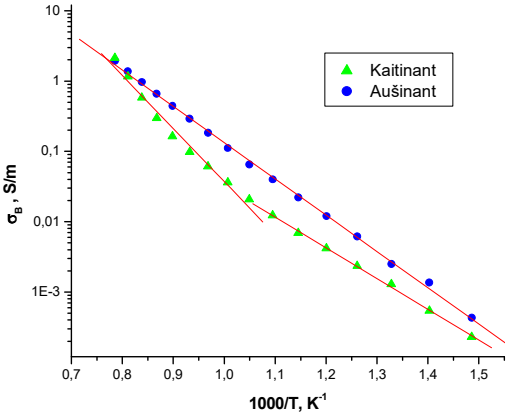
1 pav. 6ScAlSZ keramikos *-ImZ(ReZ)* priklausomybė, esant 8 Å/s nusodinimo greičiui

Plonasluoksnės 6ScAlSZ keramikos buvo suformuotos, esant 8 Å/s nusodinimo greičiui ir 450 ˚C padėklo temperatūrai. Plonų sluoksnių elektrinių savybių tyrimui buvo naudojamas kompleksinės varžos spektrometras. Elektrinės keramikų savybės tirtos 673–1273 K temperatūrų ir $10^{-1} \le f \le 10^6$ Hz dažnių intervaluose. Ramano spektroskopija buvo naudojama nustatyti plonų dangų fazinę sudėtį.

Suformuotų plonų sluoksnių laidumas apskaičiuotas iš *-ImZ(ReZ)* priklausomybės (1 pav.) ir buvo gautos laidžio priklausomybės nuo temperatūros (2 pav.). Aktyvacijos energija (ΔE_a), esant skirtingiems temperatūrų intervalams, pateikta 1 lentelėje.

1 lentelė. 6ScAlSZ plonų sluoksnių aktyvacijos energijos ΔE_a, esant skirtingiems temperatūrų intervalams.

Temperatūra, K	Kaitinant		Aušinant
	673-913	913-1273	1273-673
Aktyvacijos energija, eV	0,873	1,511	1,032



2 pav. 6ScAlSZ plonų sluoksnių laidžio priklausomybė nuo temperatūros

Buvo nustatyta, kad vyksta fazinis virsmas (2 pav.) ir pakinta fazinė junginio sudėtis (2 lentelė).

2 lentelė. 6ScAlSZ keramikos fazinė sudėtis prieš ir po kompleksinės varžos matavimų.

	Monoklininė	Tetragoninė	Kubinė
Prieš	18 %	82 %	0%
Po	16 %	61 %	23%

Iš atliktų tyrimų galime teigti, kad įterpiant nedidelį kiekį Al_2O_3 į Sc_2O_3–ZrO_2 junginį, ploni sluoksniai, suformuoti garinant elektronų spinduliu, pasižymi mišria fazine sudėtimi, turinčia įtakos elektrinėms savybėms.

Reikšminiai žodžiai: elektronų spindulio nusodinimo metodas, cirkonio oksidas stabilizuotas itrio oksidu.

Literatūra

[1] Cun Xin Guo, Jian Xin Wang, Chang Rong He, Wei Guo Wang. Ceramics International 39 (2013) 9575–9582.
[2] S.P.S. Badwal, , F.T. Ciacchi , S. Rajendran , J. Drennan. Solid State Ionics 109 (1998) 167–186.

Padėka

Tyrimai buvo finansuoti Europos regioninės plėtros fondo (projektas Nr. 01.2.2-LMT-K-718-01-0071) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Chromo oksido ir chromo oksido kompozitų dangų suformuotų plazminiu purškimu tribologinės savybės

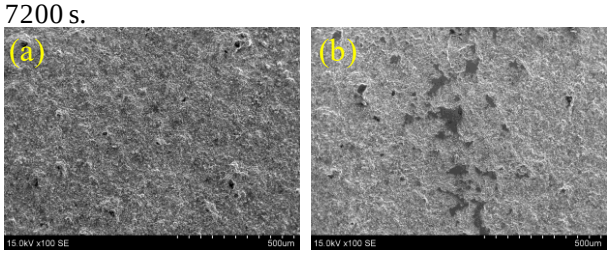
Tribological properties of chromia and chromia composite coatings deposited by plasma spraying

L. Bastakys[1*], M. Grigaliūnas[1], L. Marcinauskas[1,2], R. Kėželis[2], S. Matkovič[3], M. Aikas[2]

[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[2]Lietuvos energetikos institutas, Plazminių technologijų laboratorija, Breslaujos g. 3,LT-44403, Kaunas
[3]University of Ljubljana, Bogišićeva 8, 1000 Liubliana, Slovėnija
lukas.bastakys@ktu.edu

Keraminės dangos gali būti naudojamos įvairiose pramonės srityse, siekiant apsaugoti paviršius nuo nusidėvėjimo, dilimo ar korozijos [1,2]. Plazminiu purškimu suformuotos chromo oksido dangos pasižymi dideliu kietumu ir atsparumu nusidėvėjimui [3]. Nedideli SiO_2 arba TiO_2 priemaišų kiekiai gali dar labiau pagerinti dangų tribologines savybes [4]. Bemetalų oksidų, grafito priemaišos taip pat gali būti naudojamos siekiant pagerinti formuojamų keraminių dangų savybes. Įmaišius grafito, suformuotos keramikos kompozitų dangos pasižymi mažesniu trinties koeficientu bei geresniu atsparumu dilimui [5,6]. Šio darbo tikslas buvo palyginti chromo oksido (Cr_2O_3) ir chromo oksido kompozitų (Cr_2O_3-SiO_2-TiO_2 ir Cr_2O_3-SiO_2-TiO_2-grafito) dangų paviršiaus morfologiją, fazinę ir elementinę sudėtis, bei tribologines savybes.

Chromo oksido ir chromo oksido kompozitų dangos buvo formuojamos atmosferiniu plazminiu purškimu ant plieno (P265GH) pagrindo. Plazmai formuoti buvo naudojamas oro ir vandenilio dujų mišinys. Dangos formuotos išlaikant 70 mm atstumą, esant ~37,8 kW plazmotrono galiai. Dangų paviršiaus morfologija buvo tiriama skenuojančiu elektroniniu mikroskopu Hitachi S-3400N. Paviršiaus linijinio šiurkštumo vertės buvo išmatuotos Mitutoyo Surftest-SJ-210 profilometru. Suformuotų dangų elementinė sudėtis įvertinta Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektroskopija (EDS) naudojant Bruker Quad 5040 spektrometrą. Dangų kristalinė struktūra bei fazinė sudėtis buvo tiriamos Rentgeno spindulių difraktometrija (XRD) naudojant D8 Discover Bruker difraktometrą. Tribologinės savybės nustatytos CETR-UMT-2 tribometru esant sausai trinčiai. Tribologiniai tyrimai atlikti naudojant 1 N ir 3 N apkrovos jėgas, o vieno bandymo trukmė buvo iki 7200 s.



1 pav. Chromo oksido dangos paviršių vaizdai: (a) prieš ir (b) po tribologinių tyrimų.

Paviršiaus morfologijos tyrimai parodė, kad chromo oksido ir jo kompozitų dangos pasižymi netvarkinga paviršiaus struktūra susidedančia iš įvairaus dydžio ir formos fragmentų, kurių dydis ~10-20 µm (1 pav. a). Chromo oksido dangų linijinio paviršiaus šiurkštumo vertės buvo ~2,7 µm. Tuo tarpu Cr_2O_3-SiO_2-TiO_2 dangų šiurkštumo vertės buvo ~28 % mažesnės. EDS tyrimai parodė, kad grafito kiekis Cr_2O_3-SiO_2-TiO_2-grafito dangų paviršiuje siekia iki ~1,1 % pagal masę. Verta paminėti, kad grafito koncentracija, dangų formavimui naudotuose mišinio milteliuose buvo 10 % pagal masę. Toks skirtumas gali būti nulemtas grafito miltelių sublimavimu aukštos temperatūros plazmoje vykstant plazminio purškimo procesui. XRD analizė parodė, kad dangose dominuoja eskolaito fazės chromo oksidas. Tribologiniai tyrimai parodė, kad esant 1 N apkrovai, Cr_2O_3 dangos trinties koeficientas buvo ~0,47, o chromo oksido kompozitų dangų trinties koeficiento vertės ~11-46% mažesnės. Esant 3 N apkrovai, dangų trinties koeficiento vertės siekė ~0,37. Lyginant su plieno pagrindu, dangų trinties koeficientas sumažėjo nuo 25 % iki 60 %. Nustatyta, kad suformuotos chromo oksido ir chromo oksido kompozito dangos yra atsparios dilimui. Po tribologinių tyrimų dangų paviršius buvo tik nežymiai pažeistas (1 pav. b). Lyginant su plienu, kurio santykinis dilimo greitis buvo ~7,78 x 10^{-5} $mm^3/(Nm)$, suformuotų chromo oksido ir jo kompozitų dangų santykinio dilimo greičiai buvo bent 10 kartų mažesni.

Reikšminiai žodžiai: chromo oksidas, keraminės dangos, plazminis purškimas, tribologinės savybės, trinties koeficientas.

Literatūra

[1] F. Venturi, J. Pulsford, Materials Letters **276**, 128283 (2020).
[2] P. Zamani, Z. Valefi, Surf. And Coat. Tech. **316**, 138-145 (2017).
[3] P. Zamani, Z. Valefi, Surf. And Coat. Tech. **316**, 138-145 (2017).
[4] G. Bolelli, D. Steduto ir kt., Wear **480-481**, 203931 (2021).
[5] A. Amudha, H.S. ir kt. Mater. today: Proceedings **39**, 1503 (2021).
[6] L. Marcinauskas ir kt. Journ. of Alloys and Comp. **827**, 154135 (2020).

Laidžių medžiagų panaudojimas mikrobangių įtaisų miniatiurizavimui

Usage of conductive materials for microwave components miniaturization

Darya Meisak[1,2], Artyom Plyushch[1,2], Dzmitry Bychanok[2], Rumiana Kotsilkova[3], Polina Kuzhir[4,2]
[1]Vilnius University, Physics Faculty, Sauletekio al. 9, LT-10222 Vilnius
[2]Research Institute for Nuclear Problems BSU, Bobruiskaya st. 11, 220030 Minsk
[3]OLEM, Institute of Mechanics Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev st. 4, 1113 Sofia
[4]Institute of Photonics, University of Eastern Finland, Yliopistokatu st. 7, FI-80101 Joensuu
dariameysak@gmail.com

In the present work simple robust design of microwave components (such as effective microwave absorbers and compact matched loads) based on 3D-printable lossy nanocarbon-based composites with filler content above the percolation threshold is considered.

Usually, microwave components are based on a long wedge or pyramid placed in the center of the waveguide [1], and pyramid top is oriented to the incident wave source. Mentioned periodic pyramidal structures are already well known and used as broadband absorbers for the anechoic chambers [2,3]. However, all researches of this topic are devoted to pyramidal structures produced from non-conductive materials (usually polymers). The development of pyramidal structures based on lossy materials opens new possibilities in the field of electromagnetic interference (EMI) shielding applications. In particular, it allows to miniaturize microwave components.

As lossy material the DC-conductive (σ_{DC}=0.39 S/m) 3D-printable filament based on poly(lactic) acid filled with 12 wt.% of multiwalled carbon nanotubes was used. The electromagnetic properties of 3D-printed pyramidal regular structures were experimentally investigated and numerically simulated in 12–18 GHz (Ku-band) and 26-37 GHz (Ka-band) frequency ranges.

For the simulations of pyramidal structure electromagnetic properties and for the determination of optimal geometrical parameters of pyramids a multi-layered approach [4] developed in optics was used. In frame of this model the structures under study were considered as graded refractive index material. Then, knowing the complex dielectric permittivity ε^* of the bulk material (in case of filament used ε^*=16.74-*i*6.17 at 30 GHz), after the homogenization procedure, it was possible to find the relative amplitudes of reflected S_{11} and transmitted S_{21} through pyramid signals. The shielding efficiency SE is defined [5] as $SE_T = -20\log_{10} S_{21}$. Similarly, the efficiency due to reflectance is $SE_R = -20\log_{10} S_{11}$. The optimal geometrical parameters of pyramids correspond to the minimum parameters that satisfy the conditions: SE_T>20 dB and SE_R>20 dB (this is equivalent to the absorption of more than 99% of the power of incident wave). In the particular case of the filament used, the substrate thickness of 2 mm is optimal for both frequency ranges, while pyramid's height has to be 8−9 mm and 22 mm for Ka- and Ku-bands, respectively.

Experimentally tested components with optimal pyramid parameters demonstrate remarkable shielding efficiency (>20dB) within whole Ku- and Ka-bands as shown in Figure 1. It is possible due to the combination of high Ohmic losses within the material bulk and waves scattering due to the sample's geometry.

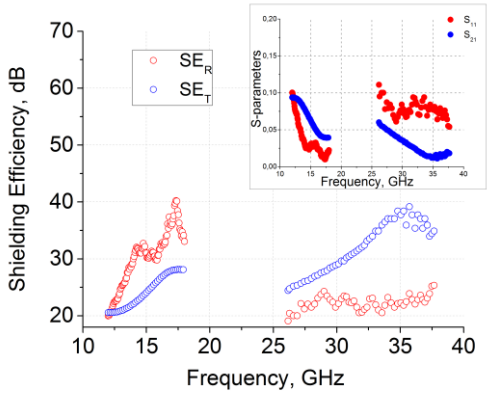


Fig. 1. Shielding efficiency and S-parameters (inset) of the 3D printed pyramidal samples in Ku- and Ka-bands

It means that these structures are suitable for practical application related to effective absorption of microwave radiation. The production of 3D-printable materials with controlled and predicted losses offers the possibility for miniaturization of 3D printed microwave components, such as absorbers and loads

Keywords: multiwalled carbon nanotubes, 3D printing, microwave absorbers, matched loads, shielding efficiency.

Literature

[1] D.M. Pozar, *Microwave Engineering* (4th ed. Wiley, 2012).
[2] B-K. Chung, H-T. Chuah, Prog. Electromagn. Res. **43**, 273-285 (2003).
[3] G.E. Hindman, A.C. Newell, AMTA Eur. Published online **2006**, 297-302 (2006).
[4] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light* (6th ed. Pergamon Press, 1980).
[5] E. Hund, *Microwave Communications: Components and Circuits* (McGraw-Hill, 1989).

$Ag_{0.92}Li_{0.08}NbO_3$ keramikos dielektrinė ir IR spektroskopija

DIELECTRIC INVESTIGATIONS AND PHONONIC MODE DYNAMICS OF AG0.92LI0.08NBO3 CERAMICS

Edita Palaimiene[1], Jan Macutkevic[1], Juras Banys[1], Irena Gruszka[2], Janusz Koperski[2], Antoni Kania[2]
[1] Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Institute of Physics, University of Silesia in Katowice, Ul. 75 Pułku Piechoty 1, PL-41-500, Chorz´ow, Poland

edita.palaimiene@ff.vu.lt

The substitution of Ag by Li ions in mixed $A1_{1-x}Li_xNbO_3$ (ALN) is commonly accepted method to improve ferroelectric and piezoelectric properties of materials, particularly huge piezoelectric properties of $Ag1_{1-x}Li_xNbO_3$ are observed close to the morphotropic boundary (MPB) (i. e. for x=0.065) [1]. The dielectric properties of ALN were investigated mainly at low frequencies (i. e. below 1 MHz) [2].

The aim of the work is to investigate phase transition dynamics and electrical properties of $Ag_{0.92}Li_{0.08}NbO_3$ (ALN8) ceramics via broadband (20 Hz – 750 THz) spectroscopy.

IR reflectivity spectra of ALN8 ceramics measured at different temperatures are presented in Fig. 1.

The dielectric spectra of ALN8 ceramics mainly are impacted by the electrical conductivity at higher temperatures (above 500 K) and low frequencies (below 1 MHz) and the contribution of the soft mode, which frequency is below 50 cm-1. The electrical conductivity has two anomalies close to antiferroelectric and ferroelectric phase transition temperatures, respectively. The most pronounced decrease of the activation energy is observed close to the ferroelectric phase transition temperature. The values of activation energies are typical for oxygen vacancies transport. All phononic modes are slightly temperature dependent confirm the influence of Ag and O ions dynamics on the phase transitions. However, the most important contribution to phase transition dynamics appears due to Nb ions.

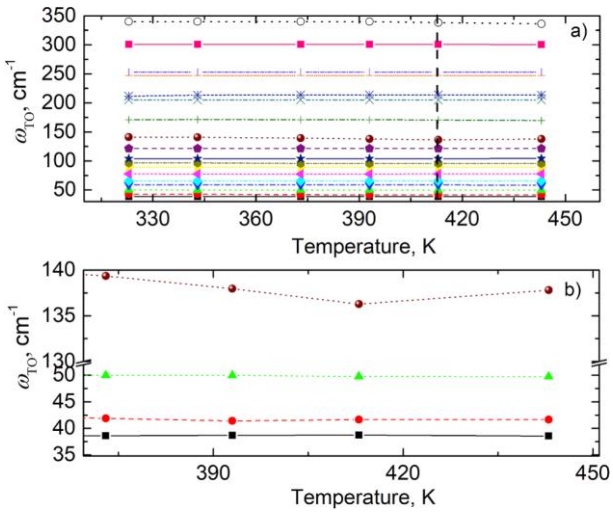


FIGURE 1. Temperature dependences of polar phonon frequencies of ALN8 ceramics.

Keywords: dielectric, activation energy, phononic modes.

References

[1] D. Fu, M. Endo, H. Tsniguchi, T. Taniyama, S. Koshihara, M. Itoh, Appl. Phys. Lett. 92, 172905 (2008).
[2] A. Kania, S. Miga, Materials Science and Engineering B 86, 128-133 (2001).

Elektromagnetinės savybės anglies gelių

ELECTROMAGNETIC PROPERTIES OF CARBON GELS

Edita Palaimiene[1], Jimena Castro-Gutiérrez[2], Sebastien Schaefer[2], Jan Macutkevic[1], Juras Banys[1], Vanessa Fierro[2], Polina Kuzhir [3,4], Alain Celzard[2]

[1] Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, LT-10257 Vilnius, Lithuania

[2]French National Centre for Scientific Research, Institute Jean Lamour, Université de Lorraine, F-88000 Epinal, France

[3]Institute of Photonics, University of Eastern Finland, Yliopistokatu 7, 80101 Joensuu, Finland; polina.kuzhir@gmail.com

[4]Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus

edita.palaimiene@ff.vu.lt

Carbon gels are produced by pyrolysis of thermoset polymer gels, which are themselves prepared by polycondensation of organic monomers diluted in a solvent. Once the crosslinking is achieved, the solvent can be removed by various processes, namely subcritical drying, supercritical drying or freeze-drying. These different routes lead to xerogels, aerogels and cryogels, respectively. Xerogels generally present the lowest porosity and the lowest surface areas, due to the action of capillary forces during solvent evaporation. This induces a significant shrinkage and hence a narrowing and even a collapse of the porosity. In contrast, aerogels are those in which the porosity is most preserved, precisely because of the absence of capillary forces during drying, leading to the highest pore volumes and the highest surface areas. Finally, cryogels have intermediate porosities and surface areas, because of the crystallisation of the solvent, which usually produces a porosity that is more preserved than that of xerogels but also coarser than that of aerogels. More information about synthesis, structure, properties and industrial applications can be found elsewhere [1].

The aim of present work is to investigate the electromagnetic properties of various carbon gels, produced with different bulk densities, were investigated in a wide frequency range (20 Hz–36 GHz). The values of dielectric permittivity and electrical conductivity at 129 Hz were found to be very high, i.e., more than 105 and close to 100 S/m, respectively. Both strongly decreased with frequency but remained high in the microwave frequency range (close to 10 and about 0.1 S/m, respectively, at 30 GHz). Moreover, the dielectric permittivity and the electrical conductivity strongly increased with the bulk density of the materials, according to power laws at low frequency. However, the maximum of microwave absorption was observed at lower densities. The DC conductivity (Fig. 1) slightly decreased on cooling, according to the Arrhenius law. The lower activation energies are typical of carbon gels presenting lower DC electrical conductivities, due to a higher number of defects. High and thermally stable electromagnetic properties of carbon gels, together with other unique properties of these materials, such as lightness and chemical inertness, open possibilities for producing new electromagnetic coatings.

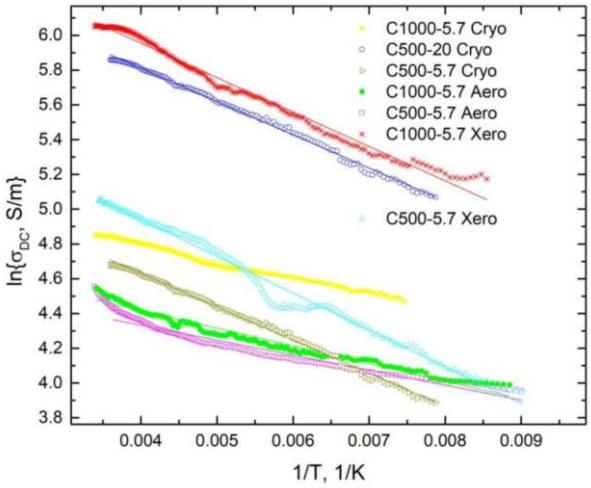


FIGURE 1. Temperature dependence of the DC conductivity of various carbon gels.

Keywords: dielectric, electromagnetic, carbon gels.

References

[1] Arenillas, A.; Rey-Raap, N.; Angel Menéndez, J. Carbon Gels and Their Applications: A Review of Patents.
In Submicron Porous Materials; Bettotti, P., Ed.; Springer: Cham, Switzerland, pp. 25–52 (2017).

Plačiajuostė $Ba_{0.17}Ca_{0.83}TiO_3$ keramikos dielektrinė spektroskopija

DIELECTRIC PROPERTIES OF OF BA0.17CA0.83TIO3 CERAMIC

Edita Palaimiene[1], Jan Macutkevic[1], Juras Banys[1], Antoni Winiarski[2], Irena Gruszka[2], Janusz Koperski[2], Andrzej Molak[2]
[1] Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]Institute of Physics, University of Silesia in Katowice, Ul. 75 Pułku Piechoty 1, PL-41-500, Chorz´ow, Poland
edita.palaimiene@ff.vu.lt

Perovskite barium titanate $BaTiO_3$ (BTO) possesses the high dielectric permittivity value, the large spontaneous polarization, good piezoelectric, and nonlinear optical properties at room temperature. It is ferroelectric at room temperature and it is paraelectric beyond the Curie temperature T_C close to 403 K [1]. $BaTiO_3$ ceramics doped with Ca (BCTO) exhibit improved piezoelectric properties in comparison with pure $BaTiO_3$. Moreover, the stabilization of BCTO is considered to result from the slight modification of Ba site with small Ca addition [2]. Barium calcium titanate is a very useful compound in the creation of electro-optical materials for holographic and photo-refractive applications [3] and show promising applications in advanced laser systems, optical interconnects and electronic or optical storage devices [4].

The aim of present work is to investigate the dielectric properties of barium calcium titanate ceramic, $Ba_{0.83}Ca_{0.17}TiO_3$. Dielectric properties of $Ba_{1-x}Ca_xTiO_3$ (x = 0.17) ceramics were studied in wide frequency range of 20 Hz - 53 GHz.

Figure 1 a and b shows the real part of dielectric permittivity temperature dependence, $\varepsilon'(T)$, obtained for BCT ceramics at ambient pressure conditions for different frequencies of electric field. The permittivity magnitude varies in 500–2500 range. The step-like anomaly (A label in Fig. 1a), occurs in ~200–250 K range, which presumably reflects the structural transition between the tetragonal and the orthorhombic phase. We also mention that at low temperatures, below ~220 K.

The $\varepsilon'(T)$ exhibits a diffused peak, which maximum at Tε'max, shifts in 334–337 K range with frequency. Fig. 1c and d shows the permittivity frequency dependence, $\varepsilon'(f)$, in FE and PE phase, respectively. The $\varepsilon'(f)$ spectra monotonically vary both below and above $T_{\varepsilon' max} \approx 337$ K. $T_{\varepsilon' max}$ can be attributed to the Curie temperature, T_C, of FE-PE phase transition. Hence, it occurred at temperature lowered by ~60 K, that is much different from those T_C~400 K reported in literature for BCT [5]. The permittivity peak position dependence on frequency allowed determining the shift of the FE-PE phase transition for frequency decade (Fig. 1b):

$$\Delta T_{\varepsilon' \max} / \Delta \log f = (337\,\mathrm{K} - 335\,\mathrm{K})/5 = 0.4\,\mathrm{K/frequency\,decade}.$$

Moreover, we would like to point that dispersion in $\varepsilon'(T)$ dependence was more pronounced below T_C. Within non-centrosymmetric phases domain wall motion might be responsible for this dispersion. One can notice that the thermal generation of electric charge current contributed to the impedance measured at low frequencies in high temperature range, T>400 K (Fig. 1c).

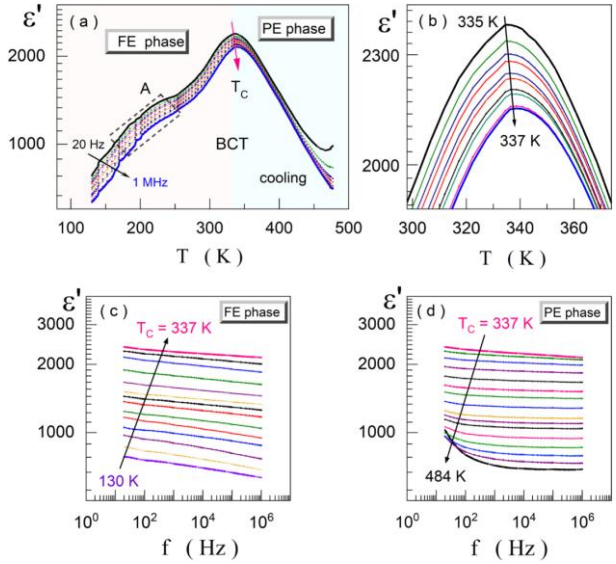


FIGURE 1. Real part of the dielectric permittivity dependences, $\varepsilon'(T,f)$, obtained on cooling for (Ba0.83Ca0.17)TiO3 ceramics at ambient air: (a) $\varepsilon'(T)$; (b) frequency shift of peak related to FE-PE phase transition; (c) $\varepsilon'(f)$ in low temperature ferroelectric phase; (d) $\varepsilon'(f)$, obtained in high temperature paraelectric phase. Chosen plots, with ΔT step from ~4–15 K, are shown for clarity of figures.

Keywords: dielectric, ceramic, Curie temperature.

References

[1] M.H. Khedhri, N. Abdelmoula, H. Khemakhem, R. Douali, F. Dubois, Structural, spectroscopic and dielectric properties of Ca-doped BaTiO3, Applied Physics A, 125:193, (2019).
[2] D. Fu, M. Itoh, S. Koshihara, Crystal growth and piezoelectricity of BaTiO3–CaTiO3 solid solution, Applied Physics Letters 93, 012904 (2008).
[3] F.V. Motta A.P.A. Marques, J.W.M. Espinosa, P.S. Pizani, E. Longo, J.A. Varela, Room temperature photoluminescence of BCT prepared by Complex Polymerization Method, Current Applied Physics 10, 16–20, (2010).
[4] H. Veenhuis, T. Börger, K. Peithmann, M. Flaspöhler, K. Buse, R. Pankrath, H. Hesse, E. Krätzig, Light-induced charge-transport properties of photorefractive barium-calcium-titanate crystals doped with rhodium, Applied Physics B 70, 797–801 (2000).
[5] E. Palaimiene, J. Macutkevic, J. Banys, A. Winiarski, I. Gruszka, J. Koperski, A. Molak, Crossover from ferroelectric to relaxor behavior in Ba1−xCaxTiO3 (x = 0.17) system, Materials 13, 2854 (2020).

PMDS kompozitų su Ag nanodalelėmis dielektrinė spektroskopija

DIELECTRIC PROPERTIES OF POLYDIMETHYLSILOXANE COMPOSITES FILLED WITH AG NANOPARTICLES OF DIFFERENT SIZES

Edita Palaimiene[1], Sebastien Schaefer[2], Jan Macutkevic[1], Juras Banys[1], Vanessa Fierro[2], Alain Celzard[2]
[1] Institute of Applied Electrodynamics and Telecommunications, Vilnius University, LT-10257 Vilnius, Lithuania
[2]French National Centre for Scientific Research, Institute Jean Lamour, Université de Lorraine, F-88000 Epinal, France
edita.palaimiene@ff.vu.lt

Polydimethylsiloxane (PDMS) is the most widely used silicon-based organic polymer. The multiple valuable features of PDMS, such as flexibility, thermal stability, and biocompatibility, make it an excellent matrix material for composites [1]. PDMS composites widely used as bioactive materials [2], elastic strain sensors, flexible sensors and electromagnetic coatings [3] flexible batteries, and electronics [4]. It has been shown that, by changing the size of the conductive fillers in the PDMS matrix from micro to nano, the concentration threshold necessary for the onset of conductivity is lowered [1]. To exploit the potential of application of Ag nanoparticles (AgNPs) in flexible electronics and biomaterials, it is important to develop flexible polymeric materials, particularly PDMS-based, loaded with AgNPs because of their relatively low cost, their narrow dispersion in the refraction index, their practically endless possibilities of structure modification and their good processability [5].

The aim of present work is to investigate the dielectric properties of polydimethylsiloxane nanocomposites filled with Ag nanoparticles (AgNPs) of different sizes. The measurements were carried out over a very broad range of frequencies (20 Hz- 40 GHz).

The concentration dependences of both dielectric permittivity and electrical conductivity for different sizes of AgNPs at 129 Hz (which is close to our low frequency limit) and room temperature are presented in Figure 1.

The values of electrical conductivity and dielectric permittivity were selected at 129 Hz frequency, since at lower frequencies the concentration dependence is more pronounced. For concentrations not higher than 15 vol%, the values of dielectric permittivity and electrical conductivity are rather low (about 10 and 1 nS/m, respectively) and are independent of the AgNPs size. An abrupt increase in dielectric permittivity and electrical conductivity occurs near a volume concentration of NPs of 20%, regardless of the particle size, indicating the onset of electrical percolation. The dielectric permittivity and the electrical conductivity are size dependent only close to the percolation threshold, while at lower concentrations it is almost size independent, similarly as in composites with onion-like inclusions. In contrast above the percolation threshold (for AgNPs concentration 30 vol%) electrical properties of composites are almost size-independent.

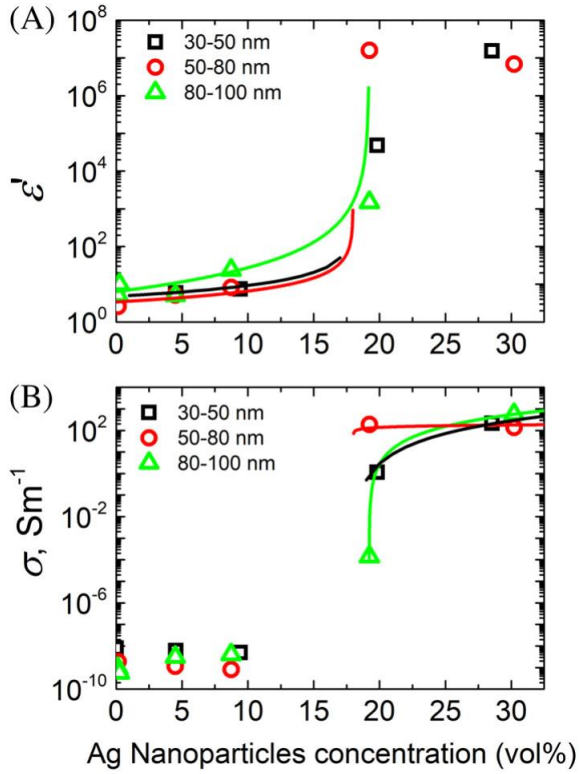


FIGURE 1. Dielectric permittivity, A, and electrical conductivity, B, of silver-loaded polydimethylsiloxane (Ag/PDMS) composites vs Ag concentration and for different particle sizes, at frequency 129 Hz and room temperature.

Keywords: dielectric, composites, percolation.

References

[1] X. Niu, S. Peng, L. Liu, W. Wen, P. Sheng, Adv. Mater.**19**, 2682 (2007).
[2] T. Kokubo, H. M. Kim, M. Kawashita, Biomaterials **24**, 2161 (2003).
[3] J. R. Huang, X. X. Yang, J. T. Liu, S. C. Her, J. Q. Guo, J. F. Gu, L. H. Guan, Nanotechnology **31**, 335504 (2020).
[4] I. You, M. Kong, U. Jeong, Acc. Chem. Res.**52**, 63 (2019).
[5] Y. Chen, Y. Araki, J. Doyle, A. Strevens, O. Ito, W. J. Blau, Chem. Mater **17**, 1661 (2005).

Ypač didelės molekulinės masės polietileno (UHMWPE) struktūrinių savybių tyrimas

Investigation of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene Structural Properties

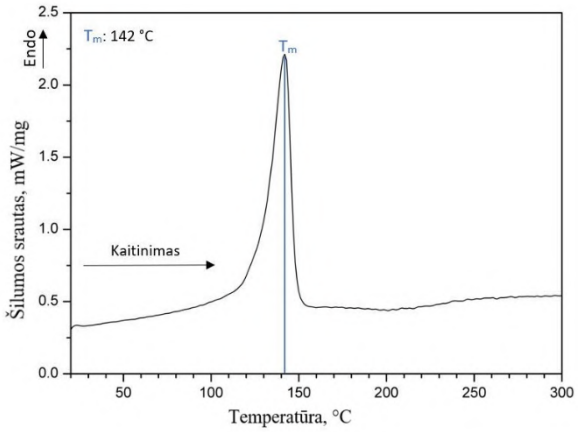
Laurynas Tumėnas[1,3], Skirmantas Norkus[2,4], Brigita Abakevičienė[3,5]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
[2]UAB „Ortho Baltic“, Taikos pr. 131A, LT-51124 Kaunas
[3]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[4]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
[5]Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51368 Kaunas
laurynas.tumenas@ff.stud.vu.lt

Implantas – tai medicininis įtaisas, chirurginiu būdu įterpiamas (implantuojamas) į žmogaus organizmą konkrečiai funkcijai atlikti. Implantų medžiagos turi būti biologiškai suderinamos. Biologinis suderinamumas apibūdinamas kaip medžiagos gebėjimas nesukelti stiprios neigiamos organizmo reakcijos. Medžiaga turi būti absoliučiai nekenksminga gyvam organizmui, neturi sukelti alerginių reakcijų, neturi keisti savo savybių laikui bėgant [1]. Remiantis ISO standarto 19227 „Implantai operacijoms – Ortopedinių implantų švara – Bendrieji reikalavimai“ vienas iš pagrindinių keliamų reikalavimų siekiant užtikrinti tinkamą chirurginių implantų osteointegraciją ir sumažinti visas galimas rizikas infekcijų atsiradimui yra plovimo/valymo procesas, tačiau valymo metodai neturi sąveikauti su medžiagomis ir pakenkti ar kitaip įtakoti jų savybių ir struktūros [2].

Viena tokių medžiagų, iš kurios yra gaminami ortopediniai implantai yra ypač didelės molekulinės masės polietilenas (UHMWPE). Ši medžiaga pasižymi biologiniu suderinamumu, geromis fizikinėmis, mechaninėmis savybėmis bei cheminiu atsparumu [3].

Tam, kad nustatytume polimero struktūrą po skirtingo temperatūrinio poveikio, svarbu įvertinti medžiagos chemines, termines ir fizikines savybes. Bandinių cheminiai ryšiai identifikuoti atliekant Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR), terminės medžiagos savybės charakterizuotos atliekant diferencinės skenuojamosios kalorimetrijos (DSC) tyrimu, medžiagos struktūra išanalizuota atliekant rentgeno spindulių difrakcinę analizę (XRD).

Išanalizavus UHMWPE medžiagą, apibendrinus DSC, XRD ir FTIR tyrimus, jų rezultatus bei palyginus juos su moksline literatūra, nepastebėta jokių žymių pakitimų po terminio plovimo. DSK tyrimo rezultatai pagrindžia XRD ir FTIR rezultatų patikimumą, kadangi DSK rezultatai parodė, kad UHMWPE polimero struktūros pokyčiai stebimi tik prie 142 ºC temperatūros. Todėl galime teigti, kad terminis bandinių poveikis tiek 60 ºC, tiek 100 ºC temperatūroje neturi įtakos medžiagos fizikinėms, cheminėms, struktūrinėms ir šiluminėms savybėms.



1 pav. UHMWPE bandinio DSC termograma

Reikšminiai žodžiai: implantas, biologinis suderinamumas.

Literatūra

[1] D. Mizeras, A. V. Valiulis, A. Šešok, ir J. Griškevičius, „IMPLANTŲ IR AUDINIŲ REGENERACIJOS KARKASŲ MEDŽIAGŲ ANALIZĖ“, 2015.

[2] „Implants for surgery - Cleanliness of orthopedic implants - General requirements (ISO 19227:2018)“, p. 24, 2018, [Interaktyvus]. Available at: https://view.elaba.lt/standartai/view?search_from=primo&id=1271843.

[3] N. A. Patil, J. Njuguna, ir B. Kandasubramanian, „UHMWPE for biomedical applications: Performance and functionalization“, *Eur. Polym. J.*, t. 125, nr. October 2019, 2020, doi: 10.1016/j.eurpolymj.2020.109529.

Titano oksido plonų sluoksnių, suformuotų naudojant atominio storio sluoksnio nusodinimo technologiją, kristalizacijos ir optinių savybių tyrimas

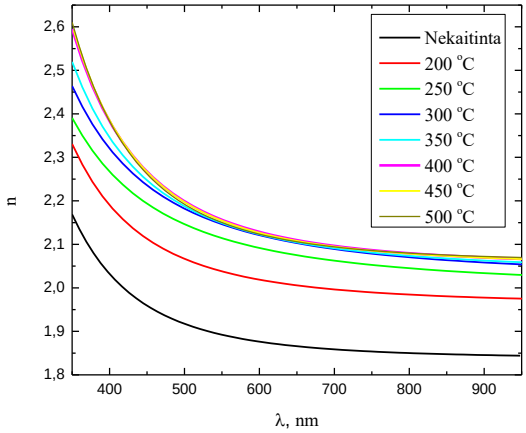
Crystallization behavior and optical properties of titanium oxide thin films deposited by atomic layer deposition

Darija Astrauskytė[1], Mantas Drazdys[1], Ramutis Drazdys[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Mikrooptinių komponentų laboratorija, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
darija.astrauskyte@ftmc.lt

Dielektriniai veidrodžiai, skaidrinančios dangos, poliarizatoriai ar įvairūs filtrai yra daugiasluoksnės plonų sluoksnių struktūros, susidedančios iš aukšto ir žemo lūžio rodiklio medžiagų plonų sluoksnių. Tokios dangos yra plačiai naudojamos lazeriuose ir lazerinėse sistemose [1]. Optinių dangų pažaidos lazerio spinduliuotei slenkstis priklauso nuo plonų sluoksnių medžiagos charakteristikų, dengimo technologinių parametrų, vidinės sluoksnių struktūros ir paviršiaus kokybės. Siekiant gauti aukštos optinės kokybės sluoksnius, turi būti minimizuoti sklaidos ir sugerties nuostoliai [2]. Tai galima pasiekti optimizuojant dengimo proceso technologinius parametrus. Viena iš plačiai naudojamų aukšto lūžio rodiklio medžiagų optinių dangų gamybai yra titano oksidas TiO_2 arba jo suboksidai Ti_2O_5 ir Ti_2O_7.

Šiame darbe titano oksido ploni sluoksniai buvo nusodinti naudojant atominio storio sluoksnio nusodinimo technologiją (ALD – angl. k. *atomic layer deposition*). Lyginant su įprastinėmis optinių dangų nusodinimo technologijomis ALD pasižymi griežta auginamo sluoksnio storio kontrole bei galimybe nusodinti dangą ant sudėtingos formos pagrindų. Titano oksido sintezei buvo naudojamas pirmtakas tetrakisdimetilaminotitanas, o oksidacijai naudojama deguonies plazma, vanduo arba ozonas. Ploni sluoksniai buvo nusodinti dvejose skirtingose temperatūrose – 65 °C ir 150 °C. Suformuotiems titano oksido monosluoksniams buvo nustatytos optinės charakteristikos – lūžio rodiklio ir absorbcijos koeficiento dispersijos, optiniai nuostoliai, paviršiaus šiurkštumas ir augimo greitis. Buvo ištirti morfologijos, sluoksnio storio ir optinių savybių pokyčiai atkaitinus bandinius skirtingose temperatūrose. Sluoksnių paviršiaus morfologijai ir šiurkštumui nustatyti buvo naudoti atominių jėgų mikroskopijos (AFM – angl. k. *atomic force microscopy*) matavimai. Augimo greičiai ir sluoksnių storiai buvo nustatyti naudojant optinio pralaidumo ir kvarcinio kristalo mikrosvarstyklių matavimus. Optinės savybės buvo įvertintos iš pralaidumo ir atspindžio spektrų.

Titano oksido monosluoksnių morfologija ir optinės savybės priklauso nuo proceso technologinių parametrų bei atkaitinimo temperatūros. Ploni sluoksniai, nusodinti naudojant oksidatoriumi ozoną ar vandenį, yra amorfiniai ir mažesnio tankio, žemesnio lūžio rodiklio. Didinant šių sluoksnių atkaitinimo temperatūrą, jie tankėja ir didėja lūžio rodiklis (1 pav.). Aukštesnėse temperatūrose, pradėjus formuotis mikrokristalitams pastebėti paviršiaus morfologijos ir šiurkštumo pokyčiai, išauga optiniai nuostoliai. Titano oksido lūžio rodiklio didėjimo aukštesnėse nusodinimo temperatūrose tendencija yra panaši į ankstesniuose tyrimuose paskelbtus rezultatus [3,4].



1 pav. Titano oksido lūžio rodiklio dispersijų priklausomybė nuo atkaitinimo temperatūros.

Reikšminiai žodžiai: optinės dangos, lūžio rodiklis, kristalizacija, optiniai nuostoliai.

Literatūra

[1] A. Piegari, F. Flory. Optical Thin Films and Coatings: From Materials to Applications, Second Edition. Woodhead Publishing, pp. 3-20 (2018).
[2] X. Bi, H. A. Lopez, P. Narasimha, et al., High rate deposition for the formation of high quality optical coatings, US patent (2014).
[3] S. Ratzsch, E. B. Kley, A. Tünnermann, A. Szeghalmi, Influence of the oxygen plasma parameters on the atomic layer deposition of titanium dioxide, Nanotechnology 26, 24003 (2014).
[4] A. Szeghalmi, M. Helgert, R. Brunner, F. Heyroth, U. Gösele, M. Knez, Atomic layer deposition of Al_2O_3 and TiO_2 multilayers for applications as bandpass filters and antireflection coatings, Applied Optics 48, 1727 (2009).

Žemo dažnio triukšmo ir krūvio pernašos mechanizmų kompozituose su anglies nano dalelėmis tyrimas

Investigation of charge carrier transport mechanisms in nano carbon composites via low frequency noise measurements

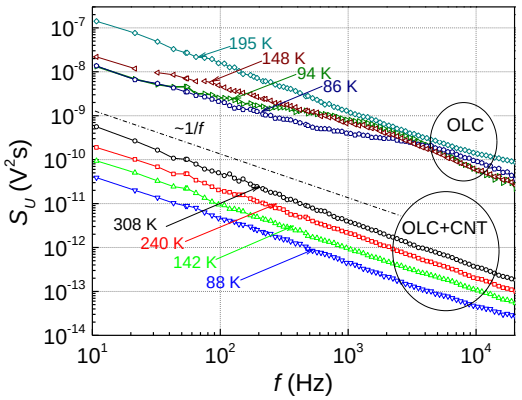
Marina Tretjak, Sandra Pralgauskaitė, Jan Macutkevič, Jonas Matukas, Jūras Banys
Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3. LT-10257 Vilnius
marina.tretjak@ff.vu.lt

Kompozicinės medžiagos su anglies nano dalelėmis plačiai panaudojamos įvairiuose šiuolaikiniuose elektronikos ir bioelektronikos prietaisuose. Tokių kompozitų (metalinį laidumą turinčios anglies dalelės dielektrinėje matricoje) fizikinės savybės stipriai priklauso nuo laidžių dalelių ypatybių: matmenų, paviršiaus savybių, jų tankio ir pasiskirstymo matricoje bei kt. Todėl, keičiant nano dalelių rūšį, jų parametrus, galima pagaminti pageidaujamas charakteristikas turinčias medžiagas. Kompozicinė medžiaga yra netvarki struktūra. Kuriant vis naujas medžiagas yra svarbu ištirti elektrinio krūvio pernašos mechanizmus jose, nes šios charakteristikos yra svarbios daugeliui tokių medžiagų taikymo sričių.

Įvairiems fizikiniams procesams, vykstantiems medžiagose ir jų dariniuose, labai jautrios yra žemo dažnio triukšmo charakteristikos. Triukšmo charakteristikų analizė leidžia atskleisti krūvininkų transporto ir laidumo mechanizmus, jų ypatybes. Šio tyrimo tikslas buvo ištirti ir palyginti kompozitinių medžiagų su skirtingo tipo ir matmenų anglies nano dalelėmis bei skirtingu šių dalelių tankiu žemo dažnio triukšmo ir varžos charakteristikas.

Ištirtos kompozitinės medžiagos, besiskiriančios dielektrine matrica (bisfenolio A derva, poliuretanas, epoThin™ 2 epoksidinė derva) ir anglies dalelėmis (vienasieniai ir daugiasieniai nano vamzdeliai, svogūno pavidalo anglies dalelės, anglies pluošto veltinis ir kt.); taip pat anglies dalelių dydžiu, bei jų tankiu; kompozitai su kelių rūšių anglies dalelėmis. Išmatuotos žemo dažnio (10 Hz - 20 kHz) elektrinio triukšmo charakteristikos bei varžos charakteristikos temperatūros srityje nuo 75 K iki 380 K. Triukšmo matavimai atlikti specialioje ekranuotoje laboratorijoje, siekiant išvengti pašalinių elektromagnetinių signalų. Įtampos fliuktuacijų spektrinis tankis gaunamas atliekant sparčiąją Furje transformaciją, o spektrinio tankio absoliutinė vertė apskaičiuojama palyginant su žinomos varžos šiluminiu (Naikvisto) triukšmu.

Atlikta žemo dažnio elektrinių fliuktuacijų ir varžos charakteristikų analizė parodė, kad tirtuose kompozituose su anglies nano dalelėmis vyrauja šie krūvio pernašos mechanizmai: Mott'o šuoliai vienos dalelės ar jų sankaupos viduje ir tuneliavimas tarp dalelių per dielektrinę matricą. Šie procesai lemia $1/f^{\alpha}$ tipo triukšmo spektrą (1 pav.). Taip pat stebėti Lorenco tipo spektrai (1 pav.), būdingi generaciniams ir rekombinaciniams procesams per krūvininkų pagavimo centrus, bei kai kuriems bandiniams tam tikromis



1 pav. Kompozitų su anglies nano dalelėmis įtampos fliuktuacijų spektrinio tankio priklausomybės nuo dažnio: OLC – kompozitas su 7 wt.% 100 nm dydžio svogūno pavidalo anglies dalelių užpildu (9 V), OLC+CNT – kompozitas su 7 wt.% 100 nm dydžio svogūno pavidalo anglies dalelių ir 1 wt.% 20 nm diametro ir (5-10) μm ilgio anglies nano vamzdelių užpildu (600 mV).

veikimo sąlygomis būdingas impulsinis triukšmas. Šių pagavimo centrų būdingosios relaksacijos trukmės skirtingiems bandiniams kinta nuo kelių iki kelių dešimčių milisekundžių. Impulsinis triukšmas stebimas kai kurių bandinių triukšmo charakteristikose vykstant vyraujančio krūvio pernašos mechanizmo pasikeitimui. Tirtų kompozitų su anglies nano dalelėmis elektrinio triukšmo varžos charakteristikos priklauso nuo laidžių dalelių tipo, dydžio, jų paviršiaus charakteristikų ir dalelių tankio bei pasiskirstymo kompozite. Dviejų rūšių anglies dalelės (daugiasieniai anglies nano vamzdeliai ir svogūno pavidalo anglies dalelės) vienoje medžiagoje sukuria sinergijos efektą.

Reikšminiai žodžiai: anglies nano dalelės, elektrinis triukšmas, fliuktuacijos, kompozitas.

Poliškumo Inversija GaN Sluoksniuose panaudojant ALD-Al_2O_3 Tarpinį Sluoksnį

Growth and Investigation of Polarity Inversed GaN Layers on ALD-Al_2O_3

Marek Kolenda[1], Arūnas Kadys[1], Tadas Malinauskas[1], Edvinas Radiunas[1], Riina Ritasalo[2], Tomas Grinys[1], Martynas Skapas[3], Sandra Stanionytė[3], Roland Tomašiūnas[1]
[1]Fotonikos ir Nanotechnologijų Institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva
[2]Picosun Oy, Tietotie 3, 02150 Espoo, Finland
[3]Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva
marek.kolenda@ff.vu.lt

Gallium nitride (GaN) as a direct bandgap semiconductor with a large transparency window and with a high second-order nonlinearity (10 pm/V [1]) serves as an interesting candidate for nonlinear optics. Moreover, GaN has a non-centrosymmetric configuration along the growth (*c*) direction. Due to this property, there is a non-compensated spontaneous polarization along the *c* direction and can be referred to as polarity of the layer [2]. +*c* direction GaN is called Ga-face GaN and -*c* direction – N-face GaN. Fabricated as a waveguide, microring, or microdisc it provides high potential for frequency conversion applications [1,3]. However, efficient frequency conversion requires a phase-matching condition to compensate for material dispersion. Phase matching can be achieved by exploiting the birefringence exhibited in anisotropic crystals or artificial structures. A modal-dispersion phase matching (MDPM) has been achieved in a Ga-face GaN waveguide structure [1]. However, modeling results showed that conversion efficiency increases when fabricated GaN waveguide structures consist of two GaN faces.

In this work, growth parameter optimization of the N-face GaN on 2° offcut sapphire substrates and on ALD-Al_2O_3 layers, deposited on III-face GaN/AlGaN/AlN (waveguiding structure) in a PICOSUN® R-200 Advanced deposition tool (Picosun Oy, Finland), was performed using Aixtron Close-Coupled-Showerhead 3x2 MOCVD reactor. Figure 1 represents a schematic example of the grown samples. Before the N-face GaN growth nitridation process was followed. Main difference in these two cases was nitridation time and temperature. In the case of sapphire substrates, nitridation duration was about 7 minutes at 970°C. ALD-Al_2O_3 layers were nitrided much longer and at higher temperatures, for 40 minutes to 1 hour at 1100°C, respectively. This process for ALD-Al_2O_3 was required to impart crystallinity to the amorphous ALD-Al_2O_3 areas. Then N-face GaN growth was followed with first growing a GaN nucleation layer, then high-temperature annealing and high-temperature GaN growth processes. The polarity of GaN was determined by etching with KOH solution. The surface quality of each grown layer was controlled by AFM, the crystallinity of the layers was investigated with TEM and XRD. The most important result was made about ALD-Al_2O_3 interlayer which does not evaporate during nitridation and annealing processes at the beginning of the growth process. This was confirmed by the TEM and EDX. The thinner the nucleation GaN layer the smoother the surface of the resulting GaN layer. This was confirmed by AFM in two cases. After etching the samples in the KOH solution N-face GaN on the ALD-Al_2O_3 layers was confirmed in the samples with the thicker nucleation layers, while every GaN layer on the sapphire substrates exhibited N-polarity.

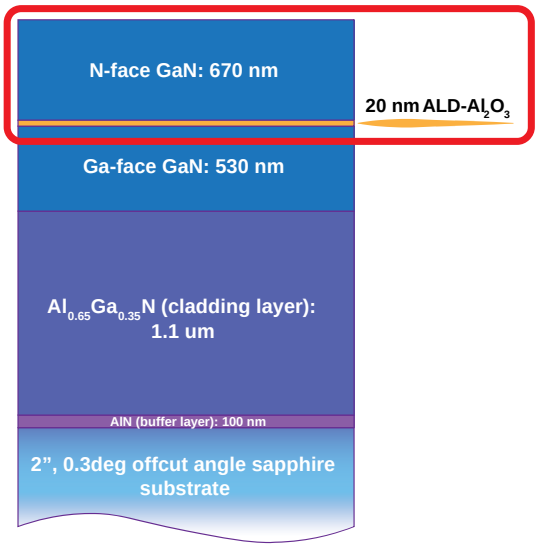


Figure 1. Schematics of N-face GaN grown on ALD-Al_2O_3 to form a waveguiding structure with polarity invesrion.

This research was funded by the European Regional Development Fund according to the supported activity ''Research Projects Implemented by Worldclass Researcher Groups'' under Measure No. 01.2.2-LMT-K-718 (Project code 01.2.2-LMT-K-718-01-0018).

Keywords: MOVPE, GaN, N-face, polarity, oxide.
Reikšminiai žodžiai: MOVPE, GaN, N-polinis GaN, oksidai.

Literature

[1] M. Gromovyi, et al. Opt. Exp. 25, 19 (2017)
[2] E. T. Yu, et al. . Vac. Sci. Technol. B 17(4) (1999)
[3] I. Roland et al. Sci. Rep. 6, 34191 (2016)

Plonų laidžių plėvelių elektromagnetinės savybės mikrobangų ir teraherciniame dažnių diapazonuose

Characterization of electromagnetic properties of thin resistive films in microwave and terahertz ranges

Yaraslau Padrez[1,2], Nikalai Liubetski[1], Aliaksandr Arlouski[1], Uladzislau Kushniarou[1], Dzmitry Bychanok[1]
[1]Institute for Nuclear Problems Belarusian State University, Bobruiskaya str., 11, 220006, Minsk, Belarus
[2]Center for physical sciences and technology, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania
yaraslau.padrez@ftmc.lt

Thin resistive films are widely used as a base for metamaterial absorbers [1]. In our previous studies such multilayered absorber, designed on the basis of commercially available resistive toning films, was shown to exhibit good absorbing ability in the radio wave range [2]. Obtained structures absorb more than 90% of electromagnetic energy in 8-78 GHz frequency range. Nevertheless, intrinsic absorbing properties of thin toning films are thoroughly investigated in visible range, while there absorbing properties in microwave-terahertz range are still obscure. In the present study commercially available toning films with different transparencies in visible region were experimentally investigated in microwave (12-18 GHz) and terahertz (0.2-1.0 THz) frequency ranges.

Two series of car toning films (Solartek, Russian Federation) were investigated. The first series of samples comprise toning films "Black plus" (BL) with transparencies 5-45%. These films are layered structures, in which the light reflection occurs on a metallized layer. The second series consists of the structures "STR CHSRPS" (CH) with transparencies 5-50%, in which light reflectance is due to the presence of a carbon layer. Measurements in 0.2-1.0 THz and 12-18 GHz ranges were performed via time-domain terahertz spectrometer T-Spec (EKSPLA, Lithuania) and via vector network analyzer Micran R4M-18 (Micran, Russian Federation), respectively.

Samples of both series with similar optical properties demonstrate significant difference in their electromagnetic response in microwave and terahertz ranges. The metal-based films of BL series are almost transparent for microwave and terahertz radiation. On the contrary, the carbon-based films of CH series demonstrate significant reflectance ability depending on their optical transparency. All studied samples have almost non-dispersive reflection/transmission spectra in the considered frequency ranges (Fig. 1).

We found that the S_{12}-parameter changes for more than 2 dB when moving from microwave to terahertz range only for the CH sample with 5%-transparency. Samples of CH series also show good correlation between optical transparency and reflection/transmission spectra in microwave and terahertz ranges. The more is the transparency in the optical region, the larger is the S_{21} parameter in microwave and terahertz range.

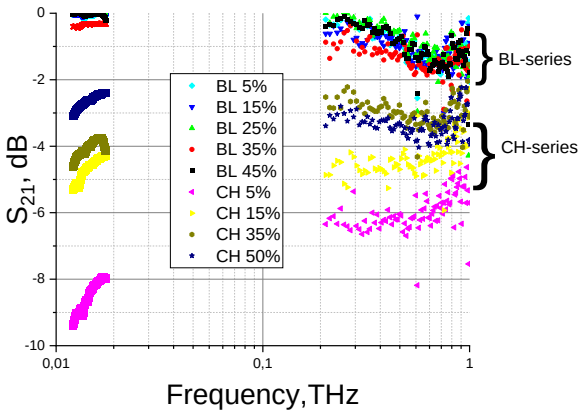


Fig. 1. Broadband S_{21} spectra of studied samples.

Thus, the investigated materials demonstrate significant potential for practical use in Salisbury screen or Jaumann absorbers design for radars [3], solar radiation absorption [4], microwave absorption [5], etc.

Keywords: resistive toning films, microwave and terahertz ranges, absorbing structures.

Literature

[1] H. Sheokand *et al.*, 'Transparent broadband metamaterial absorber based on resistive films', *J. Appl. Phys.*, vol. 122, no. 10, p. 105105, Sep. 2017, doi: 10.1063/1.5001511.

[2] N. Liubetski, H. Volunets, Y. Padrez, and D. Bychanok, 'Creation of Radar-Absorbing Structures Based on Carbon Films', in *2020 IEEE Ukrainian Microwave Week (UkrMW)*, Sep. 2020, pp. 535–537. doi: 10.1109/UkrMW49653.2020.9252716.

[3] A. Kazem Zadeh and A. Karlsson, 'Capacitive Circuit Method for Fast and Efficient Design of Wideband Radar Absorbers', *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol. 57, no. 8, pp. 2307–2314, Aug. 2009, doi: 10.1109/TAP.2009.2024490.

[4] X. Fang, C. Y. Zhao, and H. Bao, 'Design and analysis of Salisbury screens and Jaumann absorbers for solar radiation absorption', *Front. Energy*, vol. 12, no. 1, pp. 158–168, Mar. 2018, doi: 10.1007/s11708-018-0542-6.

[5] Z. Zhou, K. Chen, B. Zhu, J. Zhao, Y. Feng, and Y. Li, 'Ultra-Wideband Microwave Absorption by Design and Optimization of Metasurface Salisbury Screen', *IEEE Access*, vol. 6, pp. 26843–26853, 2018, doi: 10.1109/ACCESS.2018.2835815.

Plonų dielektrinių sluoksnių, formuojamų atominio storio sluoksnio nusodinimo metodu, augimo greičio dinamikos tyrimas

Investigation of growth rate dynamics of dielectric thin films deposited by atomic layer deposition

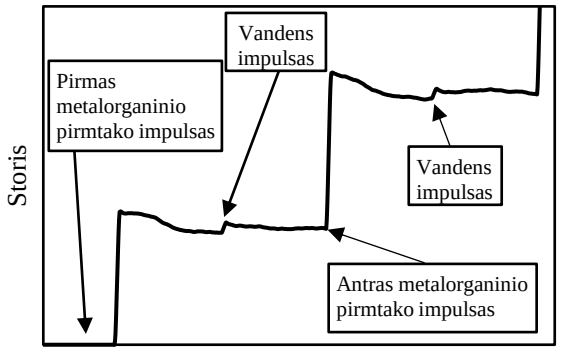
Mantas Drazdys[1], Darija Astrauskytė[1], Ramutis Drazdys[1]
[1]Mikrooptinių komponentų laboratorija, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
mantas.drazdys@ftmc.lt

Fizinio garų nusodinimo technologijos buvo ir yra vienas pagrindinių įrankių, labai reikalingų optinių komponentų, naudojamų lazeriuose ir lazerinėse technologijose gamybai. Tačiau tobulėjant lazerinėms technologijoms atsiranda poreikis tokių komponentų, kurių gamyba fizinio garų nusodinimo metodais, dėl technologinių suvaržymų, neužtikrina reikalaujamų dangos charakteristikų viso dengiamo komponento paviršiuje. Tai dažniausiai yra sudėtingos formos pagrindai, tokie kaip fotoniniai kristalai, lęšiai, mikrooptiniai komponentai ir kt.

Viena iš alternatyvių technologijų, leidžiančių nusodinti tolygias dangas ant sudėtingos formos pagrindų, yra atominio storio sluoksnio nusodinimo (ALD – angl. k. *atomic layer deposition*) technologija. ALD yra cheminio garų nusodinimo technologijos atšaka, kurios veikimo principas yra pagrįstas nuosekliomis pirmtakų reakcijomis su dengiamais paviršiais, suformuojant atominio storio sluoksnius, kas leidžia labai tiksliai kontroliuoti nusodinamo sluoksnio storį. Kadangi ALD yra cheminis nusodinimo metodas, nusodintų sluoksnių kokybę ir savybes nulemia pirmtakų ir paviršių reakcijos [1].

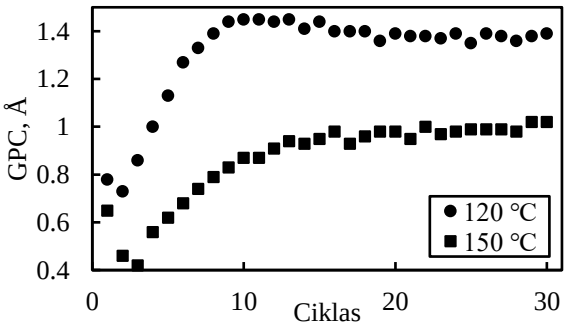
Nusodinant ultra–plonas dangas pradinis sluoksnio augimo greitis yra esminis faktorius, nulemiantis optinės dangos charakteristikas. Pastebėta, kad sluoksnio augimo greitis gali kisti priklausomai nuo paviršiaus, ant kurio yra nusodinamas sluoksnis, savybių. Šis kitimas dažniausiai stebimas pirmus 10 – 30 ciklų [2]. Toks sluoksnio augimo greičio kitimas neturi įtakos, kai nusodinami sąlyginai stori, 100 nm ir daugiau, sluoksniai. Tačiau nusodinant ultra–plonus 1 – 20 nm sluoksnius sluoksnio augimo greičio kitimas daro stiprią įtaką galutinio sluoksnio storio tikslumui.

Šiame darbe naudojant terminį ALD procesą ir in-situ kvarcinio kristalo mikrosvarstyklių (QCM – angl. k. *quartz crystal microbalance*) monitoringą buvo tirtas sluoksnių augimo greičio (GPC – angl. k. *growth per cycle*) kitimas nusodinant HfO_2, TiO_2, Ta_2O_5 ir Al_2O_3 ant skirtingų medžiagų paviršių. Šio tyrimo metu ploni sluoksniai buvo nusodinami 120°C ir 150°C temperatūrose naudojant metalorganinius pirmtakus ir dejonizuotą vandenį. Kiekvienas ALD ciklas susidėjo iš keturių žingsnių: metalorganinio pirmtako impulso, reaktoriaus prasiurbimo, vandens impulso ir reaktoriaus prasiurbimo (1 pav.).



1 pav. QCM monitoringo parodymai dviejų ALD ciklų metu.

Tyrimų metu pastebėta, jog kai kuriais atvejais pradinis sluoksnio augimo greitis gali būti daugiau nei dvigubai mažesnis lyginant su stabiliu augimo greičiu (2 pav.) Kita vertus, nusodinant Ta_2O_5 sluoksnį ant Al_2O_3 stebimas stabilus augimas nuo nusodinimo proceso pradžios. Daugeliu atvejų tiesinis sluoksnių augimas prasideda po 15 – 20 ciklų.



2 pav. HfO_2 augimas ant SiO_2.

Reikšminiai žodžiai: dielektriniai sluoksniai, atominio storio sluoksnio nusodinimas, sluoksnių augimo dinamika.

Literatūra

[1] Tiznado et al., Rev. Mex. Fis. **58**, 459-465 (2012).
[2] C. W. Wiegand et al., Chem. Mater. **30**, 1971-1979 (2018).

Titano koncentracijos įtaka deimanto tipo anglies dangų struktūrai ir savybėms

Influence of the titanium concentration on the structure and properties of diamond-like carbon films

Hassan Zhairabany[1], Vilius Dovydaitis[1], Liutauras Marcinauskas[1], Enrico Gnecco[2]
[1]Department of Physics, Kaunas University of Technology, Studentų str. 50, LT- 51368 Kaunas, Lithuania
[2]Otto Schott Institute of Materials Research, Friedrich Schiller University, Löbdergraben 32, D-07743, Jena, Germany
hassan.zhairabany@ktu.edu

Newly, various metals such as (Ti, Cr, Zr, Ni, Au, Ag) as well the non-metals elements (Si, O, N, F) were excessively used as doped materials in the diamond-like carbon (DLC) films. Each dopant has its role in modifying the film structure and as consequence enhancing a desirable property for different DLC film types and in several application domains [1-3]. The doping process of DLC films with titanium has repetitively demonstrated its enhancing role of the tribological and mechanical characteristics, like reducing the compressive stress, friction coefficient and enhancing the corrosion and wear resistance as well improving the hardness [1,4].

Titanium doped amorphous DLC films were deposited on Si (100) substrates by magnetron sputtering at fixed target-substrate distance (3 cm). The graphite and Ti targets were used. The Ti cathode current was changed from 0.25 A to 1.00 A and the deposition duration was 600 s. The surface morphology, adhesion and friction forces, elemental composition, optical transmittance and structure of the sputtered Ti-doped DLC films were investigated by atomic force microscopy (AFM), energy dispersive X-ray spectroscopy, UV–VIS–NIR spectrophotometer and Raman spectroscopy. Using both a sharp and ball on the tip cantilevers, the AFM images provides the lateral deflection signals then after the calibration of these data, the fiction coefficient were determined.

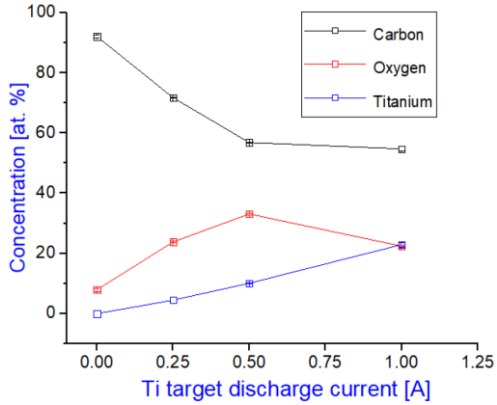


Figure 1:The elemental concentration of films versus the Ti discharge current.

It was obtained that the Ti concentration was increased with the increasing of the Ti cathode current, meanwhile the Raman data indicated that the sp^2 carbon sites fraction increased, and the graphitization was induced. The surface roughness slightly increased from ~0.9 nm to 1.7 nm with the increase of Ti content from 4.5 at. % to 22.9 at. %. The results indicated that the surfaces of the doped DLC films have a self-affine shape. The adhesion force between the polymer ball on the top of the cantilever and the thin film decreased from ~14 nN to ~6 nN and the transmittance values were sharply reduced at 22.9 at. % of Ti from ~0.1 % to ~8.5% in the range of 365 nm to 890 nm wavelength. The friction coefficient with the sharp cantilever was the lowest (~0.175), when Ti content in DLC was ~4.5 at. %. While the lowest lateral deflection signal was recorded for the doped DLC film with the highest Ti concentration.

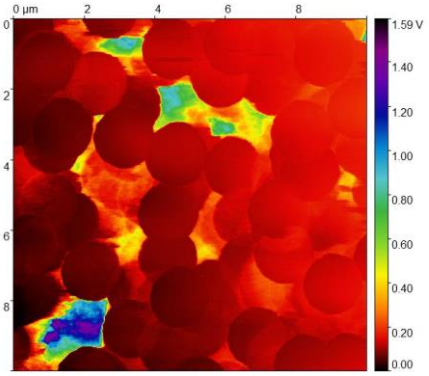


Figure 2: The lateral force images using AFM of the film.

Keywords: diamond-like carbon films, titanium, atomic force microscopy, surface morphology, friction force.

Literature

[1] J. Vetter, Surface and Coatings Technology, Vol. 257, 2014, p. 213-240.
[2] U. Jansson, E. Lewin, Thin Solid Films, Vol. 536, 2013, p 1-24.
[3] C.A. Love, R.B. Cook, T.J. Harvey, P.A. Dearnley, R.J.K. Wood, Tribology International, Vol. 63, 2013, p. 141-150.
[4] J. Cui, L. Qiang, B. Zhang, X. Ling, T. Yang, J. Zhang, Applied Surface Science, Vol. 258, Issue 12, 2012, p. 5025-5030.

Plonų TiO_2 sluoksnių paviršiaus modifikavimas Au ir Ag nanodalelėmis

Surface modification of thin TiO_2 films by Au and Ag nanoparticles

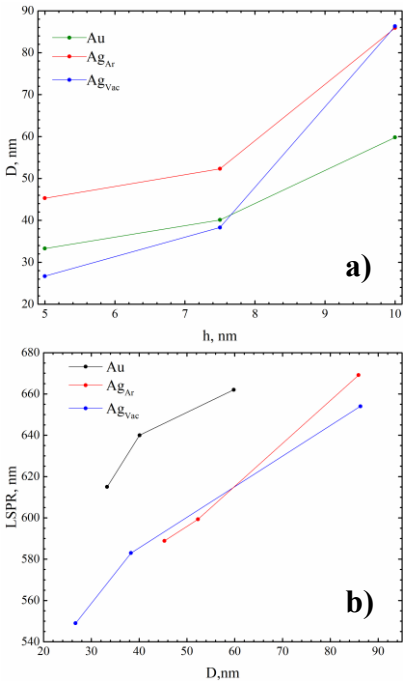
Mantas Sriubas[1], Vytautas Kavaliūnas[1], Kristina Bočkutė[1], Paulius Palevičius[2], Marius Kaminskas[1], Žilvinas Rinkevičius[1,4], Minvydas Ragulskis[2], Hidenori Mimura[3], Giedrius Laukaitis[1]

[1]Kauno technologijos universitetas, Fizikos katedra, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas, Lietuva
[2]Kauno technologijos universitetas, Matematinio modeliavimo katedra, Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas, Lietuva
[3]Šizuokos universitetas, Elektronikos tyrimų institutas, 3-5-1, Hamamatsu, Shizuoka 432-8011, Japonija
[4]Karališkasis technologijos institutas, Chemijos, biotechnologijos ir sveikatos inžinerijos mokslų mokykla, Teorinės chemijos ir biologijos katedra, 109 61 Stokholmas, Švedija

TiO_2 pagrindu suformuotų heterostruktūrų panaudojimas, t.y. TiO_2 dekoravimas metalinėmis nanostruktūromis (NS), gali prailginti elektronų skylių porų gyvenimą ir pagreitinti redukcijos reakcijas arba leisti panaudoti lokalizuotą paviršinių plazmonų rezonansą (LSPR) puslaidininkinėje fotokatalizėje [1]. Šis reiškinys labai priklauso nuo nanostruktūrų geometrijos, medžiagos ir optinių padėklo ir supančios aplinkos savybių [2]. LSPR vyksta matomos šviesos srityje naudojant daugumą metalų ir metalų lydinių. Auksas ir sidabras yra dažniausiai naudojamos medžiagos, siekiant gauti paviršinio plazmonų rezonanso reiškinį. Rezonansinį dažnį galima keisti ne tik keičiant medžiagą, bet ir keičiant atstumus tarp nanodalelių, jų dydį, formą ir pasiskirstymą. Rezonansinis dažnis pereina į trumpesnius bangos ilgius, padidinus atstumą tarp nanostruktūrų, o, padidinus nanostruktūrų skersmenį, slenkasi į ilgesnius bangos ilgius. Tas pats efektas atsiranda, kai sferinių nanostruktūrų forma yra keičiama, pvz. į penkiakampę arba trikampę formas. Elektronų pluošto litografija, nano atspaudų litografija ir cheminė sintezė yra plačiai naudojamos technologijos metalinėms nanostruktūroms formuoti. Tačiau, šie metodai yra brangūs ir reikalaujantys daug laiko. Kitą vertus, plonų metalinių sluoksnių atkaitinimo metodas yra pigus ir paprastas, leidžiantis pagaminti norimų parametrų nanostruktūras. Atkaitinant plonus metalinius sluoksnius žemesnėje nei lydymosi temperatūroje, jie suyra iki sferinės formos nanostruktūrų [3].

Šio tyrimo tikslas ištirti Au ir Ag nanostruktūrų formavimo parametrų ir LSPR priklausomybę. Tuo tikslu buvo suformuoti ploni TiO_2 sluoksniai ant SiO_2 ir kvarcinio stiklo padėklų, vėliau juos padengiant 5nm – 10 nm storio Au ir Ag sluoksniais, panaudojant megnetroninio nusodinimo metodą. Suformuotos plonasluoksnės sistemos buvo atkaitinamos Ar dujų ar vakuumo aplinkoje, 400°C - 800°C temperatūrų intervale. Gautos nanostruktūros buvo analizuotos SEM ir ImageJ. Nustatyta (1 pav.):

- atkaitinant storesnius sluoksnius, padidėja vidutinis nanostruktūrų skersmuo [4].
- vidutinis nanostruktūrų skersmuo priklauso nuo aplinkos savybių: Ag nanostruktūrų skersmenys mažesni, jei atkaitinama vakuume.
- LSPR slenkasi į ilgesnių bangos ilgių ruožą, didėjant nanostruktūrų skersmeniui.



1 pav. a) Vidutinio nanostruktūrų skersmens priklausomybė nuo Au ir Ag plonų plėvelių storio ir b) LSPR priklausomybė nuo vidutinio Au ir Ag nanostruktūrų skersmens.

Reikšminiai žodžiai: nanostruktūros, lokalizuotas paviršinis plazmonų rezonansas, ploni sluoksniai.

Literatūra

[1] S.N. Ahmed, W. Haider, Nanotechnology. 29 (2018). doi:10.1088/1361-6528/aac6ea.
[2] E. Petryayeva, U. J. Krull, Anal. Chim. Acta, 2011: pp. 8-24. doi:10.1016/j.aca.2011.08.020.
[3] M. Altomare, N.T. Nguyen, P. Schmuki, Chem. Sci. 7 (2016) 6865–6886. doi:10.1039/C6SC02555B.
[4] M. Sriubas, V. Kavaliūnas, etc., Surf. Interfaces. 25 (2021) 101239. doi:10.1016/J.SURFIN.2021.101239.

Padėka

Atlikti tyrimai buvo finansuoti iš Europos socialinio fondo (projektas Nr. 09.3.3-LMT-K-712-01-0162) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Katijonų pakaitos $MFe(Mn)O_3$ (M=Bi,Gd,Y,La) feroikuose įtaka Mesbauerio spektrams ir magnetinėms savybėms

Influence of cation substitution on Mossbauer spectra and magnetic properties of multiferroic $MFe(Mn)O_3$, M=Bi,Gd,Y,La

Kęstutis Mažeika[1], Dovydas Karoblis[2], Ramūnas Diliautas[2], Aldona Beganskienė[2], Aivaras Kareiva[2], Dalis Baltrūnas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių prl. 231, 02300 Vilnius,
[2] Chemijos institutas, Vilniaus universitetas, Naugarduko 24, 03225 Vilnius
kestutis.mazeika@ftmc.lt

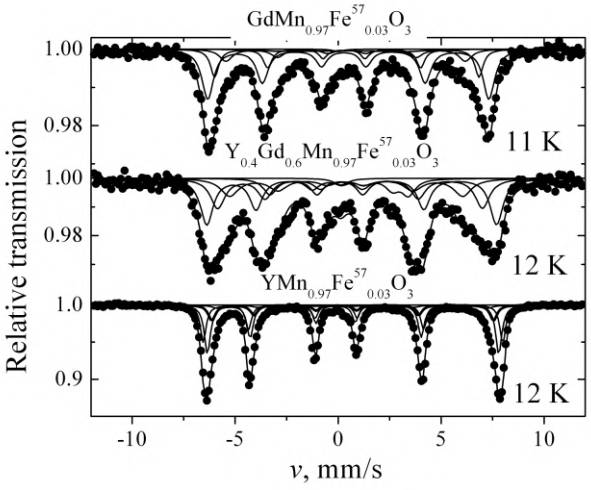
Perovskitiniai manganitai ir feritai $MFe(Mn)O_3$ yra įdomūs dėl savo multiferoinių savybių. Pažymėtina, kad $BiMnO_3$ ir $BiFeO_3$ yra vieni iš geriausiai žinomų tokių medžiagų. Juose skirtingų pogardelių katijonai atsakingi už magnetines arba feroelektrines savybes - Fe ir Mn pasižymi magnetine tvarka, o feroelektrinės savybės yra dėl Bi jonų poslinkio. Tačiau sąlygojantys magnetines savybes Mn-Mn, Mn-Fe, Fe-Fe pamaininių sąveikų tipai ir stiprumas skiriasi, todėl manganitai ir feritai turi skirtingą magnetinę tvarką ir magnetinio virsmo temperatūrą, galinčią priklausyti ir nuo kristalinės struktūros ir M katijonų savybių [1-5]. Šiame darbe tirtos $MFe(Mn)O_3$ medžiagos buvo sintetintos sol-gel būdu [2-5].

Yra žinoma, kad katijonų pakaita M pogardelėje gali turėti įtakos antiferromagnetinei magnetinei tvarkai $MFeO_3$ erituose: paprasta antiferromagnetinė tvarka gali tapti friustruota arba cikloidine. Dėl nedidelio nekompensuoto feromagnetinio momento įdomiomis magnetinėmis savybėmis pasižymi $Y(Gd)FeO_3$ junginiai [2].

Kadangi Mn-O-Mn pamaininė sąveika feromagnetinio tipo, tai magnetinė tvarka manganituose gali būti ferromagnetinė ($BiMnO_3$), kuri gali būti ir sudėtingesnė, pvz. amplitudiškai moduliuota ferromagnetinė tvarka egzistuojanti $GdMnO_3$. Gd keičiant Y $Gd(Y)MnO_3$ ši struktūra papildomai modifikuojama, ką rodo Mesbauerio spektrų pokytis (1 pav) [3].

Maišytuose Fe(Mn) perovskituose Fe jonų pakeitimas Mn mažina magnetinio susitvarkymo temperatūrą, todėl Mesbauerio spektruose stebimas spektrų linijų išsiplėtimas [4]. Sintezės sąlygos taip pat svarbios, kai žemesnė medžiagų atkaitinimo temperatūra sąlygoja mažesnius nanometrinius kristalitų dydžius ir papildomą spektrų linijų išplitimą dėl superparamagnetinės relaksacijos. Atkaitinimo temperatūros parinkimas gali būti svarbus gaunant reikiamą sudėtį. Esant tam tikroms sudėtims ($BiFe_{0.85}Mn_{0.15}O_3$ ir $GdFe_{0.85}Mn_{0.15}O_3$) bei atkaitinimo temperatūroms gali susidaryti pašaliniai paramagnetiniai junginiai - $Bi_2Fe_4O_9$ ir $GdMn(Fe)O_3$, sąlygojantys dubletus Mesbauerio spektruose [5].

Buvo nustatyta, kad M pogardelės katijonų pakeitimas įtakoja ir Mesbauerio spektrų hipersmulkiuosius parametrus – hipersmulkųjį magnetinį lauką, izomerinį ir kvadrupolinį poslinkius matomai dėl katijonų matmenų ir to sąlygotos struktūros pokyčių. Hypersmulkus laukas taip pat gali kisti dėl Fe(Mn) spinų dinamikos didėjant Mn kiekiui ir mažėjant magnetinio virsmo (antiferomagnetikas-paramagnetikas) temperatūrai.



1 pav. $Y_xGd_{1-x}Mn_{0.97}Fe_{0.03}O_3$ Mesbauerio spektrai 11-12 K temperatūroje.

Reikšminiai žodžiai: multiferoikai, Mesbauerio spektroskopija, magnetinės savybės.

Padėka. Šis darbas yra remiamas Lietuvos mokslo tarybos projekto BUNACOMP (Nr. SMIP-19-9)

Literatūra

[1] K.F. Wang, J.-M. Liu, Z. F. Ren, Adv. Phys. **58**, 321 (2009).
[2] D. Karoblis, A. Zarkov, E. Garskaite, K. Mazeika, D. Baltrunas, G. Niaura, A. Beganskiene, A. Kareiva, Scientific Reports **11**, 2875 (2021).
[3] D.Karoblis, A.Zarkov, K.Mazeika, D.Baltrunas, G.Niaura, A.Beganskiene, A.Kareiva, Solid State Sciences **118**, 106632 (2021).
[4] R.Diliautas, A.Beganskiene, D.Karoblis, K.Mazeika, D.Baltrunas, A.Zarkov, R.Raudonis, A.Kareiva, Solid State Sciences **111,** 106458 (2021).
[5] D.Karoblis, R.Diliautas, K.Mazeika, D.Baltrunas, G.Niaura, M.Talaikis, A Beganskiene, A.Zarkov, A. Kareiva, Materials **14,** 4844 (2021).

Aukštos temperatūros supramolekulinių fazių su C–H···F ir C–H···N ryšiais modeliavimas

Modeling of high-temperature supramolecular phases with C–H···F and C–H···N bonds

Andrius Ibenskas, Evaldas Tornau
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
andrius.ibenskas@ftmc.lt

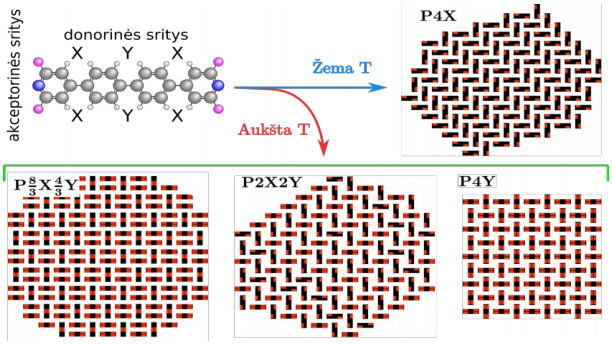
Tvarkingi molekuliniai monosluoksniai, kurių molekules sieja silpni vandeniliniai (H) ryšiai, dažnai formuojasi ant metalų ir kitokių paviršių. Šie silpni tarpmolekuliniai H ryšiai (C–H···N, C–H···X ir kt.) susidaro tarp organinių junginių akceptorinių (piridinas, halogenai) ir silpnų donorinių (C–H) funkcinių grupių. Jie pasižymi mažesniu kryptingumu ir mažesne energija (keletas kcal/mol) negu stiprūs klasikiniai H ryšiai, pvz. O–H···O [1]. Daug C–H grupių turinčios molekulės susijungia keliais silpnais H ryšiais, todėl suminė sąveika gali būti pakankamai stipri ir, nesant stiprių ryšių, nulemti molekulių susitvarkymą.

Tokios struktūros buvo stebimos STM eksperimentuose [2], šildant įvairaus ilgio linijines molekules su fluoruoto piridino grupėmis galuose ant Au(111) paviršiaus. Tipiškas pavyzdys yra 4,4′-bis(2,6-difluoropiridin-4-il) -1,1′-bifenilas (BDFPBP) – keturių fenilo ir piridilo žiedų molekulė. Iš tokių molekulių formuojasi keturios skirtingos struktūros: parketinį išsidėstymą kambario temperatūroje turinti fazė ir trys tankesnės fazės 450−460 K intervale (1 pav.).

Šiame darbe pristatome BDFPBP molekulių susitvarkymo modelį, kuriame atsižvelgiame į galimą molekulės donorinių sričių deprotonavimą (DP) šildant. Neutralių ir dalinai deprotonuotų molekulių sąveikos energijos buvo skaičiuojamos tankio funkcionalo metodu, optimizavus porinius klasterius vakuume. Sąveikų vertės neutralių molekulių porai yra -10 (-9.5) kcal/mol, kai viena molekulė jungiasi statmenai prie kitos molekulės Y (X) srities (1 pav.). Sąveikos su X donoru atveju sąveikos energija šiek tiek sumažėja dėl F–F stūmos, tačiau sumažėjimas greičiausiai nereikšmingas realiose sistemose. Molekulių porai su dalinai deprotonuota donorine molekule gautos sąveikos energijos varijuoja nuo -6.6 kcal/mol (vienos molekulės akceptorius toli nuo kitos molekulės DP vietos) iki nedidelės stūmos (akceptorius šalia DP vietos). Tad akceptoriaus sąveika visada stipresnė su deprotonuotos donorinės molekulės (nuo DP vietos nutolusia) X sritimi negu su jos Y sritimi ($|e_Y| < |e_X|$). Keliant temperatūrą, deprotonuotų molekulių palaipsniui daugėja, atsiranda molekulinių struktūrų su ne tik su X, bet ir Y jungtimis. Tokia tendencija atitinka eksperimentinę fazinių virsmų seką.

Gautas sąveikų energijų santykis $e_Y/e_X \approx 0.85$ buvo naudojamas kaip parametras modeliuojant BDFPBP molekulių ansamblio susitvarkymą Monte Karlo (MK) metodu. Kadangi dalis molekulės donorinių sričių dėl deprotonavimo tampa neaktyviomis, modeliavimui buvo atrinkti septyni molekulės tipai: a) nedeprotonuota molekulė su visomis šešiomis (keturios X ir dvi Y) aktyviomis donorinėmis sritimis (molekulė 6), (b) trys molekulės tipai 4A, 4B ir 4X su keturiomis aktyviomis ir dviem neaktyviomis donorinėmis sritimis, (c) trys molekulės tipai 2A, 2B ir 2Y dviem aktyviomis ir keturiomis neaktyviomis donorinėmis sritimis. Neaktyvios sritys 1 pav. juodų molekulių stačiakampiuose pažymėtos raudonais kvadratėliais. Pažymėtina, kad molekulių akceptorinės sritys visada laikomos aktyviomis.

MK skaičiavimai atskleidė, kad kai kurios BDFPBP molekulės (6, 4A, 4B) yra labai svarbios formuojant mišrių sąveikų PXY tipo fazes, o kitos (4X, 2A, 2B, 2Y) atlieka pagalbinį vaidmenį arba formuoja grynąsias fazes P4X ir P4Y. Homomolekuliniams ansambliams labiau būdingos grynosios fazės, P2X2Y struktūra iš 4B molekulių susidaro tik siaurame sąveikos parametrų intervale, stebimi tik maži $P_{8/3}X_{4/3}Y$ struktūros fragmentai. Dideli šių fazių domenai plačiame parametrų intervale susiformuoja bimolekuliniuose mišiniuose 4X+2Y ($P_{8/3}X_{4/3}Y$ fazė) ir 4B+2Y (P2X2Y fazė). Modeliuojant taip pat gautos naujos molekulinės struktūros ir buvo stebimas jų koegzistavimas su eksperimentinėmis fazėmis.



1 pav. BDFPBP molekulė, toliau vaizduojama stačiakampiu, ir tvarkingos dvimatės šių molekulių struktūros žemoje ir aukštoje temperatūroje.

Reikšminiai žodžiai: molekuliniai sluoksniai, vandeniliniai ryšiai, Monte Karlo metodas, tankio funkcionalo metodas.

Literatūra

[1] L. Brammer, E.A. Bruton et al., Cryst. Growth Des. **1**, 277 (2001).
[2] X. Jin, J.R. Cramer et al., Chin. Chem. Lett. **28**, 525 (2017).

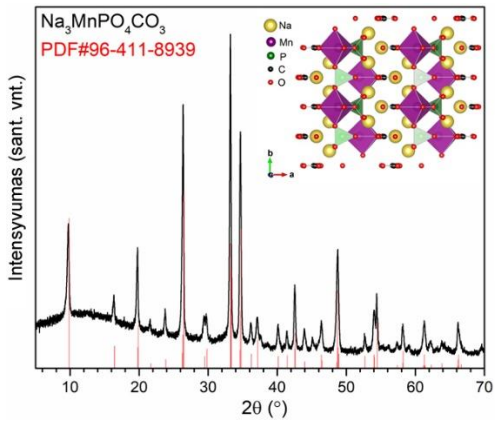
Natrio jonų kietieji laidininkai: $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ ir $Na_3MnPO_4CO_3$

Sodium ion solid conductors: $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ and $Na_3MnPO_4CO_3$

Gintarė Plečkaitytė[1], Linas Vilčiauskas[1], Saulius Daugėla[2], Tomas Šalkus[2], Antanas Feliksas Orliukas[2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
[2]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Taikomosios elektrodinamikos ir telekomunikacijų institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
tomas.salkus@ff.vu.lt

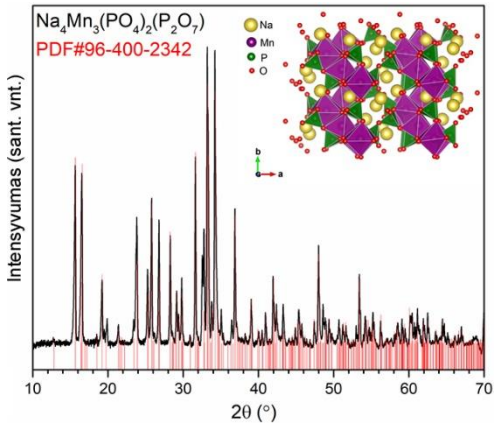
Elektrocheminės baterijos yra svarbus elektros energijos šaltinis dėl savo efektyvumo ir paprastumo naudoti. Siekiant jas pagerinti yra ieškoma naujų funkcinių medžiagų. Buvo ištirta nemažai katodinių ir anodinių medžiagų, skirtų baterijoms su vandens pagrindu pagamintu elektrolitu, tačiau keletos problemų iki šiol mokslininkams nepavyko išspręsti, būtent: gaunamas santykinai mažas energijos tankis, nepakankamas ciklinis stabilumas, mažas potencialų skirtumas [1]. Perspektyvios yra Mn fosfatų pagrindu pagamintos medžiagos, kurios yra netoksiškos, saugios bei lengvai prieinamos. Mn pagrindu gaminamos medžiagos pasižymi greita natrio jonų interkaliacija ir nedideliu tūrio pokyčiu bei aukštu potencialu [2, 3].

$Na_3MnPO_4CO_3$ junginys buvo sintezuotas hidroterminės sintezės metodu iš Na_2CO_3, $Mn(NO_3)_2$, $(NH_4)_2HPO_4$ ir H_2O, kaitinant šias pradines medžiagas esant 180°C 15 h autoklave. Gauta medžiaga priklauso monoklininei singonijai (simetrijos grupė $P2_1/m$) (1 pav.). $Na_3MnPO_4CO_3$ milteliai buvo suspausti ir iš jų esant 500°C kepinama keramika.



1 pav. $Na_3MnPO_4CO_3$ Rentgno difraktograma ir struktūra

$Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ junginys buvo susintetintas kietųjų fazių reakcijos metodu iš stechiometrinio $Na_4P_2O_7$, MnC_2O_4 ir $NH_4H_2PO_4$ mišinio. Buvo vykdoma dvipakopė sintezė ore esant 300°C ir po to 600°C, kievienoje temperatūroje išlaikant po 6 h. Rentgeno difrakcijos eksperimentas parodė, kad gautas junginys priklauso ortorombinei singonijai (Pn21a) (2 pav.). $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ milteliai buvo suspausti jų iš jų kepinama keramika esant 650°C.



2 pav. $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ Rentgno difraktograma ir struktūra

Abiejų junginių laidumas buvo ištirtas impedanso spektroskopijos metodu dažnių diapazone nuo 10 Hz iki 2 MHz ir temperatūrų intervale nuo 300 iki 800 K. $Na_3MnPO_4CO_3$ keramikos laidumo dažninėse priklausomybėse buvo stebėta viena relaksacinė dispersija, kuri buvo susieta su Na^+ jonų migracija keramikos tūryje. Du relaksaciniai procesai buvo stebėti $Na_4Mn_3(PO_4)_2(P_2O_7)$ junginiui esant aukštesnėms temperatūros, šie procesai yra susiję su jonine migracija keramikos kristalituose ir tarpkristalitinėse terpėse. $Na_3MnPO_4CO_3$ junginys pasižymi gana aukštu joniniu laidumu, kurio vertė esant 300 K termperatūrai yra $2.4 \cdot 10^{-4}$ S/m.

Reikšminiai žodžiai: kietieji elektrolitai, joninė pernaša, keramika.

Literatūra

[1] Y. Liu, Adv. Funct. Mater, 2010445 (2021).
[2] J. Kang, ACS Sustain. Chem. Eng. **8**, 163 (2020).
[3] H. Kim, Energy Environ. Sci. **8**, 3325 (2015).

Cinko oksido nanodalelių sintezė vakuuminio plazminio purškimo metodu ir struktūrinių savybių tyrimas

Synthesis of Zinc Oxide Nanoparticles by Vacuum Plasma Spraying and Investigation of Structural Properties

Mindaugas Ilickas[1,2], Brigita Abakevičienė[1,2]
[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[2]Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 69, LT-51423 Kaunas
mindaugas.ilickas@ktu.edu

ZnO yra gan minkšta medžiaga, kietumas pagal Moso skalę yra ~4,5 [1]. ZnO turi platų funkcinių savybių intervalą, juos pritaikant optoelektronikoje, spintronikoje ir pjezoelektriniuose keitikliuose. ZnO yra puslaidininkis, nano- ir mikrostruktūrų požiūrių tai yra labai nepaprasta medžiaga, turinti plačią draustinę juostą, literatūroje pateikiama, jog ši vertė yra E = 3,37 eV [2], taip pat turi gan didelę branduolio rišančiąją energiją (60 meV), todėl ZnO dažniausiai pasirenkamas ultravioletiniams (UV) optoelektronikos taikymams. Tetrapodą sudaro keturios strypo formos struktūros (1 D nanovielos), kurios dar vadinamos „kojomis“. Jos tarpusavyje yra susijungusios per centrinę šerdį, viena kitos atžvilgiu (sudaroma 3D struktūra), šių nanovielų kampų vertės yra intervale 105° - 110° [3]. Ši unikali tetrapodų forma yra didelis privalumas jų pritaikyme. Jėgos veikiančios išilgai vienos „kojos“ yra perkeliamos į kitą, o tai užtikrina aukštą šios nanostruktūros stabilumą. Jei kartu susikaupia didelis skaičius tetrapodų, jie sugeba sukurti unikalią makroskopinę struktūrą, turinčią labai didelį poringumą, kurio beveik neįmanoma pasiekti naudojant sferines nanodaleles [3]. ZnO sugerties maksimumas susidaro ties bangos ilgiu λ = 375 nm, kas atitinka ultravioletinių spindulių regioną (10-400 nm). ZnO nanostruktūros gali būti išgaunamos išgarinant grynus Zn miltelius atmosferoje. Vykstanti sintezės reakcija pateikta:

$$2Zn + O_2 \rightarrow 2ZnO \quad (1)$$

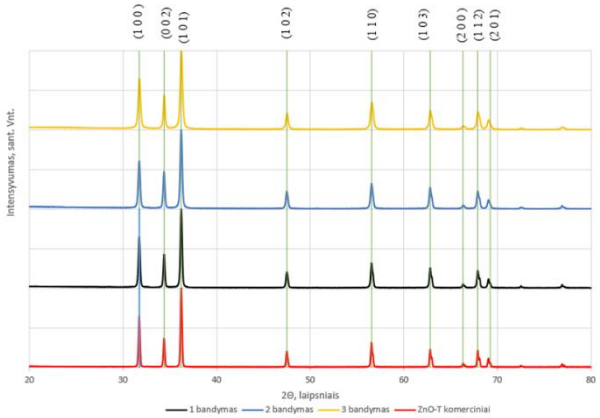
Susidaro baltos spalvos ZnO milteliai.

Šio darbo tikslas yra cinko oksido (ZnO) nanodalelių sintezė vakuuminio plazminio purškimo metodu ir struktūrinių savybių tyrimas. Šiuo metodu ZnO sintezė plazminio purškimo būdu buvo vykdoma pirmą kartą Lietuvoje.

Susintetintų nanomiltelių, vakuuminio plazminio purškimo metodu, analizei naudota rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) metodika.

Visos rentgeno spindulių difrakcijos tyrimo smailės (žr. 1 pav.) buvo indeksuotos pagal šešiakampę viurcito kristalinę struktūrą su labiausiai pageidaujamomis plokštumomis (1 0 0), (0 0 2) ir (1 0 1) pagal JCPDS duomenų baze (kortelės Nr. 00-036-1451).

Atlikus Rentgeno spindulių difrakcijos tyrimą nustatyti susidarančių ZnO-T tipo dalelių kristalitų dydžiai, yra tarp 30 nm ir 40 nm (Literatūroje [4] minima, jog įvairiais metodais gaunamas kristalitų dydis yra 8-55 nm, todėl XRD duomenimis suskaičiuoti kristalitų dydžiai yra teisingi), nustatyta pagrindinė (1 0 1) ir antrinės cinko oksido formavimosi plokštumos, rastas susidarančių defektų skaičius mėginyje. Nustatytos kristalinės gardelės konstantos a ir c bei jų santykis a/c, šie dydžiai atitinkamai yra a = 3,0378 Å, c = 5,0829 Å ir c/a = 1,673, lyginant su teoriniais dydžiais (a = 3,2495 Å, c = 5,2069 Å, c/a = 1,602) matoma, jog gautosios konstantos yra mažesnės, o c/a santykis 0,07 didesnis.



1 pav. Rentgeno spindulių rentgenogramos: kreivė juoda spalva – lanko srovės stipris – 600 A, pirminių Ar dujų srautas – 35 l/min; kreivė mėlyna spalva – pirminių Ar dujų srautas 70 l/min, galia – 40 kW; kreivė gelsva spalva – pirminių Ar dujų srautas, 20 l/min; kreivė raudona spalva – komerciniai milteliai

Reikšminiai žodžiai: didelės išeigos sintezė, cinko oksidas, nanodalelės.

Literatūra

[1] A. Hernández Battez et al. CuO, ZrO2 and ZnO nanoparticles as antiwear additive in oil lubricants. Elsevier, **265(3-4)**, 422–428, 2008.
[2] Jagadish, C, et al. Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures: Processing, Properties, and Applications, 1-20, (2006).
[3] Mishra, Y., et al. ZnO tetrapod materials for functional applications. Materials Today, **21(6)**, 631–651, (2018).
[4] 58. S. Bai, et al. Quantum-sized ZnO nanoparticles: Synthesis, characterization and sensing properties for NO2. Journal of Materials Chemistry, **21(33)**, 12288, 2011.

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-24-0026 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

Indžio-alavo oksido plonų sluoksnių auginimas magnetroninio nusodinimo vakuume metodu ant polimerinių padėklų

Growth of indium-tin oxide thin films by magnetron deposition on polymer substrates

Aleksandras Iljinas[1], Valerijus Marudinas[1], Ruslanas Ramanauskas[1], Remigijus Kaliasas[2]
[1]Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir Gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas
[2]Panevėžio kolegija, Technologijos mokslų fakultetas, Laisvės a. 23, LT-35200, Panevėžys
aleksandras.iljinas@ktu.lt

Visų šiuolaikinių optoelektronikos prietaisų viena iš sudedamųjų dalių yra ploni optiškai skaidrūs ir elektros srovei laidūs sluoksniai. Skystųjų kristalų vaizduokliuose šie sluoksniai yra skaidrūs elektrodai, kuriais yra valdomas vaizduoklio skaidrumas šviesai.

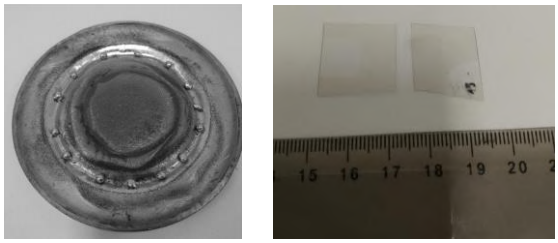
Optiškai skaidrūs ir elektrai laidūs sluoksniai - tai sluoksniai, kurių optinis pralaidumas regimosios šviesos spektre (380 nm - 760 nm) yra virš 80 %, optinis draustinės juostos plotis nemažesnis kaip 3 eV, o savitoji varža nedidesnė kaip 10^{-5} Ω·cm eilės.

Šiam tikslui plačiausiai naudojami indžio oksidų (In_2O_3) su alavo oksido (SnO_2) priemaišomis (ITO) sluoksniai, o šių sluoksnių formavimui dažniausiai taikomi fizikinio nusodinimo iš garų fazės vakuume metodai.

ITO sluoksnių auginimui dažniausiai naudojamas radio dažnio (RF) arba reaktyvus magnetroniniai nusodinimai. Norint užauginti kokybiškus sluoksnius (kuo didesnis optinis pralaidumas ir kuo didesnis elektrinis laidumas) vienas iš svarbesnių sintezės parametrų yra padėklo temperatūra sluoksnio augimo metu. Nuo jos labiausiai priklauso sluoksnio kristališkumas. Esant žemai formavimo temperatūrai, nevyksta ITO sluoksnio kristalizacija, kas lemia nepakankamas sluoksnių savybes (mažą elektrinį laidumą bei optinį skaidrį). Auginant sluoksnius ant polimerinių padėklų temperatūra dažniausiai negali būti didelė už 100 °C. Viršijus šią temperatūrą - drastiškai keičiasi padėklo savybės, jis minkštėja ir auginama medžiaga pradeda įsiterpti į polimerą. Dėl šios priežasties, siekiant gauti pakankamo kristališkumo sluoksnius, suformuotų dangų negalima atkaitinti aukštesnėse temperatūrose. Todėl užauginti optiškai skaidrius ir elektros srovei laidžius sluoksnius ant polimerinių padėklų yra didelis iššūkis.

Ploni indžio-alavo oksido sluoksniai buvo auginami ant polietileno teraftalato padėklų standartine magnetroninio nusodinimo vakuume įranga. Magnetrone yra indžio katodas (taikinys) į kurio dulkėjimo (erozijos) zoną įdedamos alavo granules, taip įvedant alavo priemaišas į dangą (1pav). Keičiant įdedamų alavo granulių skaičiui (masei), gaunamos skirtingos sudėties dangos.

Morfologiniai tyrimai buvo atliekami skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) metodu. Sluoksnių struktūra buvo tiriami Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) metodu. Suformuotų medžiagų elementinė sudėtis analizuojama rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrija (EDX). Dangų elektrinės savybės buvo nustatytos matuojant dangų paviršines varžas keturių zondų metodu. Optinės charakteristikos buvo matuojamos spektrometru, kuris leidžia keisti krentančios šviesos bangos ilgį nuo 250 nm iki 850 nm. Juo galima išmatuoti šviesos pralaidumo priklausomybes nuo šviesos bangos ilgio. Dangų optiniu draustinių juostų pločiui nustatyti naudotas Tauco metodas.



1 pav. Indžio katodas su alavo granulėmis (kairėje), suformuotų dangų nuotrauka (dešinėje)

1 lentelė. Elektrinės ir optinės indžio-alavo oksidų charakteristikos

	Bandinys				
m(Sn), g	0,02	0,04	0,08	0,1	0,14
m(In)/m(Sn) dangoje	19,3	17,9	8	6,8	4,8
d, nm	282	263	235	254	258
$R_{\square}$, kΩ/Sq	8,62	5,52	0,919	1,16	5,41
ρ, mΩ·m	2,43	1,45	0,216	0,295	1,39
T_{vid}, % (400-750 nm)	78	66	72	60	67
$\alpha \cdot 10^6$, m^{-1} (550 nm)	2,0	3,0	3,8	3,5	4,0
E_g, eV	3,80	3,80	3,75	3,65	3,80

Didinant alavo masę nuo 0,02 g iki 0,14 g sluoksnio formavimo metu alavo kiekis ITO sluoksnyje didėjo nuo 4,9 % iki 17,4 %, o draustinės juostos plotis kinta 3,65 - 3,80 eV ribose. Optimaliu optinių ir elektrinių savybių deriniu, mažiausia paviršine varža (919 Ω/Sq), ir nedideliu sugerties koeficientu (3,8 106 m^{-1}) pasižymi danga, kurioje indžio ir alavo masių santykis buvo lygus ~8. Rentgeno difrakcijos tyrimai parodė kad visų dangų struktūra yra amorfinė.

Reikšminiai žodžiai: indžio-alavo oksidas (ITO), skaidrios regimai šviesai ir laidžios elektros srovei plonos dangos, dangos ant polimerinių padėklų, magnetroninis nusodinimas.

Kumuliaciniai ir magneto-kumuliaciniai reiškiniai S-N riboje plonų YBaCuO sluoksnių spartaus S-N perjungimo metu

Cumulative and magneto-cumulative phenomena at the S-N border during fast S-N switching of thin YBaCuO films

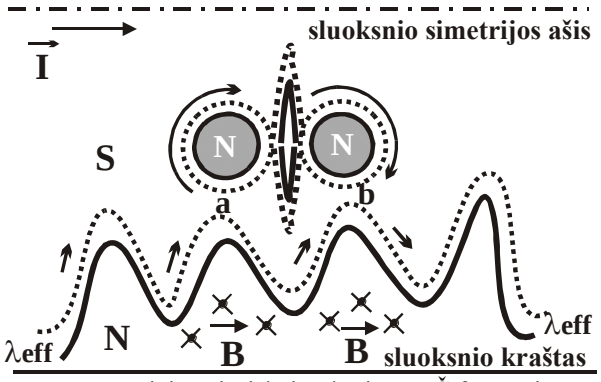
Oleg Kiprijanovič, Linas Ardaravičius ir Steponas Ašmontas
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
oleg.kiprijanovič@ftmc.lt

Šiemet akademiko A. Sacharovo gimimui sukanka 100 metų. Mokslo pasaulis prisimena jį kaip iškilųjį mokslininką, pasižyminti milžinišku darbštumu ir dalyvaujančio branduolinio ginklo sukūrime [1]. Kiti prisimena jį kaip drąsų kovotoją už žmogaus teises. Nėra abejonės, kad jo teisių gynėjo veikla priartino Pabaltijo respublikų nepriklausomybės atgavimą.

A. Sacharovui priklauso stipraus magnetinio lauko gavimo būdas – gero laidumo metalinio cilindro suspaudimas su jame indukuotu magnetiniu lauku per milisekundę naudojant sprogmenį – magnetinė kumuliacija. Yra žinoma, kad superlaidininkas išstumia magnetinį lauką – Meisnerio efektas; be to, pagautas magnetinis srautas uždarame kontūre nesikeičia, keičiant jo formą. Tai būtų ideali medžiaga magnetinei kumuliacijai, tačiau superlaidi būsena (S) yra labai jautri mechaninei deformacijai, stipriems magnetinimo laukui ir srovei. Iškyla klausimas, kokiu būdu ir per kokį laiką reikia suspausti superlaidų kontūrą, norint sukumuliuoti magnetinį lauką?

Kumuliacinės čiurkšlės (KČ) formavimas išlenktoje S-N riboje (čia N - normali būsena) žingsninio N zonos prasiskverbimo metu, vykstant S-N perjungimui YBaCuO plonuose sluoksniuose, buvo pristatytas ankščiau [2]. Darbe [3] parodyta, kad dėl savo ypatingų savybių, S-N riba (jos plotis λ_{eff}) judėjimo metu gali būti nagrinėjama kaip atskiras objektas. S-N ribos nesuspaudžiamumo savybė, sąlygota S srovėmis išstumiančiomis magnetinį lauką, yra tas lemiamas faktorius, atsakingas už KČ pasirodymą. Žingsninio judėjimo metu dėl magneto-hidrodinaminių reiškinių S-N ribos išlinkimų perpliauškinimas pastoviai generuoja KČs. Dėl šių priežasčių S-N ribos forma N zonos prasiskverbimo metu yra chaotiška. Kuo didesnis j_c, tuo plonesnė ir stipresnė S-N riba, tuo aštresnis sueinamumo kampas, ir tuo didesnis KČ greitis. Įdomus atvejis yra dviejų priešiškai nukreiptų KČ formavimas. Bet prieš tai apsvarstysime magnetinę kumuliaciją.

1 pav. iš viršaus pavaizduota nestabili S-N riba prie sluoksnio krašto stipriu kumuliaciniu efekto atveju (λ_{eff} =1.2 μm, $j_{c\lambda eff}$=1.6·10^8 A/cm^2 ir sluoksnio storis d=0.15 μm), kai jos tamprumo ir lauko išstūmimo savybės stipriausios. Nestabilumui vystantis, didėja „kuprų“ amplitudės, jos gana gyliai įsiskverbia į S būseną. Taškuose **a** ir **b** srovės linijos persijungia ir atsiranda uždaros N sritys, kurios taps apskritimais, apsupamais S srovėmis. Dėl gilaus prasiskverbimo jų spindulys r_1 yra apie 3.6 μm.



1 pav. Dviejų priešiškai nukreiptų KČ formavimas po magnetinės kumuliacijos. **a** ir **b**–srovės perjungimo taškai, mažos rodyklės – lokali srovės kryptis.

Baigtinis r_2 yra apie 0.8 μm, kadangi tamsios dėmės nuotraukose turi spindulį ~ λ_{eff} [3]. S būsena suspaudžia apskritimo sritis, o proceso metu galioja srauto tvermės dėsnis. Skaičiavimus atliksime pagal elementarią formulę apskritimo srovėms. Šis dėsnis nulemia, kad srovė ir srovės tankis padidės r_1/r_2 = 4.5 karto, o magnetinės kumuliacijos koeficientas B_2/B_1 = 20.5 karto, jeigu apskritimo srovės pradinis tankis yra 0.4·$j_{c\lambda eff}$. Kumuliacija pasibaigia, kai srovės tankis viršija Ginzburgo-Landau porų suardymo srovės tankį, ir po S-N perjungimo prasideda N zonos plėtimasis. Jeigu zonos buvo arti, kaip 1 pav., susiformuos dvi priešiškai nukreiptos KČs.

Žingsnis, kuriuo metu S-N ribos išlinkimas persitvarko, trunka mažiau nei 35 ps Nestabilumo išsivystymas ir srovės perjungimas žingsnio metu trunka apie 25 ps. Iš to seka, kad kumuliacija tūrėtų įvykti už laiką trumpesnį negu 10 ps. Tokiu būdu, ypatingos S-N ribos savybės leidžia jai ne tik suformuoti KČs, bet ir sukumuliuoti magnetinį lauką, jei N sričių naikinimas vyks sparčiau nei už 10 ps.

Reikšminiai žodžiai: II rūšies superlaidininkas, S-N perjungimas, S-N ribos išlinkimas, kumuliacinės čiurkšlės, magnetinė kumuliacija.

Literatūra

[1] B. L. Altshuler, Physics-Uspekhi, **191(5)** 449–474 (2021). DOI: 10.3367/UFNe.2021.02.038946
[2] O. Kiprijanovič, S. Ašmontas, 41st Lithuanian National Physics Conf., Program and abstract book, 315 (2015).
[3] O. Kiprijanovič, L. Ardaravičius, J. Gradauskas, Č. Šimkevičius, S. Keršulis, S. Ašmontas, Supercond. Sci. Technol. **33** 095013 (8pp) (2020). DOI.10.1088/1361-6668/aba351

Magnetinių sūkurių koherentinio judėjimo deguonimi nuskurdintu YBCO dariniu tyrimai

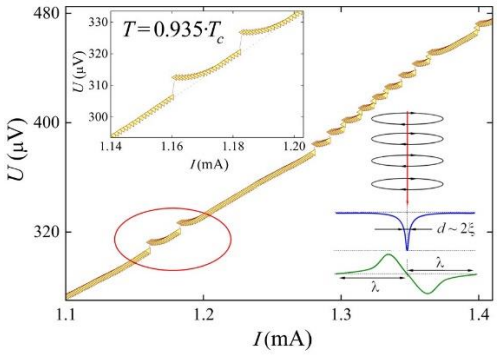
Investigation of the coherent vortex motion in the oxygen-depleted YBCO device

Artūras Jukna[1] ir Roman Sobolewski[2],
[1]Vilnius Tech, Fotoelektros technologijų laboratorija, Saulėtekio al. 11, Vilnius LT-10223, Lietuva
[2]Elektros ir kompiuterių inžinerijos fakultetas, Ročesterio universitetas, Ročesteris NY-14627, JAV
arturas.jukna@vilniustech.lt

II-osios rūšies superlaidininkuose superlaidusis virsmas lydimas mišriosios medžiagos fazės. Joje gali koegzistuoti superlaidi ir nesuperlaidi (t. y. normali) medžiagos fazės, nors medžiagos temperatūra T žemesnė nei kritinė superlaidininko temperatūra T_c ir ja teka elektros srovė, kurios stipris viršija superlaidininko kritinę elektros srovę I_c. Elektros srovė mišriąją medžiagos būseną realizuoja Abrikosov'o magnetiniais sūkuriais, kurių kiekvienas „pagauna" po magnetinio srauto kvantą $\Phi_0 = 2.07 \times 10^{-15}$ Wb. Srovės elektrinio ir magnetinio laukų bendru poveikiu sukurtai Lorentz'o jėgai F_L viršijus piningo jėgą F_p superlaidininke, magnetiniai sūkuriai „atkimba" nuo piningo centrų (medžiagos kristalinės struktūros defektų) ir juda „silpnojo" superlaidumo sritimis (t. y. žemiausios T_c, H_c bei I_c), sąlygodami elektros srovės energijos disipaciją eksperimentiškai stebimą superlaidininko voltamperinėse charakteristikose (VAch). Žinomos kelios magnetinių sūkurių judėjimo fazės, tai *termiškai aktyvuotų pavienių sūkurių judėjimas* (*angl.* Thermally Activated Flux Flow), *sūkurių grupių atsitiktiniai šuoliai* (Flux Creap), ir *stipriai tarpusavyje sąveikaujančių sūkurių judėjimas* (Flux Flow). Magnetiniams sūkuriams tarpusavyje stipriai sąveikaujant jų judėjimas virsta *koherentiniu*, formuojančiu superlaidininko laiptuotą VAch [1]. Laiptelių skaičių ir formą lemia sūkurių kanale skaičius ir jų judėjimo greičio augimas, didinant F_L atžvilgiu F_p.

Šiame darbe 0,3 μm storio $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ medžiagos 50×100 μm^2 dydžio dariniuose, turinčiuose vieną arba du magnetinių sūkurių kanalus, temperatūrų intervale nuo $0{,}94 \cdot T_c$ iki $0{,}98 \cdot T_c$ stebėtos laiptuotos VAch (1 pav.). Čia $T_c \sim 91{,}4$ K. Stebimų laiptelių forma aiškinama elektros srovės magnetiniu lauku sukurtų Abrikosov'o magnetinių sūkurių judėjimu išilgai sūkurių kanalo, orientuoto statmenai elektros srovei. Superlaidieji kanalai darinyje suformuoti azoto dujų aplinkoje 0,3 – 0,6 W galios lazerio spinduliu, sufokusuotu į 5 μm skersmens dėmę ir skenuojamu darinio paviršiumi 50 μm/s greičiu. Lazerio spinduliu įkaitinta medžiaga praranda dalį deguonies ($\delta \sim 0{,}2$), o kanalo atsiradimas lemia darinio elektrinės varžos padidėjimą beveik 2 k., esant $T > T_c$ bei sumažėjimą superlaidininko kritinės srovės ir temperatūros, esant $T < T_c$ (čia T_c – lazeriu nemodifikuotos medžiagos superlaidžiojo virsmo temperatūra).

Gauti tyrimų rezultatai rodo, jog sūkurių kanalus turintys dariniai turi du superlaidžiuosius virsmus, o esant $T < T_c$, žematemperatūris virsmas užmaskuotas elektros srovės nuotoliais, kurių priežastis – Abrikosov'o magnetinių sūkurių judėjimas. Rezultatų paaiškinimui darėme prielaida, jog kanalo srityje atsiradusios deguonies vakansijos ne tik sukuria F_p prilygstančią sraigtinių dislokacijų (charakteringi defektai) kuriamai jėgai, bet ir suvienodina ją per visą sūkurių kanalo ilgį, taip jame sudarant palankias sąlygas sūkurių judėjimui.



1 pav. Voltamperinė charakteristika 0,3 μm storio, 50 μm pločio ir 100 μm ilgio $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ darinio, su 5 μm pločio sūkurių kanalu, esant $T = 0.935T_c$ ($T_c \sim 91{,}4$ K). Viršutinėje įklijoje padidinta charakteristikos dalis, žemutinėje – Abrikosov'o magnetinio sūkurio, kurio šerdies (normalios fazės medžiaga) skersmuo prilygsta dvigubam superlaidininko koherentiškumo ilgiui ξ, o išorinis skersmuo – dvigubam magnetinio lauko prasiskverbimo į superlaidininką gyliui λ.

Elektrinės įtampos laiptelio „staigioji" dalis (1 pav. įklija) sietina su papildomos sūkurių poros (t. y. sūkurio-antisūkurio) atsiradimu darinio kanale, o „lėtoji"(t. y. beveik horizontalioji) dalis – atspindi judančių sūkurių grupės greičio augimą, stiprinant dariniu tekančią elektros srovę. Atsitiktinis laiptelių atsiradimas ir išnykimas (1 pav.) verčia manyti, jog deguonimi nuskurdintose sluoksnio srityse piningo jėga kinta dėl deguonies koncentracijos lokalių gradientų, nukreiptų iš juo praturtintų darinio sričių į nuskurdintas sritis (deguonies difuzijos), bei elektros srovės sukurto elektrinio lauko, nenukreipto statmenai kanalui (deguonies dreifo). Deguonies vakansijų atsiradimas $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ kristalinės gardelės Cu-O grandinėlėse (kristalo *b*-ašies kryptimi) gali lemti laisvųjų krūvininkų koncentracijos kitimą kristalo CuO_2 plokštumose, atsakingose už superlaidžiąsias medžiagos savybes [2] ir, tuo pačiu, už piningo jėgos F_p atstojamąją.

Reikšminiai žodžiai: II-os rūšies superlaidininkas, mišrioji būsena, Abrikosov'o magnetinis sūkurys, piningo jėga.

Literatūra

[1] A. Jukna, L. Steponavičienė, V. Plaušinaitienė, A. Abrutis, A. Maneikis, K. Šliužienė, V. Lisauskas, R. Sobolewski, *Appl Phys. B* **113**, 327 (2013).
[2] M. Muroi, R. Street. *Physica C* **246**, 357 (1995).

PLOKŠČIOS SPECIALIOS THZ OPTIKOS ELEMENTŲ GAMYBOS FEMTOSEKUNDINIAIS LAZERINIAIS IMPULSAIS TYRIMAS

INVESTIGATION OF SPECIAL FLAT THZ OPTICAL ELEMENT MANUFACTURE BY FEMTOSECOND LASER PULSES

Paulius Kizevičius[1], Ernestas Nacius[1], Sergejus Orlovas[1], Vytautas Jukna[1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[2]Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
paulius.kizevicius@ftmc.lt

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

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

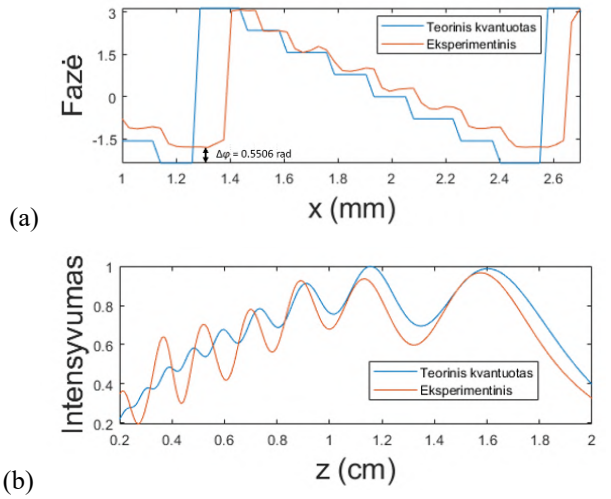
$$\varphi(\rho) = h(\rho)[(n_1 - n_0)k], \qquad (1)$$

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

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

čia $\Delta = 2\pi/Nq$, kur Nq yra laiptelių skaičius.

Pasitelkiant aprašytą algoritmą buvo lyginami sumodeliuoti teoriniai ir eksperimentiškai pagaminti aksikonų profiliai, žr. 1 (a) pav.



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

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

Reikšminiai žodžiai: difrakcinis elementas, nedifraguojantis pluoštas, terahercai.

Literatūra

[1] L. Minkevičius, D. Jokubauskis, I. Kašalynas, S. Orlov, A. Urbas, G. Valušis, Bessel terahertz imaging with enhanced contrast realized by silicon multi-phase diffractive optics, Optics express 27(25), (2019).
[2] T. Vettenburg, H. I. Dalgarno, J. Nylk, C. Coll-Lladó, D. E. Ferrier, T. Čižmár, F. J. Gunn-Moore, K. Dholakia, Light-sheet microscopy using an airy beam, Nature methods 11(5), (2014).

Drėgmės ir dengimo paklaidų įtaka plačiajuosčio čirpuoto veidrodžio su porėtu išoriniu sluoksniu spektriniams parametrams

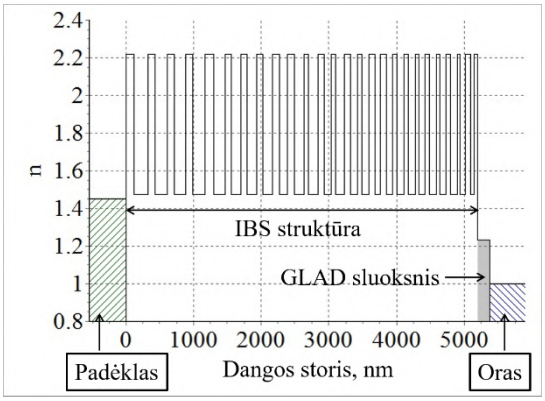
Impact of humidity and deposition errors on spectral characteristics of broadband chirped mirror with porous top layer

Simas Melnikas, Lukas Ramalis, Simonas Kičas, Tomas Tolenis
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
simas.melnikas@ftmc.lt

Čirpuoti veidrodžiai – daugiasluoksnės dielektrinės optinės dangos, skirtos ultratrumpųjų lazerinės spinduliuotės impulsų dispersijai kontroliuoti. Šie elementai, panaudojami ultratrumpųjų spinduliuotės impulsų plėstuvuose ir spaustuvuose, leidžia pasiekti norimas dispersijos vertes plačiame spektriniame ruože. Norint išvengti grupinio vėlinimo dispersijos (angl. group delay dispersion - GDD) osciliacijų, sukeltų optinio impedanso tarp oro ir veidrodžio medžiagų nederinimo, keletas čirpuotų veidrodžių rūšių ir čirpuotų veidrodžių kombinacijų buvo tyrinėjamos ir naudojamos ultratrumpųjų impulsų lazerinėse sistemose [1].

Naujausia čirpuotų veidrodžių rūšis – čirpuoti veidrodžiai su išoriniu porėtu sluoksniu [2]. Porėto išorinio sluoksnio efektyvusis lūžio rodiklis yra mažesnis nei tankios medžiagos sluoksnio. Toks išorinis sluoksnis užtikrina tolygesnį impedanso derinimą oras-danga sandūroje. Dėl to čirpuotas veidrodis su išoriniu porėtu sluoksniu pasižymi tolydžia GDD kreive plačiame spektriniame ruože.

Standartinio čirpuoto veidrodžio tolydžios GDD spektrinės juostos plotis apribotas apytiksliai pusės optinės oktavos ($\Delta\lambda\approx300$ nm ties $\lambda_c=800$ nm). Šiame darbe mes suprojektavome ir padengėme $\Delta\lambda>400$ nm spektrinės juostos pločio čirpuotą veidrodį su porėtu išoriniu sluoksniu. Taip pat tyrėme kaip keičiasi tokio veidrodžio spektriniai parametrai standartinės drėgmės laboratorijoje sąlygomis (santykinė drėgmė: 23%) ir sumažintos drėgmės (santykinė drėgmė: 5%) sąlygomis.



1 pav. Čirpuoto veidrodžio struktūros lūžio rodiklio (n) priklausomybė nuo dangos storio; paskutinis sluoksnis (n≈1.23) padengtas GLAD metodu.

Daugiasluoksnė danga buvo padengta jonapluoščio dulkinimo technologija (angl. Ion beam sputtering – IBS) ir garinimo kampu metodu (angl. Glancing angle deposition – GLAD), įdiegtu elektronų pluošto garinimo įrenginyje. 51 tankios struktūros sluoksnis buvo padengtas IBS technologija, o paskutinis porėtas (sudarytas iš vertikalių kolonų) sluoksnis - GLAD metodu [3] (1 pav.). Padengus dangą, spektriniai parametrai (pralaidumo koeficientas ir GDD) buvo matuojami normaliomis ir sumažintos santykinės drėgmės sąlygomis. Pagal GDD matavimus nustatytas porėto sluoksnio lūžio rodiklio pokytis skirtingos santykinės drėgmės sąlygomis turėtų būti mažesnis nei 1 %, o GDD svyravimai net ir įskaičius dengimo paklaidų įtaką – tokios pačios arba mažesnės amplitudės lyginant su čirpuoto veidrodžio dizainu be porėto sluoksnio.

Tyrimo rezultatai leidžia įvertinti čirpuotų veidrodžių su porėtu išoriniu sluoksniu spektrinių parametrų jautrumą dengimo paklaidoms ir aplinkos poveikiui (kintančiai drėgmei). Taip pat galimus spektrinių parametrų pokyčius, jei drėgmė išgarinama iš porėto sluoksnio struktūros kaistant naudojamam veidrodžiui didelio pasikartojimo dažnio lazerinėje sistemoje.

Reikšminiai žodžiai: ultratrumpieji lazeriniai impulsai, čirpuoti veidrodžiai..

Finansavimo šaltiniai

Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-20-61.

Literatūra

[1] V. Pervak, O. Razskazovskaya, B. Angelov Ivan, L. Vodopyanov Konstantin, and M. Trubetskov, Adv. Opt. Technol. **3**, 55-62 (2014).
[2] J. Liu, Y. Wang, R. Zhao, K. Guo, R. Chen, H. Qi, M. Zhu, D. Wang, K. Yi, Y. Leng, and J. Shao, Opt. Mater. Express **8**, 836-843 (2018).
[3] L. Grinevičiūtė, M. Andrulevičius, A. Melninkaitis, R. Buzelis, A. Selskis, A. Lazauskas, and T. Tolenis, Phys. Status Solidi A **214**, 1770175 (2017).

Mikro-fluidinio Makro-molekulių Separatoriaus Gamyba Tiesioginiu Femtosekundiniu Lazeriniu Rašymu

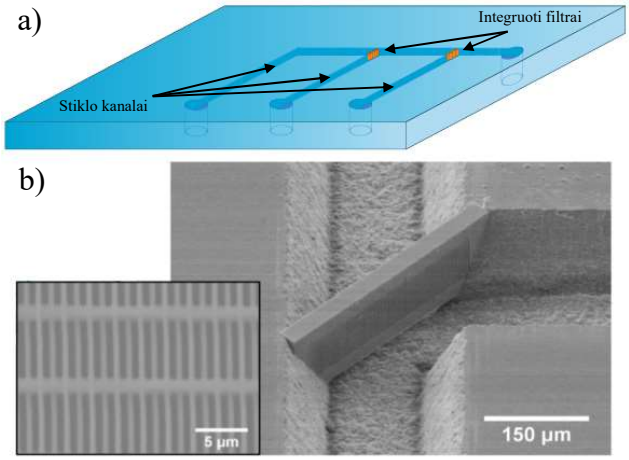
Fabrication of Microfluidic Macromolecule Separator by Femtosecond Direct Laser Writing

Deividas Andriukaitis[1,2], Dovilė Andrijec[1], Rokas Vargalis[1], Agnė Butkutė[1,2], Olga Kornyšova[3], Tomas Drevinskas[3], Vilma Kaškonienė[3], Mantas Stankevičius[3], Audrius Maruška[3], Linas Jonušauskas[1,2]
[1]Femtika, UAB, Saulėtekio al. 15, Vilnius 10224
[2]Lazerinių tyrimų centras, Fizikos Fakultetas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius
[3]Chemijos Katedra, Vytauto Didžiojo Universitetas, Vileikos g. 8, Kaunas 3035

deividas@femtika.lt

Tiesioginis lazerinis rašymas naudojant femtosekundinį (fs) lazerį yra patraukli technologija leidžianti apdirbti daugelį medžiagų [1]. Didžiulę įtaką šios technologijos populiarumui ir naujiems pritaikymams padarė lazerinės inžinerijos kilimas ir tobulėjimas. To pasekoje buvo pradėta gaminti modernias, bei derinamas fs-lazerines sistemas, su kuriomis įmanoma kontroliuoti įvairius lazerio parametrus tokius kaip: pulso trukmė (nuo sub-200 iki 10 ps), pasikartojimo dažnį (1-1000 kHz) ir pulso energiją (nJ-mJ). Medžiagų apdirbimo srityje galima pamatyti ultra-trumpųjų impulsų naudojimą, kuris praplečia tiesioginio lazerinio rašymo greitį bei kokybę [2]. Suderinus šią technologiją su greitaeige gamybos įranga [3] galima gaminti ganėtinai sudėtingus darinius, kurie gali būti integruoti į mikro-prietaisus.

Šiame darbe pristatome integruotu mikrofluidiniu filtru paremtą makro-molekulių separatorių. Jis pagamintas naudojant hibridinio tiesioginio lazerinio rašymo technologiją. Naudojant adityvų formavimą galima gaminti mikro-filtrus [4] su galimybe pakeisti jų porų dydi, kurio paskirtis yra filtruoti mikro-daleles skystyje. Šios technologijos privalumas yra galimybė gauti sub-difrakcinius darinius yra realizuota filtro gamyboje. Filtrų porų dydis gali varijuoti nuo 250 iki 1000 nm. Minėti filtrai su skirtingais porų dydžiais gali būti integruojami i mikro-kanalų sistemas taip pasiekiant kelių lygių dalelių filtravimą. Formuojant šiuos darinius buvo susidurta su struktūrų iškraipymu dėl kapiliariniu jėgų ryškinimo metu. Ši problema buvo išspręsta modifikavus filtro modelį. Filtrai yra integruojami į stiklinius kanalus, kurie yra išabliuoti naudojant femtosekundinį lazerį. Darbo metu buvo iteruojami įvairūs abliacijos parametrai ir režimai. Geriausi rezultatai gauti naudojant impulsų papliulų (angl. burst) režimą. Kombinavus su tinkamais gamybos parametrais, lazerio pluoštas buvo skenuojamas m/s eilės greičiu tuo pat metu išlaikant iki 5% kanalo geometrijos sutapimą su teoretiniu. Paviršiaus šiurkštumas - iki keliu ~um RMS. Tiek abliacijos ir integracijos operacijos buvo atliktos naudojant ta pačia įranga tik keičiant fokusuojančia optiką ir lazerio parametrus. Galiausiai buvo atliktas sandarinimas. Iš trijų opcijų, kurios yra lazerinis virinimas, adhezinis sandarinimas ir terminis sujungimas buvo pasirinkta trečioji opcija, dėl atsikartojamumo ir proceso paprastumo. Šiame darbe buvo skirta daug dėmesio gamybos proceso našumo optimizavimui. Sukombinavus visas minėtas technologijas, pilnai veikiantį mikro-fluidinį makro-molekulių seperatorių pavyko pagaminti mažiau negu per valandą (išskiriant medžiagos paruošimo laiką). Šis ganėtinai trumpas proceso laikas veda į naujus mikro-molekulių separatoriaus pritaikymus.



1 pav. a) dviejų lygių filtravimo schema sudaryta iš dviejų makro-molekulių separatorių, integruotų išabliuotame mikro-kanalų sistemoje. b) integruoto makro-molekulių separatoriaus SEM atvaizdas. Padidintame vaizde matomos aukštos skyros filtro poros (~500 nm).

Literatūra

[1] L. Jonušauskas, D. Mackevičiūtė, G. Kontenis, and V. Purlys, "Femtosecond lasers: the ultimate tool for high-precision 3D manufacturing," Adv. Opt. Technol. 8(3-4), 241-251 (2019).
[2] A. Žemaitis, P. Gečys, M. Barkauskas, G. Račiukaitis, and M. Gedvilas, "Highly-efficient laser ablation of copper by bursts of ultrashort tuneable (fs-ps) pulses," Sci. Rep. 9, 12280 (2019).
[3] L. Jonušauskas, T. Baravykas, D. Andrijec, T. Gadišauskas, and V. Purlys, "Stitchless support-free 3D printing of free-form micromechanical structures with feature size on-demand," Sci. Rep. 9, 17533 (2019).
[4] L. Amato, Y. Gu, N. Bellini, S. M. Eaton, G. Cerullo, and R. Osellame, "Integrated three-dimensional filter separates nanoscale from microscale elements in a microfluidic chip," Lab Chip 12, 1135-1142 (2012).

Filamentacijos slopinimas netiesinėje Kero terpėje lūžio rodiklio moduliacija

Suppression of Filamentation in Refraction Index Modulated Kerr Media

Edvinas Aleksandravičius[1], Darius Gailevičius[1], Kęstutis Staliūnas[1,2,3], Audrius Dubietis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Kaunas
[2]ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain
[3]UPC, Dep. de Fisica, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona) Spain
edvinas.aleksandravicius@ff.vu.lt

Superkontinuumo generavime medžiagoje dažnai atsirandanti kliūtis yra spinduliuotės filamentacija. Greta spinduliuotės spektro išplitimo – superkontinuumo generavimo – atsiranda ir kampinio spektro išplitimas – filamentacija. Susidaręs šviesos filamentas gali turėti nepageidaujamą poveikį – gali mažėti superkontinuumo generavimo efektyvumas, keistis superkontinuumo spektro ribos, negrįžtamai modifikuoti medžiagą.

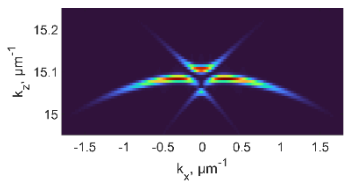
Galimas variantas spinduliuotės filamentacijos slopinimui yra periodinė terpės lūžio rodiklio moduliacija. Yra žinoma, kad lūžio rodiklio moduliacija, kurios periodas yra artimas bangos ilgiui, gali stipriai paveikti spinduliuotės sklidimą. Vienas geriausiai žinomų efektų, pasireiškiančių tam tikroms skersinių ir išilginių moduliacijos periodų kombinacijoms, yra savikolimacija. Šiuo atveju spinduliuotė gali sklisti be difrakcijos – t. y. neplisdama. Savikolimacijos efektas vyksta, kai erdvinės dispersijos kreivės yra suplokštinamos. Kitoms skersinių ir išilginių moduliacijos periodų kombinacijoms galima gauti mažesnio kreivumo radiuso erdvinės dispersijos kreives – sustiprinta difrakcija – arba priešingo ženklo erdvinės dispersijos kreives – antidifrakcija [1]. Šie erdvinės dispersijos rėžimai galėtų būti panaudoti filamentacijos slopinimui arba sustabdymui.

Lūžio rodiklio moduliacija yra apibūdinama atžvilgiu rezonansinio Talboto periodo atžvilgiu. Tam naudojamas bedimensis geometrijos parametras Q lygus Talboto periodo d_T ir išilginio moduliacijos periodo d_z santykiui:

$$Q = \frac{d_T}{d_z} = \frac{2n_0 {d_x}^2}{\lambda_0 d_z} \qquad (1)$$

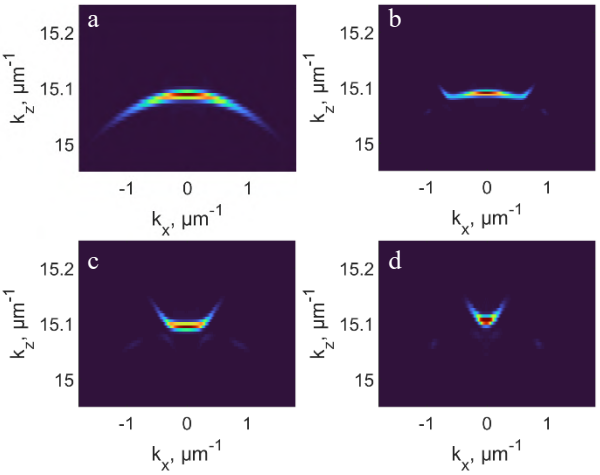
čia n_0 – tiesinis lūžio rodiklis, λ_0 – bangos ilgis vakuume, d_x – skersinis moduliacijos periodas.

Bendru atveju vienai skersinio ir išilginio moduliacijos periodo kombinacijai yra kelios propagavimo modos atitinkančios skirtingas erdvinės dispersijos kreives (1 pav.). Dažniausiai tai yra nepageidautina ir apsunkina spinduliuotės valdymą, todėl norima visą spinduliuotę projektuoti į vieną propagavimo modą. Tai galima pasiekti pradžioje naudojant didesnį išilginį moduliacijos periodą ir lėtai mažinant iki norimos vertės.



1 pav. Erdvinės dispersijos kreivės

Galima išskirti keletą skirtingų dispersijos rėžimų įvairioms moduliacijos geometrijoms. Palyginimui 2 pav. a yra pateikta dispersijos kreivė laisvo sklidimo atveju. Kai Q << 1 (2 pav. b) gaunamos didesnio kreivumo radiuso dispersijos kreivės, t. y. silpnesnė difrakcija. Didinant Q kreivumo radiusas toliau mažėja, kol dispersijos kreivė suplokštėja (2 pav. c) – matomas savikolimacijos efektas. Toliau didinant Q gaunamos priešingo ženklo dispersijos kreivės, o kreivumo radiusas vėl mažėja (2 pav. d).



2 pav. a – laisvo sklidimo erdvinės dispersijos kreivė, b - d – erdvinės dispersijos kreivės įvairioms Q vertėms (b – 0.6, c – 0.82,d – 0.95)

Taigi galima manyti, kad galima rasti tokią parametro Q vertę, kuriai esant vyktų stipri spinduliuotės difrakcija su priešingu ženklu nei Kero netiesiškumas ir būtų slopinama arba visiškai sustabdoma spinduliuotės filamentacija.

Reikšminiai žodžiai: superkotinuumas, filamentacija, fotoniniai kristalai.

Literatūra

[1] K. Staliūnas, R. Herrero, Phys. Rev. E **73**, 016601 (2006).

Metalinių paviršių tekstūravimo proceso spartinimas naudojant femtosekundinį lazerį

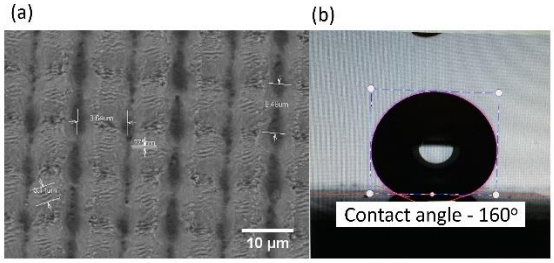
Metal surface nano-patterning process acceleration by using a femtosecond laser

Arnas Žemaitis[1,2], Gedvinas Nemickas[1,2], Gabrielius Kontenis[1,2], Deividas Čereška[1], Rokas Vargalis[1], Linas Jonušauskas[1,2]
1- Femtika Ltd., Saulėtekio al. 15, LT-10224 Vilnius
2- Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio sl. 10, LT-10223 Vilnius
arnas@femtika.lt

Paviršiai atlieka labai svarbų vaidmenį įvairiose srityse: nuo taikymo nenotechnologijų ir medicinos srityse, iki jūrų ir sunkiosios pramonės [1]. Paviršiaus hidrofobinės ir hidrofilinės savybės priklauso nuo jo tekstūros morfologios ir cheminės sandaros. Dėl savo paprastumo ir lengvo implementavimo ilgą laiką šioje srityje lyderiaujanti technologija buvo paviršių funkcionalizavimas specifinėmis medžiagomis. Visgi, kiekviena technologija turi savo ribojimus – dangos lengvai dėvisi ir praranda savo savybes, ypač jei atsiranda abrazyvinių pažeidimų [2]. Šie veiksniai riboja dangų pritaikymą srityse, kuriose yra reikalingas patvarumas ir ilgaamžiškumas, kur susiduriama su didele fizine trintimi ar kitais mechaniniais veiksniais kurie gali sutrumpinti paviršiaus gyvenimą. Taigi nauji ir tvirtesni paviršių funkcionalizavimo yra reikalingi norint išspręsti šią problemą.

Kasmet tobulėjančių femtosekundinių lazerių impulsais tekstūruojami paviršiai yra potencialus kitas žingsnis srities plėtojime [3]. Ultratrumpų impulsų, ribojančių šilumos sklidimą medžiagoje, ir skirtingų šviesos ir materijos sąveikų pagalba įmanoma paviršių tekstūruoti struktūromis siekiančiomis nanometrų skalę. Keičiant kitus lazerio parametrus, galima keisti tekstūros periodiškumą, topografinį vaizdą bei pačio paviršiaus funkciją. Be to, dėl skirtingų sąlygų gamybos metu taip pat gali atsirasti paviršiaus chemijos pokyčių, ypač jei operacija atliekama specializuotoje atmosferoje, o tai dar labiau paįvairina paviršiaus galimybių spektrą.

Vienas iš iššūkių dirbant su šia technologija yra paviršių paruošimo greitis. Šiame darbe aptariame proceso greitinimo galimybę naudojant itin galingą (200W) femtosekundinį lazerį. Metodika yra paremta pluošto išskaidymu arba dėmės didinimu bei preciziniu galvanometriniu skeneriu gebančiu išvystyti greičius didesnius nei 5 m/s. Tyrimo metu gautos įvairių topografijų paviršiaus struktūros. Galimybė pasiekti hierarchines tekstūras (nuo nanometrų iki mikrometrų eilės) pavaizduota 1 pav. Pademonstruotas paviršiaus topografijos ir funkcijos pokytis naudojant skirtingus lazerio parametrus.



1 pav. (a) – Metalinio paviršiaus su hierarchinėmis struktūromis, suformuotomis naudojant femtosekundinį lazerį nuotrauka padaryta naudojant skenuojantį elektronų mikroskopą; (b) – vandens lašelis padėtas ant šio paviršiaus ir demonstruojantis šio paviršiaus superhidrofobiškumą (kontaktinis kampas lyus 160°).

Reikšminiai žodžiai: femtosekundinis lazeris, metalinių paviršių funkcionalizavimas

Literatūra

[1] S. S. Latthe, A. B. Gurav, C. S. Maruti, R. S. Vhatka, Recent Progress in Preparation of Superhydrophobic Surfaces: A Review, J. Surf. Eng. Mater. Adv. Technol., 2(2), 18791, (2012).
[2] T. Verho, C. Bower, P. Andrew, S. Franssila, O. Ikkala, R. H. A. Ras, Mechanically Durable Superhydrophobic Surfaces, Adv. Mater., 23(5), 673-678, (2011).
[3] C. Wang, H. Huo, M. Johnson, M. Shen, E. Mazur, The thresholds of surface nano-/micro-morphology modifications with femtosecond laser pulse irradiations, Nanotechnology, 21, 075304, (2010).

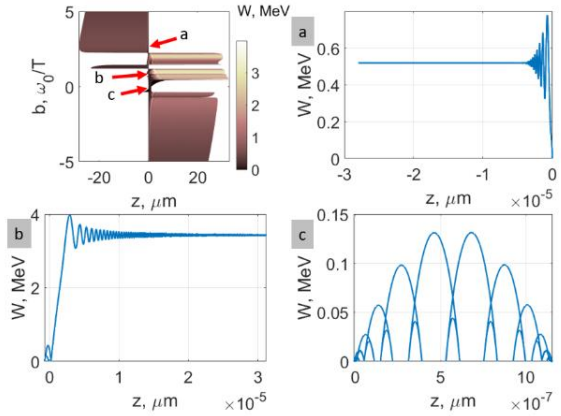
Elektronų greitinimas čirpuotais radialinės poliarizacijos impulsiniais šviesos pluoštais

Acceleration of electrons with radially polarized chirped pulsed light beam

Sergejus Orlovas, Klemensas Laurinavičius, Justas Berškys
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Koherentinės optikos laboratorija, Saulėtekio al 3, LT-10257 Vilnius
sergejus.orlovas@ftmc.lt

Elektringųjų dalelių greitinimas naudojant vektorinius impulsinius lazerio pluoštus yra sritis, kuri pastaraisiais metais vis labiau susilaukia dėmesio. Ypač įdomus yra radialinės poliarizacijos pluoštas, kuris ir teoriškai, ir eksperimentiškai stebint elektronų dinamiką parodė daug žadančių rezultatų [1]. Šiame darbe nagrinėjame radialinės poliarizacijos čirpuotus impulsinius pluoštus ir tiriame, kaip skirtingos čirpo vertės, pluošto matmenys, pluošto galia ir pradinė fazė veikia pavienio elektrono greitinimo dinamiką.

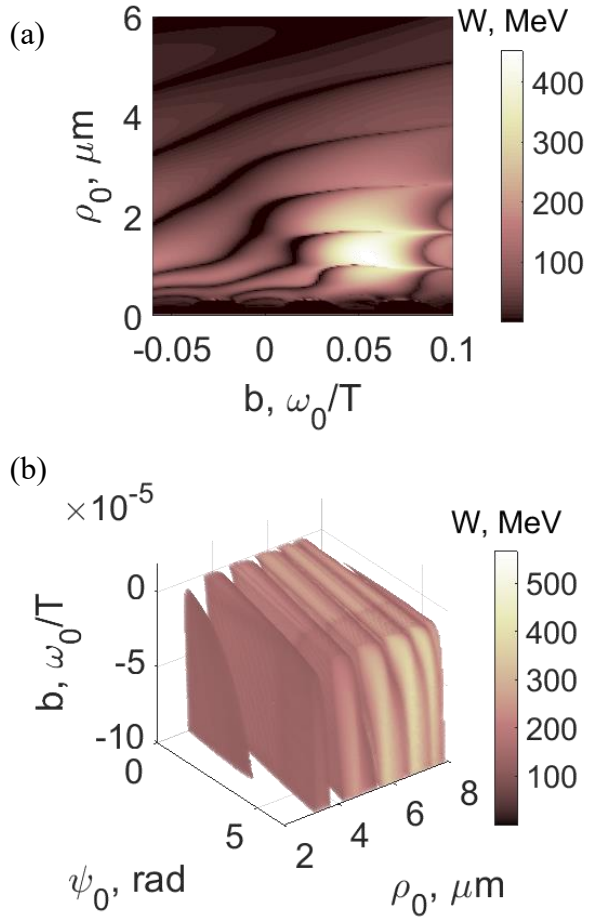
Pasirodo, galimi 3 skirtingi scenarijai (1 pav.). Pirmoji situacija jau yra žinoma, nes elektronas pagreitėja pluošto sklidimo kryptimi. Paaiškėjo, kad elektronas gali būti efektyviai pagreitintas čirpuojant impulsinį pluoštą kryptimi, priešinga pluošto sklidimui. Be to, buvo pastebima dar viena situacija, kai elektrono trajektorija užsidaro pluošto židinio aplinkoje. Šiuo atveju elektronas periodiškai stumiamas į priekį ir atgal.



1 pav. Pavienio elektrono dinamikos priklausomybė nuo laikinio čirpo *b* ir atstumo *z*, kurį elektronas pasiekia pasibaigus simuliacijos laikui 10 ps. Krentančio pluošto galia yra 1 PW. Grafike pažymėtos 3 situacijos (a,b,c), kuomet elektronas greitinamas atgal (a), į priekį (b) ir osciliuoja židinio aplinkoje (c).

Darbe yra apžvelgiamos skirtingų galių sąlygotos situacijos. Kuomet galios mažos, pavienių elektronų greitinimo dinamikos pobūdis yra simetriškas čirpo ženklo atveju. Greitinančio pluošto galioms didėjant stebime asimetrinį elektrono elgesį greitinimo scenarijuje. Pasiekus didesnes galias, teigiamas čirpas sąlygoja elektrono greitinimą kryptimi priešinga greitinančio pluošto sklidimo krypčiai. Kuomet čirpas yra teigiamas, pagrinde vyksta greitinimas ta pačia kryptimi, kuria sklinda pluoštas.

Galiausiai mes tiriame maksimalią elektrono kinetinę energiją, kurią įgalina įvairios čirpo, pluošto pločio ir galios vertės. Kaip taisyklė, teigiamas čirpas sąlygoja efektyvesnį greitinimą, tačiau neigiamas čirpas taipogi gali pagerinti situaciją, lyginant su nečirpuotu atveju (2 pav.)



2 pav. (a) Pavienio elektrono kinetinės energijos priklausomybė nuo laikinio čirpo *b* ir pluošto matmens ρ_0, kurį elektronas pasiekia pasibaigus simuliacijos laikui 10 ps. (b) Pavienio elektrono kinetinės energijos priklausomybė nuo laikinio čirpo *b* ir pluošto matmens ρ_0, ir krintančio pluošto pradinės fazės φ_0, kurį elektronas pasiekia pasibaigus simuliacijos laikui 10 ps. Krentančio pluošto galia yra 1 PW.

Reikšminiai žodžiai:poliarizacija, elektronų greitinimas, laikinis čirpas, impulsinis pluoštas

Literatūra

[1] L. J. Wong, and F. X. Kärtner. Optics express **18,** 25035-25051, (2010).

Aberacijų korekcija Besselio-Gauso pluošto fokusavimui į mažo diametro stiklinį cilindrą

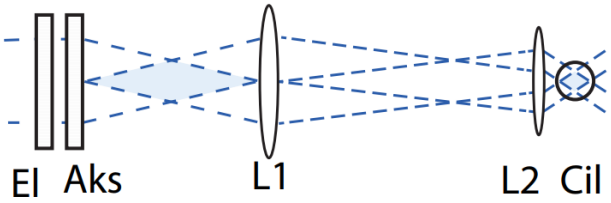
Aberration correction for focusing Bessel-Gauss beam into a small diameter glass cylinder

Justas Baltrukonis[1], Sergej Orlov[1], Vytautas Jukna [1,2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
[2]Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
justas.baltrukonis@ftmc.lt

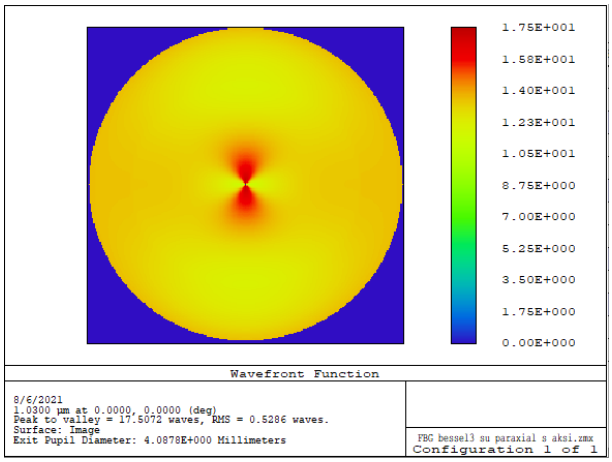
Lazerinis mikroapdirbimas ultra-trumpųjų impulsų lazeriais jau kurį laiką yra vienas iš pagrindinių metodų skaidrių medžiagų apdirbime. Dėl netiesinės (daugiafotonės, griūtinės) sugerties vienu ir tuo pačiu lazeriu galima apdirbti įvairias medžiagas bei išlaikyti gerą apdirbimo kokybę minimizuojant terminius efektus. Skaidrių medžiagų apdirbimo atveju, kai lazeriu fokusuojama į medžiagos turį naudojami tik ypač lygūs ir gerai poliruoti bandiniai, kitu atveju paviršius įneša stiprias pluošto aberacijas, sumenkinant apdirbimo kokybę, o kartais pluoštas taip sugadinamas, kad net neįmanoma atlikti lazerinio mikroapdirbimo.

Viena iš sparčiai populiarėjančių skaidrių terpių mikroapdirbimo sričių yra specialaus lazerinio pluošto formavimas siekiant geresnių ar efektyvesnių procesų, pavyzdžiui, sferinių aberacijų korekcija tūriniam markiravimui [1], Beselio-Gauso pluošto sukūrimas medžiagų pjovimui [2]. Tiesa, universalaus, beaberacinio pluošto nėra, net ir lygus paviršius ar jo pokrypis įneša aberacijas, kurios dažniausiai kompensuojamos specialiomis fazinėmis, ar amplitudinėmis kaukėmis modifikuojant krentantį bangos frontą pasitelkiant erdviniais šviesos moduliatoriais ar kita specialia optika [3]. Toks manipuliavimas pluoštu leidžia lazerinį mikroapdirbimą pritaikyti vis platesniam užduočių kiekiui, tokių kaip anksčiau minėtas stiklo pjovimas, Brego gardelių įrašymas Beselio-Gauso pluoštais [4]. Tokiems taikymams korekcija bangos frontui (Beselio-Gauso pluošto formavimui, Sferinių aberacijų kompensavimui) dažniausiai skaičiuojama analitiškai. Tačiau cilindrinių ar kitų asimetrinių kūnų atveju skaičiavimai tampa sudėtingi, o rezultatai netrivialūs, todėl naudojami įvairūs iteraciniai ar optimizaciniai metodai. Šie metodai leidžia įskaityti ir naudojamų lęšių netobulumus, kurie gali turėti didelę įtaką ypatingai kuomet pluoštas fokusuojamas labai aštriai.

Šio darbo tikslas yra rasti bangos frontą formuojantį elementą Beselio-Gauso pluošto fokusavimui į mažo diametro skaidrų cilindrą. Principinė sistemos schema pateikta 1 pav., kur Beselio-Gauso pluoštas kuriamas aksikonu ir yra atvaizduojamas mažinančia 4f sistema į cilindrinį kūną. Bangos frontą formuojantis elementas El skaičiuotas optimizacine programa Zemax, o gautas bangos frontas, reikalingas aeracijų korekcijai pavaizduotas 2 pav. Vėlesniame darbe bus surinkta optinė schema gebanti valdyti pluošto fazę ir siekiama ją pritaikyti kompensuoti aberacijas atsirandančias fokusuojant pluoštą į cilindro vidų. Šia sistema bus siekiama sukurti lūžio rodiklio pokyčius šviesolaidžio šerdyje taip įrašant norimo pralaidumo Brego gardeles.



1pav. Principinė optinės sistemos schema. El – bangos frontą formuojantis elementas, Aks – aksikonas, L1 ir L2 – 4f sistemos lęšiai, Cil – cilindrinis kūnas. Mastelis neišlaikytas.



2 pav. Optimizacijos metu gautas bangos frontas reikalingas Beselio-Gauso pluošto fokusavimui į cilindrinį kūną naudojant realius eksperimente naudojamus optinius elementus.

Reikšminiai žodžiai: Beselio-Gauso pluoštas, Zemax, aberacijų, korekcija, spindulinė optika, cilindrinis kūnas.

Literatūra

[1] Richard D. Simmonds, Patrick S. Salter, Alexander Jesacher, and Martin J. Booth, Opt express 19.24 24122-24128 (2011).
[2] M. Bhuyan, O. Jedrkiewicz, V. Sabonis, M. Mikutis, S. Recchia, A. Aprea, M. Bollani, P. Di Trapani, Appl. Phys. A 120(2), 443–446 (2015).
[3] Jenne, M., Flamm, D., Ouaj, T., Hellstern, J., Kleiner, J.,Grossmann, D., Koschig, M., Kaiser, M., Kumkar, M. and Nolte, S. Opt. 43(13), 3164-3167. (2018)
[4] M. Mikutis, T. Kudrius, G. Šlekys, D. Paipulas, S. Juodkazis, Opt Materi Express 3 (11), 1862–1871 (2013).

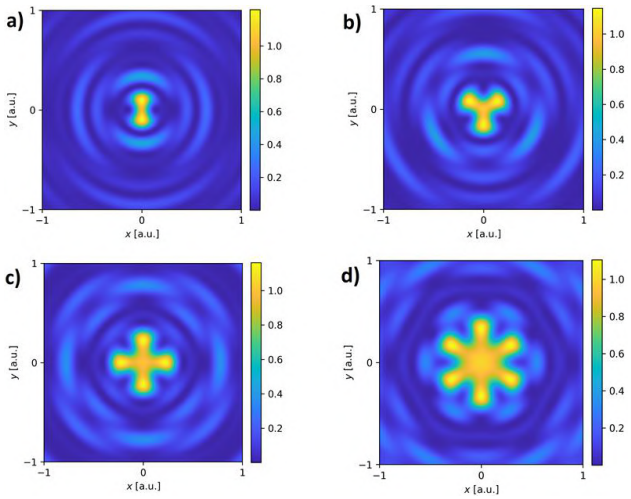
Sūkurinių Beselio pluoštų superpozicijų pritaikymas skaidrių terpių mikroapdirbimui

Superimposed Bessel beams for transparent material modification

Erminas Kozlovskis[1, 2], Paulius Šlevas[1,2], Sergej Orlov[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio Al. 3, Vilnius;
[2]Workshop of Photonics, Mokslininku g. 6A, Vilnius.
erminas.kozlovskis@gmail.com

Per pastaruosius dešimtmečius lazeriai tapo nepakeičiama priemone medžiagų mikroapdirbimo ir pramonės srityse. Jie suteikė labai kryptingą ir lokalizuotą energijos šaltinį, kuris palengvino preciziską medžiagų modifikavimą bet kuriame medžiagos taške [1]. Gerai žinoma, kad medžiagos sąveika su lazerio pluoštu priklauso nuo krintančios pluošto bangos ilgio, impulso trukmės, pasikartojimo dažnio, pluošto formos, bei pačios medžiagos savybių. Dėl generavimo paprastumo mikroapdirbimui dažniausiai yra naudojama fundamentalioji Gauso pluošto moda [2]. Tačiau Gauso pluoštas turi trūkumų: jo židinio taškas ir poveikio zoną (Reilėjaus ilgis) priklauso nuo pluošto bangos ilgio ir naudojamo optinio elemento skaitinės apertūros. Tai reiškia, kad tradiciniam objektyvui, mažas židinio taško dydis atitinka trumpą poveikio zoną [3]. Kadangi skaidrių medžiagų apdirbime reikalingi pluoštai, kurie formuotų ilgus ir siaurus plazmos kanalus, tai atsirado pluoštų, kurie tapo pranašesniais už Gausinę modą. Viena iš tokių alternatyvų yra įvairių eilių Beselio pluoštai [3]. Šie pluoštai yra ypatingi tuo, kad sklisdami terpe nepatiria difrakcijos ir turi žymiai ilgesnę poveikio sritį palyginus su Gausiniais pluoštais [4]. Nulinės eilės Beselio pluoštai centre turi intensyvumo maksimumą, o aukštesnių eilių Beselio pluoštų centre yra tamsi dėmė - intensyvumo minimumas, apsuptas pakaitiniais ryškiais ir tamsiais žiedais [5]. Be to, aukštesnės eilės Beselio pluoštai turi sraigtinį fazės frontą, dėl ko dar yra vadinami optiniais sūkuriais ir pasižymi orbitiniu judesio kiekio momentu [6]. Dėl šios savybės, optiniai sūkuriai yra plačiai naudojami optinėse gaudyklėse ir atomų mikromanipuliacijose [7], bei optinėje komunikacijoje [8]. Taip pat egzistuoja ir sudėtiniai sūkuriniai pluoštai, kurie susidaro vykstant dviejų ar daugiau, skirtingus topologinius krūvius turinčių, optinių sūkurių superpozicijai. Tokie pluoštai pasižymi unikalių formų intensyvumo skirstiniais ir turiningesne sūkurių struktūra, nei atskiri sudedami pluoštai.

Šiame darbe mes demonstruojame būdą sukūrti dvejų skirtingų topologinių krūvių bei erdvinių dažnių Beselio pluoštų superpozicijas. Iš pradžių buvo atliktas tokių pluoštų skaitmeninis modeliavimas. Norėdami patikrinti modeliavimo rezultatus, mes atkartojome šiuos pluoštus eksperimentiškai erdvinio šviesos moduliatoriaus pagalba. Galiausiai lydyto kvarco bandinyje buvo įrašyta sudėtinio pluošto fazinė kaukė, taip sukuriant geometrinės fazės elementą, kurio pagalba šie pluoštai gali būti naudojami skaidrių medžiagų lazeriniam mikroapdirbimui.



1 pav. Skaitmeniškai sumodeliuoti sudėtinių sūkurinių Beselio pluoštų intensyvumų skirstiniai. Visais atvejais topologinis krūvis n = 0 ir kūgio kampas θ_1 = 0,52 rad, o m ir θ_2 atitinkamai yra lygūs: a) 2 ir 0,26 rad; b) 3 ir 0,17 rad; c) 4 ir 0,12 rad; d) 6 ir 0,08 rad.

Literatūra

[1] J. Wilson and, J.F.B. Hawkes.Lasers, *Principles and Applications*. Prentice-Hall inter national series in optoelectronics. Prentice Hall, 1987.
[2] Inam Mirza, Nadezhda M. Bulgakova, Jan Tomáštík, Václav Michálek, Ondřej Haderka, Ladislav Feketeand Tomáš Mocek. "Ultrashort pulse laser ablation of dielectrics: Thres-holds, mechanisms, role of breakdown". *Scientific Reports* 6.1 (2016).
[3] Pinghui Wu, Chenghua Suiand Wenhua Huang. "Theoretical analysis of a quasi-Besselbeam for laser ablation". *Photonics Research* 2.3 (2014).
[4] D.McGloin and K.Dholakia. „Bessel Beams: Diffraction in a new light". *Contemporary Physics* 46.1 (2005).
[5] Ronald Rop, Angela Dudley, Carlos López-Mariscal and Andrew Forbes. "Measuring therotation rates of superpositions of higher-order Bessel beams". *Journal of Modern Optics* 59.3 (2012).
[6] Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuwand J. P. Woerdman. "Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes". *Physical Review A* 45.11 (1992).
[7] Garcés-Chávez, K. Volke-Sepulveda, S. Chávez-Cerda, W. Sibbettand K. Dholakia. "Transfer of orbital angular momentum to an optically trapped low-index particle". *Physical Review A* 66.6 (2002).
[8] Jian Wang, Jeng-Yuan Yang, Irfan M. Fazal, Nisar Ahmed, Yan Yan, Hao Huang, Yon-gxiong Ren, Yang Yue, Samuel Dolinar, Moshe Turandet al. "Terabit free-space datatransmission employing orbital angular momentum multiplexing". *Nature Photonics* 6.7 (2012).

OPTINIŲ FEMTOSEKUNDINIŲ IMPULSINIŲ AIRY PLUOŠTŲ GENERAVIMAS FAZINIŲ ELEMENTŲ PAGALBA

GENERATION OF OPTICAL FEMTOSECOND PULSED AIRY BEAMS WITH THE HELP OF PHASE ELEMENTS

Karolis Mundrys[1], Sergejus Orlovas[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257, Vilnius
karolis.mundrys@ftmc.lt

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

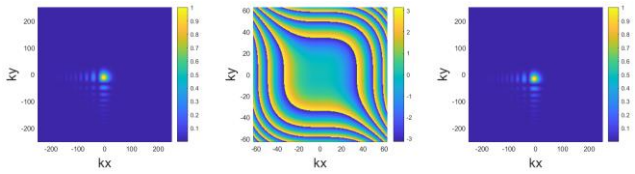
Dar 1979 m. buvo pastebėta, jog laisvą dalelę aprašančios Šriodingerio lygties sprendinys gali turėti bangų paketą, kuris matematiškai apibrėžiamas pasinaudojus Airy funkcija [1]. Toks sprendinys yra aprašomas šraiška:

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

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

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

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

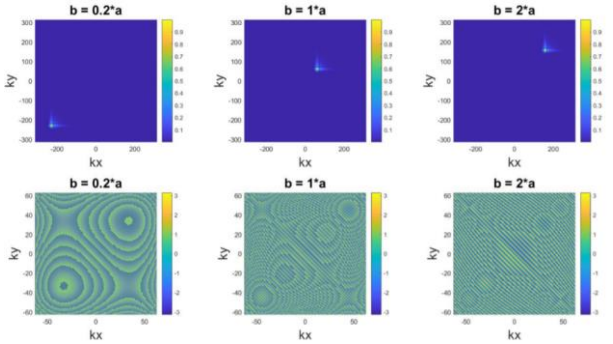


1 pav. Analitiškai apskaičiuoto Airy pluošto elektrinio lauko skirstinys (a). Kubinės fazės kaukė (b). Su kubine fazės kauke skaitmeniškai sugeneruoto Airy pluošto elektrinio lauko skirstinys (c).

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

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

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

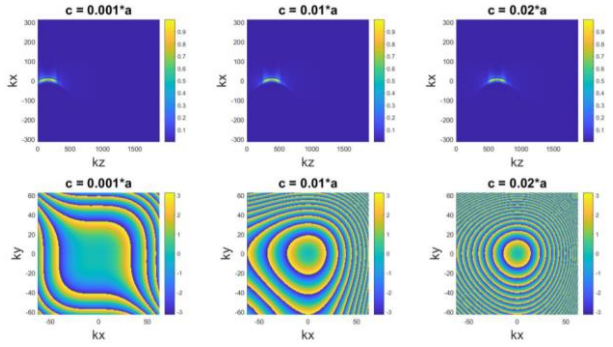


2 pav. $b(x+y)$ nario įtaka Airy pluoštui (viršuje). Atitinkamai naudota tolydi fazinė kaukė (apačioje).

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

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

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



3 pav. $c(x^2+y^2)$ nario įtaka Airy pluoštui. Rezultatai XZ plokštumoje (viršuje). Atitinkamai naudota kaukė (apačioje).

Reikšminiai žodžiai: difrakcinis elementas, Airy pluoštas, nedifraguojantis pluoštas.

Literatūra

[1] Berry, M. V., & Balazs, N. L. Nonspreading wave packets. American Journal of Physics, 47(3), 264– 267. (1979)
[2] Wei, Bing-Yan, et al. Polarization-controllable Airy beams generated via a photoaligned directorvariant liquid crystal mask. Scientific reports, 5.1: 1-8. (2015)

Sanjako efektu pagrįstas optinis izoliatorius

Optical isolator based on Sagnac effect

Jaroslav Kodz, Kęstutis Regelskis, Nikolajus Gavrilinas, Julijanas Želudevičius[1]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
jaroslav.kodz@ftmc.lt

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

Daugumos praktikoje naudojamų optinių izoliatorių veikimo principas yra pagrįstas Faradėjaus efektu [2], kai pirmyn ir atgal skaidria medžiaga sklindančios šviesos poliarizacijos orientacija keičiama išoriniu magnetiniu lauku. Egzistuoja ir kiti fizikiniai reiškiniai leidžiantys realizuoti neapgręžiamąjį šviesos perdavimą, tokie kaip: Ramano stiprinimas, stimuliuota Brillouino sklaida, parametrinė generacija, dinaminiai procesai (pvz. lūžio rodiklio moduliavimas laike), Fezeau efektas [3]. Šiame darbe, mūsų žiniomis pirmą kartą pasaulyje, pademonstravome naujo tipo optinį izoliatorių, pagrįstą Sanjako efektu. Pradiniam koncepcijos patikrinimui ir efekto pademonstravimui pasirinkome skaidulinę konfigūraciją. Skaidulinis žiedinis interferometras gali būti pagamintas iš ilgos skaidulos, o Sanjako fazės pokytis yra proporcingas skaidulos vijų skaičiui. Tokiu būdu galima ženkliai sumažinti sukimosi greitį. Didelis sukimosi greitis kartu su reikalingu aukštu mechaniniu tikslumu ir stabilumu yra vienas iš sudėtingiausiai praktiškai realizuojamu uždavinių.

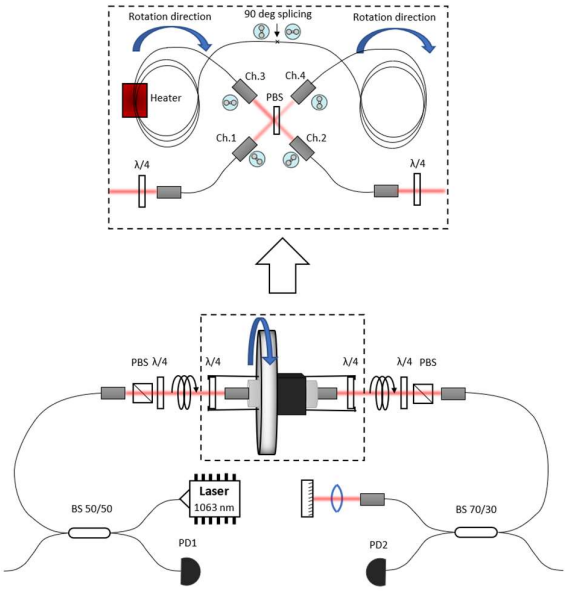
Ankstesniuose tyrimuose buvo sumodeliuotos skaidulinės konfigūracijos izoliatoriaus charakteristikos. Eksperimentiškai buvo išmatuotos skaidulinio Sanjako izoliatoriaus temperatūrinio ir mechaninio fazės skirtumo derinimo konstantos. Imituojant Sanjako efekto sukeltą fazės poslinkį (šildant skaidulą), eksperimentiškai buvo išmatuota skaidulinio Sanjako izoliatoriaus izoliacija 24,2 dB ir pralaidumo nuostoliai tiesiogine kryptimi 2,1 dB. Pagal parametrus tai beveik atitinka standartinio vienos pakopos skaidulinio Faradėjaus izoliatoriaus charakteristikas. Taipogi buvo nustatyta fazės derinimo su temperatūra konstanta - 191 cm °C (skaidulos tipas PM980, Corning);

Tačiau fazės poslinkis indukuotas šildant skaidulą nesukūria neapgręžiamumo sąlygos ir todėl negali būti naudojamas optiniame izoliatoriuje, todėl visas eksperimentas buvo pakartotas sumontavus skaidulinį žiedinį interferometrą ant greitai besisukančio disko. Dėl Sanjako efekto įnešamas fazių poslinkis $\pm\pi/2$ radianų, kuris yra apskaičiuojamas pagal formulę (1).

$$\Delta\varphi \approx \frac{8\pi S\Omega}{\lambda c} \quad (1)$$

Tarp priešpriešais sklindančių žiediniame interferometre šviesos pluoštų yra įnešamas papildomas fiksuotas fazių poslinkis $\pi/2$ radianų, rezultate gaunant suminį fazės poslinkį π arba 0 radianų.

Skaidulinio žiedinio interferometro schema yra sudaryta iš dviejų poliarizaciją išlaikančios optinės skaidulos atkarpų, sujungtų taip, kad jų poliarizacijų ašys būtų statmenos. Siekiant skaidulinį židinį interferometrą pritaikyti optiniam izoliatoriui, būtina, kad priešingomis kryptimis sklindančios modos būtų statmenai poliarizuotos ir jos interferometre nusklistu vienodus optinius kelius. Papildomai abejų atkarpų skaidulų ilgių skirtumas yra kompensuojamas pašildant vieną atkarpą.



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

Reikšminiai žodžiai: optinis izoliatorius, Sanjako efektas, neapgręžiamas šviesos perdavimas.

Literatūra

[1] D. Jalas, A. Petrov, M. Eich, W. Freude, Sh. Fan, Z. Yu, R. Baets, M. Popovič, A. Melloni, J. D. Joannopoulos, M. Vanwolleghem, Ch. R. Doerr, H. Renner, What is - and what is not - an optical isolator, Nature Photon, 7(8): 579–582, July 2013.

[2] A.K. Zvezdin, V.A. Kotov, Modern Magnetooptics and Magnetooptical Materials, 1 ed.; Taylor & Francis Group: New York, NY, USA, 1997; pp. 1–109

[3] Maayani, S., Dahan, R., Kligerman, Y. et al. Flying couplers above spinning resonators generate irreversible refraction. Nature 558, 569–572 (2018).

Dinaminis aukštesnės eilės Beselio pluoštų maišymas – optinio grąžto formavimas

Dynamic higher order Bessel beam mixing – the formation of an optical drill

Gabrielius Kontenis[1], Darius Gailevičius[1], Kęstutis Staliūnas[1,2,3]
[1]Vilniaus Universitetas, Fizikos Fakultetas, Lazerinių Tyrimų Centras, Saulėtekio alėja 10, Vilnius, Lietuva
[2]ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barselona, Ispanija
[3]UPC, Dep. de Fisica, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barselona), Ispanija

gkontenis@gmail.com

Viena iš pagrindinių lazerinio medžiagų apdirbimo tendencijų yra struktūrizuotų lazerio pluoštų naudojimas. Be įprastų Gauso pluoštų vis dažniau panaudojami egzotiškesni pluoštai. Vienas iš tokių pavyzdžių yra Beselio pluoštas su ilgesne židinio zona ir savigydos savybėmis [1]. Kitas pastebimas pavyzdys - sūkurinės pluoštai su sraigtiniais bangų frontais ir tamsia, nulinio intensyvumo zona išilgai optinės ašies.

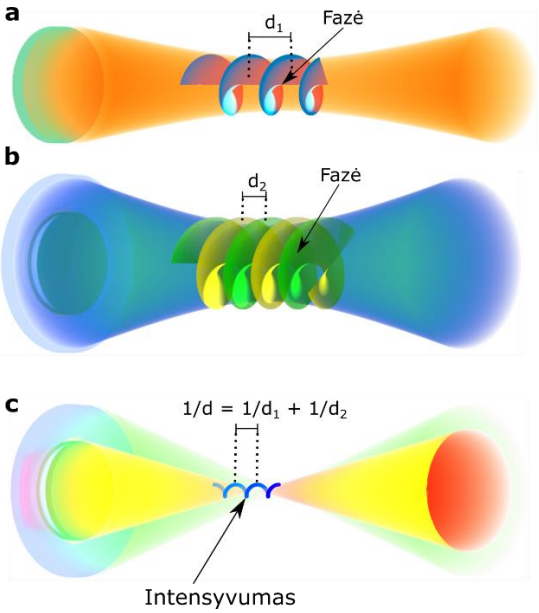
Aukštesnės eilės Beselio pluoštus galima suformuoti panaudojant eksikono ir spiralinės fazinės plokštelės kombinaciją [2] arba atitinkamai atvaizduoti jų bendrą hologramą ant skystųjų kristalų fazinio moduliatoriaus ekrano. Jei fazinės kaukėje yra fazinis šuoliukas, t.y. staigus fazės pasikeitimas per 2π, tada sukurtas Bessel'io pluoštas yra spiralinis. Fazinė kaukė paprasčiausiu atveju yra:

$$\varphi = (\alpha_1 r) / \lambda + m_1 \theta \qquad (1)$$

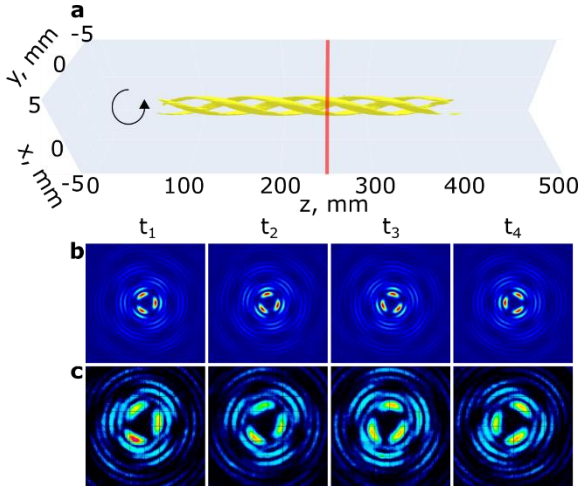
, čia α_1 yra radialinis fazės nuolydis aprašantis eksikono kampą, o $m_1 = \pm 1 \pm, 2, \pm 3\ldots$ yra topologinis krūvis arba sraigtas – aprašantis judesio kiekio momentą. Suvedus du Beselio pluoštus erdvėje gaunama judviejų interferencija, kuri formuoja trimatį edrvėje užsuktą skirstinį – spiralę. Jeigu dviejų Beselių topologiniai krūviai skiriasi $|m_1\text{-}m_2| = 1$, tada gaunama vieno intensyvumo maksimumo spiralė (1 pav. **c**). Paprastai m-spiralinis pluoštas gaunamas $m = |m_1\text{-}m_2|$ (pvz., kamščiatraukis yra vienguba spiralė, o DNR arba tipiškas mechaninis grąžtas yra dviguba spiralė). Keičiant topologinių krūvių ženklus, keičiasi intensyvumo profilio orientacija, chirališkumas.

Abu Beselio pluoštai yra suformuoti ant to pačio optinio komponento - fazinės kaukės, susidedančios iš dviejų dalių (vidinės ir išorinės). Tokia kaukė sudaro stacionarų optinio grąžto pluoštą. Gautas erdvinių bangų trukdžių modelis iš dviejų fazių spiralių ir gautas vyniojimosi erdvinis periodas yra $1/d = 1/d_1\text{-}1/d_2$. Kur d_1 ir d_2 yra atitinkamų Beselio fazių erdviniai periodai.

(2 pav. **a**) pavaizduotas dviejų interferuojančių Beselio pluoštų, kurių topologiniai krūviai yra 4 ir 7, trimatis intensyvumo pasiskirstymas. Keičiant fazinės hologramos orentaciją, galima indukuoti bendrą pluošto sukimąsi laike.



1 pav. Aukštesnės eilės Beselio pluoštų interferencijos modelis



2 pav. Laike kintančio optinio grąžto trimatis atvaizdavimas ir skersiniai pjūviai.

Reikšminiai žodžiai: erdvinis šviesos modulatorius, kompiuteriu generuojamos hologramos, aukštesnės eilės Besselio pluoštai.

Literatūra

[1] W. Cheng and P. Polynkin, J. Opt. Soc. Am. B 31, C48-C52 (2014).
[2] R. Vasilyeu, A. Dudley, N. Khilo, and A. Forbes, Opt. Express 17, 23389-23395 (2009).

Paviršinių bangų pritaikymas erdviniam filtravimui pasitelkus plonasluoksniais bangolaidžiais

Surface band edge modes of periodic waveguides for spatial filtering

Ignas Lukošiūnas[1,*], Darius Gailevičius[1], Kęstutis Staliūnas[1,2,3]
[1]Vilniaus universitetas, fizikos fakultetas, lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223, Vilnius
[2] ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain
[3] UPC, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona), Spain
[*]ignas.lukosiunas@ff.vu.lt

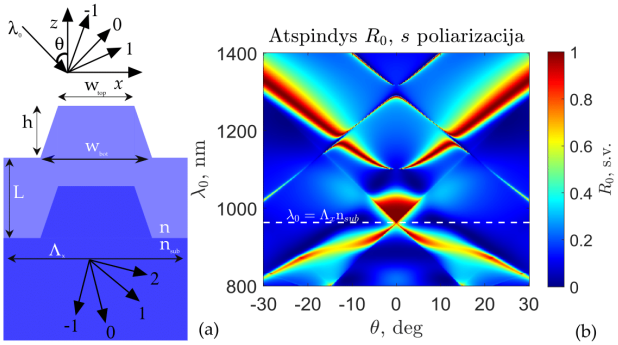
Vienas iš svarbių mechanizmų lazerinių pluoštų erdvinę kokybę patobulinti yra erdvinio filtravimo pritaikymas lazerinėse rezonatorių sistemose. Įprastuose lazeriniuose įtaisuose naudojama konfokalinė lęšių sistema su diafragma, kurią tinkamai suderinus realizuojamas filtravimas. Tačiau toks mechanizmas nėra tinkamas mikrolazerių sistemoje dėl savo nekompaktiškumo, todėl šią problemą siekiama spręsti pasitelkus nanofotonikos įtaisais – fotoniniais kristalais.

Fotoniniai kristalai yra periodinės mikrostruktūros, pasižyminčios unikalia savybe kontroliuoti poliarizuotos šviesos charakteristikas. Kaip ir joninė gardelė, kuri pasižymi atrankia dispersija - esti draudžiami energijos juostų tarpai ir elektronai su energija, kuri patenka į šiuos tarpus, negali egzistuoti gardelėje bei turi būti atspindėti. Analogiškai fotoniniai kristalai pasižymi draudžiamais fotonų energijų juostų tarpais, kuriuose atitinkantys šviesos kvantai negali sklisti fotoniniame kristale, taip pasižymintys aukšta atspindžio tikimybe nuo moduliuotos fotonines strukturos. Šią juostą galima valdyti keičiant kristalo geometrinius parametrus bei jose esančias medžiagas, t.y., lužio rodiklio skirstinį.

Siekiant išspręsti erdvinio filtravimo užduotį, reikia sukurti fotoninių kristalų dizainus sprendžiant Maksvelio lygtis modeliuojant pralaidumo/ atspindžio kampinius spektrus skirtingoms difrakcijos eilėms. Dėl paprastumo bei didelio kompiuterinio skaičiavimo greičio naudojamasi RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis) programa su sklaidos matricos implementacija [1].

Šiame darbe nagrinėjama trapecinės formos, skersiniu periodiškumu pasižyminti gardelė, kuri sudaryta iš vienos L storio dangos. Gardelės profilio schema nurodyta 1 pav. (a). Ją žadinant plokščia monochromatine banga galima stebėti aibę reiškinių, kurias galima valdyti keičiant gardelės geometrinius parametrus. Aštrūs atspindžių skirstiniai, kurie siekia 100 %, yra identifikuoti kaip Fano rezonansai. Atlikta skaitmeninė analizė parodo [2], kad, pasireiškus šiems rezonansams, atspindima dalis kritusios spinduliuotės siaurame spektro ruože ir labai mažame kampiniame intervale. Likusioji spinduliuotės dalis yra praleidžiama nulinės eilės difrakcijos eilėje. Tai yra tokie rezonansai, kuomet laukas, lygiagretus gardelės dryžiams, skersai sklinda dangos viduje. Kita vertus, kitos rūšies reiškinys, kuomet laukas lygiagretus gardelės dryžiams, nors yra atspindimas nuo gardelės atgal į orą, yra lokalizuotas substrate. Tokias lauko modas galima vadinti paviršinėmis. Viena svarbių savybių yra ta, kad atspindžio kampinis spektras turi kontinuumą. Tai turi ypatingą svarbą erdviniam filtravimui lazerinių diodų sistemose, kuomet dėl fabrikavimo netobulumų centrinis spinduliuojamas bangos ilgis lazerinėje diodinėje sistemoje yra išderinamas spektre.

Šiame darbe yra nustatyta, jog atspindžio kontinuumas nusako ribą tarp aukštesnės ($m = \pm 1$) eilės difrakcijos maksimumų. Taipogi atrasta, jog atspindžio kontinuumo pozicija priklauso nuo $\Lambda_x n_{sub}$ bangos ilgio tiesiškai, kas užtikrina labai patogų dizaino kūrimą. Tarp kitko keičiant uždėto sluoksnio storį galima generuoti aštrius Fano rezonansus nuo šio pagrindinio bangos ilgio.



1 pav. Trapecinės gardelės elementarusis narvelis (a) bei nulinės eilės kampinis atspindžio spektras (b) geometriniams parametrams $h = 230$ nm, $L = 580$ nm, $w_{top} = 300$ nm, $w_{bot} = 375$ nm, $\Lambda_x = 640$ nm, lūžio rodikliams $n = 2.2$, $n_{sub} = 1.5$.

Reikšminiai žodžiai: erdvinis filtravimas, fotoninis kristalas, bangolaidis, paviršinės bangos.

Literatūra

[1] Raymond C. Rumpf, "Improved Formulation of Scattering Matrices for Semi-Analytical Methods That Is Consistent with Convention," Progress In Electromagnetics Research B, Vol. 35, 241-261, 2011.
[2] L. Grineviciute, J. Nikitina, C. Babayigit, K. Staliunas, Applied Physics Letters 118, 131114, 2021

Didelio pasikartojimo dažnio žalia šviesa žadinamo superkontinuumo generacija ir optinis pažeidimas CaF_2 ir BaF_2 kristaluose

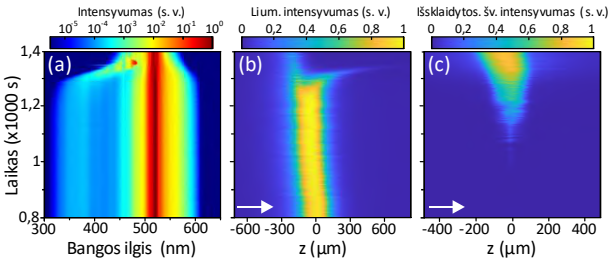
High repetition rate green-pumped supercontinuum generation and multipulse optical damage in CaF_2 and BaF_2

Vaida Marčiulionytė[1], Vytautas Jukna[1], Gintaras Tamošauskas[1], Audrius Dubietis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
vaida.marciulionyte@ff.vu.lt

Superkontinuumo generacija yra netiesinės optikos reiškinys, kai labai plataus ir tolydaus spektro koherentinė spinduliuotė yra formuojama didelės smailinės galios lazerio impulsams sklindant skaidria netiesine terpe [1]. Vienas sudėtingiausių uždavinių yra superkontinuumo generacija ultravioletinėje (UV) spektro srityje, nes trūksta plačiu draustinės energijos tarpu, maža chromatine dispersija ir dideliu skaidrumo langu pasižyminčių medžiagų bei žinių apie optimalias eksperimento sąlygas. Labiausiai superkontinuumo spektras į UV pusę plinta šarminių metalų fluoriduose, tačiau veikiant net žemu (1 kHz) impulsų pasikartojimo dažniu yra sparčiai kuriami spalviniai centrai, kurie išsivysto į katastrofinį medžiagos pažeidimą. Dėl to, BaF_2 ir CaF_2, kristalai turi būti nuolat sukami arba transliuojami skersai lazerio pluoštui esant standartinėms (aštriai fokusuojant) žadinimo sąlygoms [2-4]. Tačiau iki šiol superkontinuumo generacijos tyrimų BaF_2 ir CaF_2 kristaluose esant didesniam nei 1 kHz pasikartojimo dažniui dar nebuvo atlikta.

Šiame darbe buvo ištirti superkontinuumo generacijos dėsningumai netransliuojamuose 25 mm ilgio BaF_2 ir CaF_2 kristaluose esant švelniam (NA = 0,004) fokusavimui, žadinant antrosios Yb:KGW lazerio harmonikos (150 fs, 515 nm) impulsais esant 10 kHz pasikartojimo dažniui. Gauti rezultatai buvo lyginami su aštraus (NA = 0,012) fokusavimo sąlygomis generuojamu superkontinuumu netransliuojamuose 6 mm ilgio BaF_2 ir 5 mm ilgio CaF_2 kristaluose.

Tyrimo metu buvo išmatuota didžiausia superkontinuumo spektro plėtra į UV sritį (iki ~300 nm) CaF_2 kristale, o BaF_2 kristale spektras išplito iki ~380 nm. Abiejuose kristaluose stebėtas superkontinuumo spektro siaurėjimas laike (žr. 1 pav.), kurį lemia spalvinių centrų susidarymas relaksuojant autolokalizuotiems eksitonams, dėl kurių atsiranda defektai ir medžiagos struktūriniai pokyčiai vėliau išsivystantys į optinį pažeidimą [4]. BaF_2 ir CaF_2 kristaluose nuo defektų išsklaidyta šviesa (515 nm) pastebėta ankščiau už spartų superkontinuumo spektro siaurėjimą ir reikšmingą liuminescencijos pėdsako padėties ir formos pokytį. Švelnaus fokusavimo sąlygomis stabilaus superkontinuumo generacija CaF_2 kristale ~30 kartų ilgesnė nei esant aštriam fokusavimui. Atlikta skaitmeninio modeliavimo rezultatų analizė parodė, kad švelnaus fokusavimo sąlygomis CaF_2 kristale sukuriamas ~1,7 karto mažesnis laisvųjų elektronų plazmos tankis, o tai lemia mažesnį ilgai gyvuojančių spalvinių centrų ir defektų kiekį medžiagoje. Atlikus spektrinius ir laikinius autolokalizuotų eksitonų liuminescencijos matavimus, atskleistas laikinis sugertos energijos persiskirstymo ir optinį pažeidimą šiuose kristaluose lemiančių spalvinių centrų susidarymo paveikslas [5].



1 pav. Superkontinuumo spektro (a), liuminescencijos intensyvumo išilgai šviesos gijos (b) ir išsklaidytos šviesos intensyvumo (c) laikinė dinamika, kai superkontinuumas generuojamas 25 mm ilgio CaF_2 kristale naudojant švelnų fokusavimą, balta rodyklė žymi spinduliuotės sklidimo kryptį

Reikšminiai žodžiai: superkontinuumas, ultravioletinė spinduliuotė, BaF_2, CaF_2.

Literatūra

[1] A. Dubietis, G. Tamošauskas, R. Šuminas, V. Jukna, A. Couairon, Lith. J. Phys. **57**, 133-157 (2017).
[2] E. Riedle, M. Bradler, M. Wenninger, C. F. Sailer, I. Pugliesi, Faraday Discuss. **163**, 139-158 (2013).
[3] J. Wang, Y. Zhang, H. Shen, Y. Jiang, Z. Wang, **56**, 076107 (2017).
[4] S. Mao, F. Quere, S. Guizard, X. Mao, R. Russo, G. Petite, P. Martin, Appl. Phys. A. **79**, 1695-1709 (2004).
[5] V. Marčiulionytė, V. Jukna, G. Tamošauskas, A. Dubietis, Sci. Rep. **11**, 15019 (2021).

Erdviškai praslinktu aksikonu generuojamų asimetrinių Beselio pluoštų panaudojimas skaidrių terpų mikroapdirbime

Spatially Displaced Axicon Halves for Generating Assymetric Bessel Beams Applicable in Transparent Material Microprocessing

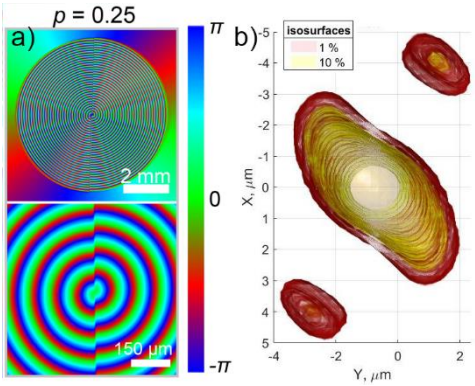
Ernestas Nacius[1,2], Pavel Gotovski[1,4] Orestas Ulčinas[2], Sergejus Orlovas[1], Vytautas Jukna[1,3]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, koherentinės optikos laboratorija, Saulėtekio al. 3, Vilnius 10257
[2]Workshop of Photonics, Mokslininkų g. 6A, Vilnius 08412
[3]Lazerinių tyrimų centras, Vilniaus universtitetas, Saulėtekio al. 10, Vilnius 10223
[4]Elektronikos fakultetas, Vilnius Gedimino technikos universitetas, Naugarduko g. 41, Vilnius 03227

ernestas.nacius@ftmc.lt

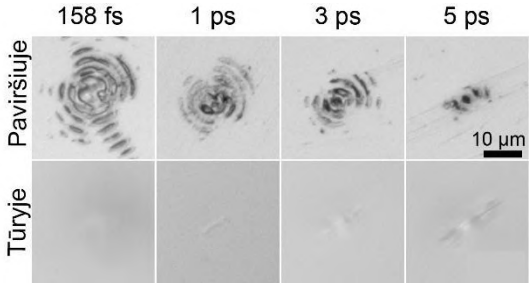
Beselio pluoštai yra sulaukę didžiulio dėmesio lazeriniame skaidrių terpių mikroapdirbime dėl savo išilginto židinio zonos. Pluošto skėstis gali būti daug kartų mažesnė nei tokio pačio diametro Gauso pluošto, kurio židinio ilgis yra apribotas Relėjaus atstumu. Ši pluošto savybė leidžia efektyviau apdirbti skaidrias medžiagas kuomet reikalingi ilgi pakitusios medžiagos kanalai, o tai atlikti Gauso pluoštais reiktų daug pakartotinių skenavimų [1]. Beselio pluoštams generuoti tradiciškai naudojami aksikonai – kūginiai lęšiai, kurie transformuoja plokščią kritusio pluošto bangos frontą į kūgio formą, tokiu būdu ant optinės ašies formuojamas riboto ilgio Beselio pluoštas. Refrakciniam aksikonui reikalingas formos tikslumas, ypatingai ties viršūne, nes ji yra kritinė siekiant generuoti aukštos kokybės ašinį intensyvumo skirstinį [2].

Puiki alternatyva stikliniams aksikonams yra aukšto optinio pažeidimo slenksčio geometrinės fazės elementai, kurie pagaminami lydyto kvarco tūryje tiesioginio lazerinio rašymo būdu suformuojant nanogardeles [3]. Ši technologija leidžia tiksliai keisti kritusio pluošto fazę, o tai leidžia pagaminti ir sudėtingesnio skirstinio elementus kuriais generuojami įmantrūs pluoštai.

Šiame darbe skaitmeniškai ir eksperimentiškai tiriame unikalių skirstinių Beselio pluoštus generuojamus padalinus aksikono apertūrą į dvi sritis ir erdviškai jas perslenkant. Išskirtinis atvejis gaunamas, kuomet per ketvirčio fazės periodo dydį praslinktos aksikono pusės generuoja asimetrinį centrinį intensyvumo maksimumą. Toks pluoštas gali būti naudingas mikroįtrūkimų formavimui skaidrių terpių tūryje (žr. 1 pav.) [4], o juos jungiant – kontroliuojamas, ištisinis lūžis. Pluošto generacijos bei sklidimo savybės išnagrinėtos pasitelkiant tiesinio ir netiesinio pluošto sklidimo modelius, o eksperimento metu atliktų matavimų ir pažeidimų duomenys puikiai atitinka skaitmeninio modeliavimo rezultatus. Iš borosilikatinio stiklo pažeidos rezultatų galima matyti, jog suformuotu išilgintos dėmės Beselio pluoštu formuojami kryptingi mikroįtrūkimai, kurie itin naudingi ir pritaikomi stiklų pjovime (žr. 2 pav.).



1 pav. a) Geometrinės fazės elementas su praslinktomis aksikono fazės pusėmis, per ketvirtį fazės periodo ir b) pluošto sukuriamas plazmos tankio skirstinys borosilikatinio stiklo terpėje.



2 pav. Ketvirčio fazės poslinkio aksikonu suformuoto pluošto modifikacijos borosilikatinio stiklo paviršiuje ir tūryje.

Reikšminiai žodžiai: Beselio pluoštas, geometrinė fazė, aksikonas,mikroapdirbimas.

Literatūra

[1] R. Meyer, M. Jacquot, R. Giust, J. Safioui, L. Rapp, L. Furfaro, P.-A. Lacourt, J. Dudley and F. Courvoisier "Single shot ultrafast laser processing of high-aspect ratio nanochannels using elliptical Bessel beams", Optics Letters 42 21 (2017).
[2] O. Brzobohatý, T. Čižmár and P. Zemánek "High quality quasi-Bessel beam generated by round-tip axicon", Opt. Express 16, 12688–12700 (2008).
[3] Y. Shimotsuma, P. G. Kazansky, J. Qiu and K. Hirao "Self-organized nanogratings in glass irradiated by ultrashort light pulses", Phys. Rev. Lett. 91, 247405 (2003).
[4] Baltrukonis, O. Ulčinas, S. Orlov, and V. Jukna "Void and micro-crack generation in transparent materials with high-energy first-order vector Bessel beam", J. Opt. Soc. Am. B. 37, 2121–2127 (2020).

UV-VIS šviesos generacijos fotoninių kristalų šviesolaidyje tyrimas

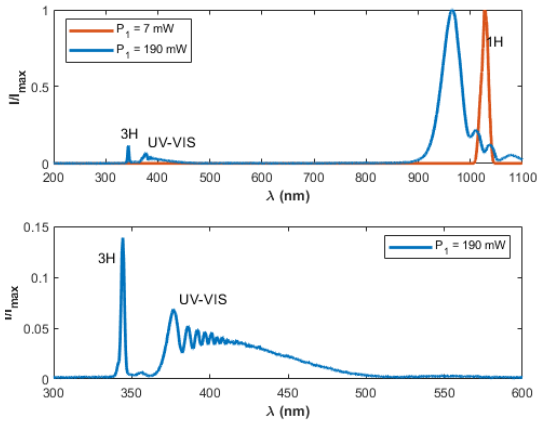
Investigation of UV-VIS light generation in the photonic crystal fiber

Miglė Kuliešaitė, Vygandas Jarutis, Jokūbas Pimpė, Julius Vengelis
Vilniaus Universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
migle.kuliesaite@ff.vu.lt

Fotoninių kristalų šviesolaidžiai (FKŠ) nuo paprastų šviesolaidžių skiriasi tuo, kad jų centre yra periodinių mikrostruktūrų sritis, kurios centre ir sklinda šviesa. Šie šviesolaidžiai yra puiki netiesinė terpė, kurioje vyksta kubinio netiesiškumo $\chi^{(3)}$ sąlygojami reiškiniai, kurie lemia superkontinuumo generaciją [1]. Superkontinuumo generacija FKŠ yra vienas iš svarbiausių ir labiausiai tiriamų netiesinės optikos reiškinių, kuris yra taikomas spektroskopijoje, dažnių metrologijoje, kompiuterinėje koherentinėje tomografijoje, [2]. Yra atlikta nemažai tyrimų, kurie parodė, kad kaupinant femtosekundiniais impulsais, kurių bangos ilgis yra anomalioje grupinių greičių dispersijos srityje (GGD), superkontinuumo generacija vyksta, kai susiformavę solitonai skyla į fundamentinius solitonus ir dispersines bangas. Šioje stadijoje spektras išplinta labai greitai ir visi superkontinuumą sudarantys dažnių komponentai atsiranda pirmuosiuose FKŠ centimetruose. Plataus spektro generavimo metu laikinės spinduliuotės savybės yra labai stipriai iškraipomos, todėl labai sumažėja laikinis koherentiškumas [3]. Kadangi šios savybės yra svarbios praktiniams pritaikymams, yra labai svarbu nuodugniai ištirti pradinius superkontinuumo generacijos etapus ir išsiaiškinti tuo metu vykstančias visas netiesines sąveikas.

Šiame pranešime bus pristatyti trečiosios harmonikos ir ultravioletinės – regimosios (UV-VIS) srities spinduliuotės, generuotos trumpo ilgio šviesolaidyje, savybių tyrimo eksperimentiniai ir skaitinio modeliavimo rezultatai. Kaupinimo spinduliuotei buvo naudojamas Yb:KGV lazerinis osciliatorius „Flint“ generuojantis 1028 nm centrinio bangos ilgio 110 fs trukmės impulsus, kurių pasikartojimo dažnis 75,2 MHz. Atliekant eksperimentą kaupinimo spinduliuotė buvo įvedama į 2,6 cm ilgio poliarizaciją išlaikantį pirmo tipo FKŠ, kurio šerdies diametras yra 4,8 µm, o atstumas tarp mikrostruktūrų – 3,5 µm. Šio šviesolaidžio dispersijos nulį atitinkantis bangos ilgis yra 1087,4 nm. Atliekant eksperimentą buvo matuojami iš FKŠ išėjusios spinduliuotės spektrai keičiant kaupinimo impulsų galią.

Iš FKŠ išėjime išmatuotų spektrų matyti, kad pirmoje superkontinuumo generacijos stadijoje vyksta trys nepriklausomi netiesiniai procesai: fazės moduliavimasis, trečios harmonikos generacija (343,7 nm) ir ultravioletinės - regimosios spektro srities (UV-VIS) šviesos generacija, apimanti 375 – 500 nm bangos ilgių diapazoną (1 pav.). Skaitmeninis modeliavimas parodė, kad UV – VIS šviesa generuojasi, relaksuojant lokalizuotiems eksitonams, kurie sužadinami daugiafotonės sugerties metu. Buvo parodyta, kad eksitonai yra generuojami FKŠ pirmuose 4 mm. Šios srities spektre taip pat yra matomos slopstančios osciliacijos, kurios atsiranda dėl skirtingose FKŠ srityse generuojamos UV-VIS šviesos interferencijos (1 pav. apačia). Iš skaitmeninio modeliavimo rezultatų matyti, kad FKŠ išėjime turime nekoherentinę trečios harmonikos generaciją, kurios atsiradimui turi būti tenkinamos šios sąlygos: (a) trečiajai harmonikai turi būti tenkinama fazinio sinchronizmo sąlyga, (b) pirmosios harmonikos impulsas patiria fazės moduliavimąsi ir (c) tarp pirmos ir trečios harmonikų pasireiškia erdvinis pluoštų nunešimas.



1 pav. Viršuje – mėlyna kreivė vaizduoja FKŠ išėjime registruotą spektrą, o raudona kreivė – kaupinimo impulsų spektrą. Apačioje – priartintas FKŠ išėjime užregistruotas spektras taip, kad apimtų UV - VIS šviesos ir trečios harmonikos sritį.

Projektas bendrai finansuotas iš Europos regioninės plėtros fondo lėšų (projekto Nr. 1.2.2-LMT-K-718-03-0004) pagal dotacijos sutartį Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Reikšminiai žodžiai: Superkontinuumo generacija, fotoninių kristalų šviesolaidis, femtosekundiniai lazerio impulsai.

Literatūra

[1] P. S. J. Russell, Photonic-Crystal Fibers, J. Lightwave Technol. **24**(12), 4729–4749 (2006).
[2] G. Humbert, W. Wadsworth, S. L. Saval, J. Knight, T. Birks, P. S. J. Russell, M. Lederer, D. Kopf, K. Wiesauer, E. Breuer, D. Stifter, Supercontinuum generation system for optical coherence tomography based on tapered photonic crystal fiber, Opt. Express **14**, 1596 (2006).
[3] J. M. Dudley, G. Genty, S. Coen, Supercontinuum generation in photonic crystal fiber, Rev. Mod. Phys. **78**, 1135 (2006).

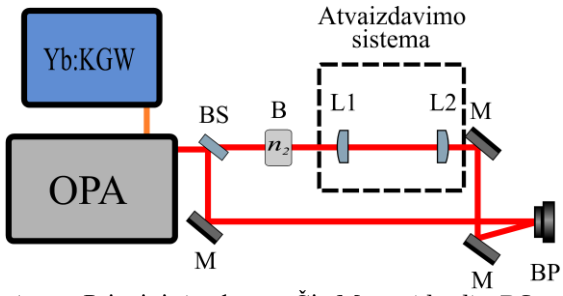
Interferometriniai netiesinio lūžio rodiklio matavimai ties 3,2 µm

Interferometric nonlinear refractive index measurements at 3,2 µm

Gaudenis Jansonas[1], Rimantas Budriūnas[1,2], Arūnas Varanavičius[1]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10222 Vilnius
[2]Light Conversion, UAB, Keramikų g. 2B, LT-10233 Vilnius
gaudenisjansonas@yahoo.com

Žinios apie tikslią netiesinio lūžio rodiklio n_2 vertę yra labai svarbios įvairiuose lazerių fizikos ir netiesinės optikos taikymuose. Šiuo metu mokslinėje literatūroje trūksta informacijos apie n_2 vidurinėje infraraudonojoje spektrinėje srityje (MIR). Dažniausiai naudojami n_2 nustatymo metodai, kaip Z–skenavimas [1], neretai remiasi prielaida, kad lazerinės spinduliuotės impulsas ir pluoštas yra Gausiniai. Praktikoje generuojant MIR impulsus tokias sąlygas nėra lengva užtikrinti, o prielaidų netenkinimas gali lemti žymias matavimo paklaidas. Dėl to buvo parengta interferometrinė n_2 matavimo metodika, įskaitanti eksperimentinį bangų paketo intensyvumo profilį ir išmatuoti ZnSe, GaSe, $AgGaS_2$ (AGS) ir $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$ (SBN-61) bandiniai naudojant 3,2 µm spinduliuotę.

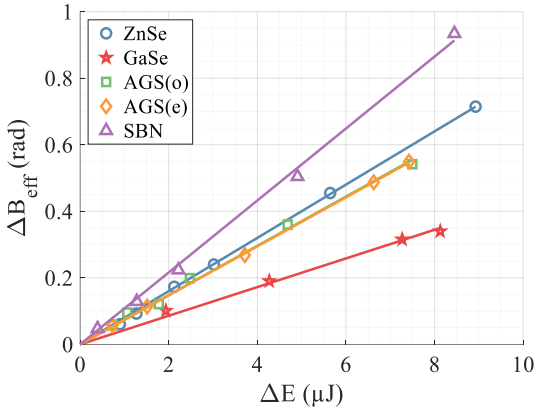
Principinė matavimo schema yra pateikta 1 pav. Pavyzdžiai buvo apšviečiami 3,2 µm impulsais generuojamais laboratorijoje surinktu parametriniu stiprintuvu (OPA), kaupinamu femtosekundiniu Yb:KGW lazeriu („Pharos“, „Light Conversion“).



1 pav. Principinė schema. Čia M – veidrodis, BS – pluošto daliklis, B – bandinys, BP – kamera, L1 ir L2 – lęšiai žymintys atvaizdavimo sistemą.

Bandinys buvo įstatytas į vieną Mach-Zehnder interferometro petį ir interferencinis vaizdas išėjime buvo registruojamas mikrobolometrine kamera. Esant mažai energijai, kai bandinio netiesiškumas yra nereikšmingas, interferencinis vaizdas yra lygiagrečių ir ekvidistancinių juostelių formos. Kai intensyvumas bandinyje tampa didelis spinduliuotė patiria n_2 sukeltą fazinę moduliaciją, tiesiogiai proporcingą erdvėlaikiniam impulsinio pluošto intensyvumo profiliui. Tokiu atveju interferencinės juostelės išlinksta, o iš išlinkimo masto galima nustatyti maksimalų netiesinį fazės pokytį pluošto centre ties impulso viršūne *B*.

Interferenciniai skirstiniai buvo pamatuoti prie skirtingų impulso energijų. Iš kiekvieno interferencinio paveikslėlio buvo atkurtas fazės skirtumo tarp interferuojančių bangų erdvinio skirstinio paviršius pasinaudojant Furje transformacijos metodu [2]. Siekiant panaikinti tiesinį fazės foną iš kiekvieno paviršiaus buvo atimamas atraminis fazės pokytis, atitinkantis mažą impulso energiją. Efektyvus *B* pokytis ΔB_{eff} yra nustatomas aproksimuojant fazinį paviršių išmatuotu pluošto profiliu. Tai atliekama prie visų energijos pokyčio ΔE verčių. Rezultatai pateikti 2 pav. Siekiant pagerinti tikslumą n_2 buvo suskaičiuotas iš tiesinės duomenų aproksimacijos. Skaičiavimams reikalingas smailinis intensyvumas buvo įvertinamas skaitiškai integruojant išmatuotą bangų paketo intensyvumo profilį. Impulso formos įtaka matavimui buvo įvertinta skaitiškai modeliuojant eksperimentą.



2 pav. Išmatuotos efektyvaus maksimalaus netiesinio fazės pokyčio vertės skirtinguose bandiniuose esant įvairiems energijos pokyčiams. Simboliai – eksperimentiniai taškai, linija – tiesinė aproksimacija.

Apibendrinant, buvo parengta interferometrinė n_2 nustatymo metodika, leidžianti įskaityti išmatuotus spinduliuotės laikinį ir erdvinį intensyvumo skirstinius, bei atlikti žinomų medžiagų matavimai naudojant 3,2 µm šviesą. Šis metodas galėtų būti toliau naudojamas atliekant eksperimentus MIR.

Reikšminiai žodžiai: netiesinis lūžio rodiklis, interferencija, vidurinė infraraudonoji spektrinė sritis.

Literatūra

[1] M. Sheik-Bahae, A.A. Said, and E. W. Van Stryland, Opt. Lett. **14**, 955-957 (1989).
[2] M. Takeda, H. Ina, and S. Koboyashi, JOSA **72**, 156-160 (1982).

Efektyvūs vieno bei dviejų lėkių valdomo pradinio čirpo Yb strypiniai šviesolaidiniai stiprintuvai naudojantys Gires – Tournois interferometrinius veidrodžius

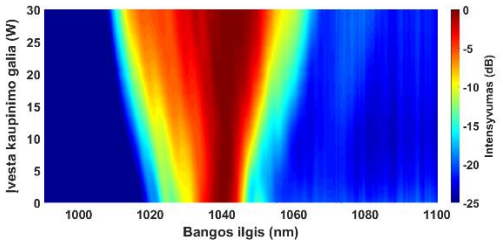
Efficient single-pass and double-pass pre-chirp managed Yb-doped rod-type fiber amplifiers using Gires – Tournois interferometric mirrors

Jonas Banys[1], Julius Vengelis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
jonas.banys@ff.vu.lt

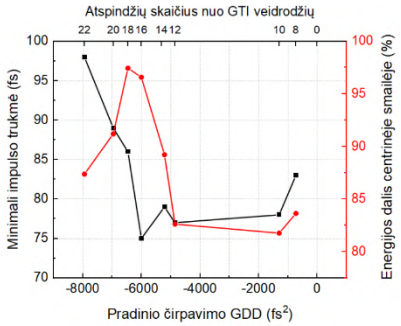
Didelio smailinio intensyvumo ultratrumpųjų impulsų lazeriai pritaikomi pramonės, gynybos ir mokslinių tyrimų srityse [1]. Svarbi mokslinių tyrimų tema yra naujų būdų radimas gauti vis didesnę vidutinę lazerio galią ir kuo trumpesnę impulsų trukmę . Vienas iš būdų pasiekti tokius lazerinės spinduliuotės parametrus yra šviesolaidinis ultratrumpųjų impulsų stiprinimas naudojant didelio modos ploto dvigubo apvalkalo fotoninių kristalų strypinius šviesolaidžius, kuriuose netiesiniai optiniai efektai pasireiškia silpniau, o geros termo-optinės savybės bei plati stiprinimo juosta įgalina sustiprinti impulsus iki 10 − 100 W vidutinės galios [2].

Ultratrumpųjų impulsų stiprinimą šviesolaidžiuose nulemia sąveika tarp šviesolaidžio dispersijos, netiesinių efektų ir stiprinimo. Bendru atveju ši sąveika sąlygoja tai, kad tiesioginio šviesolaidinio stiprinimo schemose gauti spektriškai ribotus sustiprintus impulsus yra sudėtinga. Šiai problemai spręsti yra naudojamos netiesinio stiprinimo technikos. Viena tokių - valdomo pradinio čirpo stiprinimas (PCMA – pre-chirp managed amplification) [2]. PCMA sistemoje prieš šviesolaidinį stiprintuvą naudojamas impulsų plėstuvas, kuris faziškai moduliuoja (čirpuoja) užkrato impulsą, o dėl stiprinimo metu pasireiškiančio fazės moduliavimosi (FSM) impulso spektras plinta. Skirtingai nei įprastame čirpuotų impulsų stiprinime, PCMA metode impulsai išplečiami nedaug, o tiesinis sustiprintų impulsų čirpas ir platus spektras leidžia suspausti impulsus iki <100 fs trukmių [2]. Šiame darbe pademonstruojamos vieno bei dviejų lėkių šviesolaidinės valdomo pradinio čirpo (PCMA) stiprinimo sistemos Yb:KGW osciliatoriui „Flint“ ir ištirtos jų energinės, laikinės ir erdvinės charakteristikos. Taipogi pirmąkart pademonstruojamas šviesolaidinis PCMA stiprintuvas, kuriame pradinis čirpavimas ir impulsų suspaudimas atliekamas naudojant tik Gires – Tournois interferometrinių (GTI) veidrodžių poras. Tai leido įgyvendinti kompaktišką, energiškai efektyvų ir lengvai justiruojamą stiprintuvą, kuris galėtų būti naudojamas kaip patikimas, didelės galios ir aukštos impulsų kokybės lazerinis šaltinis. Be to, šiame darbe pateikta eksperimentinė idėja galėtų paskatinti tolimesnę Yb šviesolaidinių stiprintuvų plėtrą bei pritaikymo sritis.

PCMA ir GTI veidrodžių kombinacija leido gauti aukšto tangentinio (>60%) bei optinio (>69%) efektyvumų stiprintuvus, generuojančius ~20 W išvadinės vidutinės galios 75-85 fs trukmės artimus spektriškai ribotiems sustiprintus impulsus su aukšta pluošto kokybe. GTI veidrodžių naudojimas PCMA sistemoje patrauklus dėl lengvo justiravimo, didelio energinio efektyvumo (>93%) bei kompaktiškumo. Darbe nustatytos PCMA netiesinio stiprinimo metodo ypatybės – fazės moduliavimosi sąlygotas impulso spektro plitimas stiprinimo metu (1 pav.) bei optimali pradinio čirpavimo grupinio vėlinimo dispersijos vertė, kuriai esant gaunami aukščiausios kokybės trumpiausi impulsai (2 pav.). Be to, pirmąkart pademonstruota dviejų lėkių PCMA stiprinimo sistema, kuri ne tik išlaiko vieno lėkio PCMA metodo privalumus, bet pasižymi dar aukštesniu stiprinimo koeficientu bei efektyvumu.



1 pav. Vieno lėkio PCMA stiprintuvo išvadinės spinduliuotės spektro dinamika keičiant kaupinimo galią. Pradinio čirpavimo GDD - 6000 fs^2. Užkrato galia 3,5 W.



2 pav. Minimalios suspaustų impulsų trukmės (juoda kreivė) ir energijos dalies centrinėje impulso smailėje (raudona kreivė) priklausomybė nuo pradinio čirpavimo GDD (arba atspindžių skaičiaus nuo GTI veidrodžių).

Reikšminiai žodžiai: Yb strypinis šviesolaidinis stiprintuvas, PCMA, Gires – Tournois interferometras, Yb:KGW osciliatorius

Literatūra

[1] Zhao, X. Hu, and Y. Wang, Femtosecond-pulse fiber-based amplification techniques and their applications, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. **20**(5), 512–524 (2014).
[2] Y. Hua, G. Chang, F.X. Kärtner, and D. N. Schimpf, Pre-chirp managed, core-pumped nonlinear PM fiber amplifier delivering sub-100-fs and high energy (10 nJ) pulses with low noise, Opt. Express **26**(5), 6427-6438 (2018).

Apšvitos dozės didelio intensyvumo lazerių laboratorijoje

Irradiation doses in the high intensity lasers laboratory

Vytenis Barkauskas[1], Lukas Rimkus[2], Jonas Reklaitis[1], Artūras Plukis[1], Mikas Vengris[2]
[1]Fizinių ir technologijos mokslų centras, Branduolinių tyrimų skyrius, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
[2]Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223Vilnius
vytenis.barkauskas@ftmc.lt

Tobulinant lazerines sistemas, pasiekiama vis didesnė generuojamų impulsų galia ir pasikartojimo dažnis. Kai šie impulsai sąveikauja su medžiaga, generuojama jonizuojanti Rentgeno spektro srities spinduliuotė. Priklausomai nuo jos charakteristikų sukelta apšvitos dozė gali būti reikšminga radiacinės saugos požiūriu, t.y. daryti neigiamą įtaką darbuotojų sveikatai [1].

Fokusuodami intensyvią lazerinę spinduliuotę į skirtingų medžiagų taikinius, mes eksperimentiškai įvertinome potencialias apšvitos dozes. Rentgeno spinduliuotės generacijai naudotas „Šviesos konversijos“ CARBIDE lazeris (impulso trukmė – 240 fs, maksimali impulso energija – 900 µJ, pasikartojimo dažnis – 100 kHz). Optimalus priešimpulsio-impulso galios santykis, kuriam esant gaunamas didžiausias Rentgeno spinduliuotės signalas buvo 1/10, laikinis atstumas tarp jų – 440 ps. Lazerio pluoštas buvo sufokusuotas į 26 µm diametro (FWHM) dėmę, o jo intensyvumas siekė 4.7×10^{14} W/cm^2.

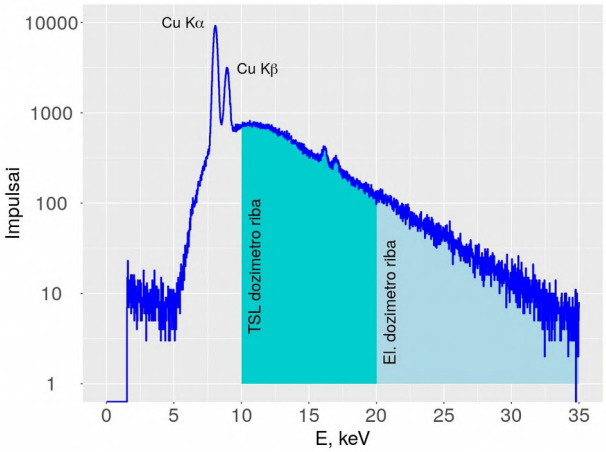
Dozimetriniams matavimams naudoti elektroniniai ir optiškai stimuliuotos liuminescencijos dozimetrai. Eksperimentų metu naudotas Amptek XR-100CR Rentgeno spektrometras, siekiant optimizuoti Rentgeno spinduliuotę ir ją charakterizuoti.

Eksperimento metu lazerio pluoštas buvo fokusuojamas į besisukantį metalinį diską (naudoti aliuminio, geležies, vario, alavo ir švino bandiniai). Dozės galia, buvo matuota 30 cm atstumu nuo spinduliuotės šaltinio. Didžiausia fiksuota dozės H*(10) galia, esant didžiausiam lazerio intensyvumui, buvo gauta naudojant vario taikinį (2.4 mSv/h). Vario, geležies ir aliuminio taikinių atveju fiksuojamos dozės buvo gana panašaus lygio (1–2.4 mSv/h), sunkesnių elementų atveju (Sn ir Pb) registruojamos dozės buvo ženkliai mažesnės. Manytina, kad Rentgeno spinduliuotės generavimui daro įtaką medžiagos lydymosi temperatūra, šiluminis laidumas, garų slėgis etc.

Suminius dozės lygius eksperimentinės sesijos metu matavome termoliuminescenciniais dozimetrais. Per 15 darbo dienų, arčiausiai taikinio (30 cm atstumu) buvęs dozimetras sukaupė 32.4 mSv H*(10) ir 2.05 Sv H’(0.07) dozes. Kiti dozimetrai, esantys toliau (40 ir 230 cm nuo taikinio) rodė atitinkamai mažesnes vertes H*(10) – 15.3 ir 0.25 mSv, H’(0.07) – 969 ir 2.5 mSv.

Asmeniniai dozimetrai dozių beveik nesukaupė: išmatuotos H*(10) ir H’(0.07) vertės tesiekė 0.01 mSv.

Esant 10^{14} W/cm^2 eilės lazerio intensyvumams, generuojamos spinduliuotės spektro struktūra susideda iš stabdomosios spinduliuotės spektro ir taikinio medžiagos charakteringosios Rentgeno spinduliuotės linijų (1 pav.). Kadangi žymi Rentgeno spektro dalis yra žemos energijos (<10 keV) spinduliuotės srityje, ji neišmatuojama įprastiniais dozimetrais todėl, kad jie turi aukštesnes registruojamos energijos ribines vertes. Tai ypač aktualu vertinant paviršinės apšvitos dozes H’(0.07), kadangi jų dozinės konversijos koeficientai minėtoje energijų srityje turi dideles vertes [2].



1 pav. Vario taikinio Rentgeno spinduliuotės spektras.

Išmatuotos suminės dozės greta taikinio viršija radiacinės saugos reikalavimuose nustatytas metinės apšvitos vertes, tačiau itin paprastos radiacinės apsaugos priemonės laboratorijoje (atstumas ir ekranavimas naudojant metalo plokštes) leidžia išvengti nepageidaujamų dozių darbuotojams.

Padėka. Mokslinis tyrimas finansuojamas Europos socialinio fondo pagal priemonę “Mokslininkų kvalifikacijos tobulinimas vykdant aukšto lygio MTEP projektus” (LMT projektas Nr. 09.3.3-LMT-K-712-19-0014).

Reikšminiai žodžiai: apšvitos dozės, Rentgeno spinduliuotė, femtosekundinis lazeris.

Literatūra

[1] H. Legall et al 2021 J. Radiol. Prot. **41** R28 (2021).
[2] ICRP Report No. 74, Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation, Ann. ICRP 26 (1996).

Paviršinių darinių formavimas skaidriose dielektrinėse terpėse femtosekundiniais lazerio impulsais

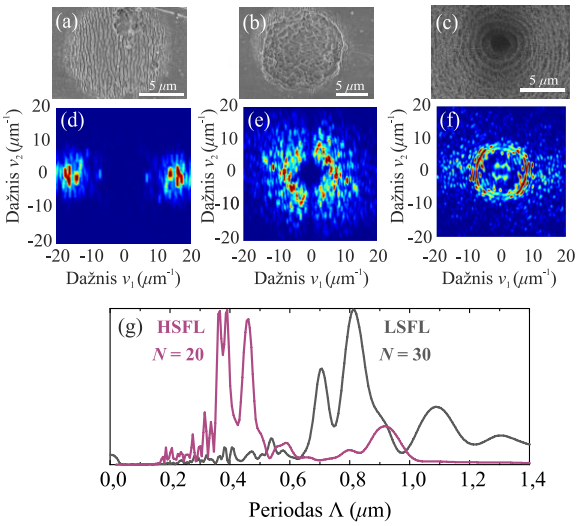
Femtosecond laser-induced periodic surface structures in transparent dielectric materials

Marius Navickas[1], Robertas Grigutis[1], Gintaras Tamošauskas[1], Vytautas Jukna[1], Audrius Dubietis[1]
[1]Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, LT-10223 Vilnius
marius.navickas@ff.vu.lt

Apšvitinus skaidrias ir neskaidrias medžiagas: dielektrikus [1], puslaidininkius [2] ir metalus [3] didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniais lazerio impulsais, formuojasi skirtingo tipo paviršinės struktūrinės modifikacijos–nanoraibuliai, mikrorėžiai ir paviršinės periodinės žiedinės struktūros. Šis reiškinys plačiai tyrinėjamas kaip nauja ir perspektyvi lazerinio medžiagų apdirbimo kryptis, apimanti daugybę taikymo sričių, tokių kaip fotonika, plazmonika, mikrofluidika ir pan. [4], kuriose reikalingas paprastas, greitas ir efektyvus medžiagos optinių, cheminių ir kitų savybių modifikavimas.

Saviorganizuoti kvaziperiodiniai paviršiniai dariniai pagal jų periodiškumą ir gardelės orientaciją yra skirstomi į tris tipus: aukšto erdvinio dažnio (angl. HSFL), žemo erdvinio dažnio (angl. LSFL) bei periodines paviršines žiedines struktūras (angl. LIPASS). Pastebėta, jog HSFL struktūros gardelės orientacija yra statmena lazerio spinduliuotės poliarizacijai, tuo tarpu LSFL struktūros neturi griežtos gardelės orientacijos. Be to, teoriškai HSFL struktūros periodas siekia nuo λ / n_0 iki $\lambda / 2n_0$, o LSFL maždaug $\lambda / 2n_0$, čia λ bangos ilgis, o n_0 medžiagos lūžio rodiklis. Toks reiškinys pirmiausiai buvo pastebėtas lydytame kvarce, o vėliau plačiau tirtas chalkogenidiniuose stikluose [5].

Šiame darbe yra pristatomi didelio pasikartojimo dažnio femtosekundiniais lazerio impulsais sukuriamų periodinių paviršinių mikro ir nanostruktūrų tyrimai įvairiose dielektrinėse skaidriose medžiagose: Al_2O_3, IAG, CaF_2 kristaluose bei lydytame kvarce. Eksperimentai buvo atliekami Yb:KGV lazerio impulsais (Pharos, Light Conversion), kurių trukmė pusės aukštyje siekia 180 fs, maksimalus impulsų pasikartojimo dažnis 200 kHz, o centrinis bangos ilgis 1035 nm. Suformuotų paviršiaus darinių vaizdinimas buvo atliekamas Prisma E Thermo Fisher Scientific skenuojančiu elektronų mikroskopu (SEM), o detalesnė šių vaizdų analizė atlikta pasitelkus dvimatę (2D) Furje transformaciją. 1 pav. pavaizduotos modifikuoto safyro paviršiaus SEM nuotraukos rodo, jog naudojant mažą impulsų skaičių (1 (a) pav.) formuojasi vadinamieji nanoraibuliai arba minėtos HSFL struktūros, kurių orientacija statmena žadinančios spinduliuotės poliarizacijos atžvilgiu, o pastarųjų struktūrų 2D Furje spektre (1 (d) pav.) stipriai išreikšti aukšti erdviniai dažniai. Toliau šiek tiek padidinus impulsų skaičių, susiformuoja mikrorėžiai arba LSFL (1 (b) pav.), kurių 2D Furje spektre (1 (e) pav.) dominuoja žemi erdviniai dažniai. Esant santykinai ilgoms ekspozicijos trukmėms arba dideliam impulsų skaičiui, suformuojamos vadinamosios periodinės paviršiaus žiedinės struktūros arba LIPASS (1 (c) pav.), kurios sudarytos iš centre esančio kraterio su aplink kvaziperiodiškai išsidėsčiusiais žiedais. Toks morfologinis virsmas geriau pastebimas struktūrų periodų spektruose, kurie pavaizduoti 1 (g) pav. Čia aiškiai matyti, jog HSFL atveju dominuoja periodai, mažesni už 0,45 μm, tuo tarpu LSFL struktūros sudarytos iš periodų, didesnių už 0,65 μm. Be to, šis virsmas įvyksta per santykinai trumpą laiko tarpą–vos keletas papildomų lazerio impulsų sukuria ženklius morfologinius pokyčius. Tai buvo pastebėta ir CaF_2, IAG kristaluose bei lydytame kvarce, todėl galima daryti išvadą, jog toks virsmas yra universalus.



1 pav. Periodinių nanostruktūrų, suformuotų safyro kristalo paviršiuje su (a) 20, (b) 30 ir (c) $3{\cdot}10^5$ impulsų SEM nuotraukos ir (d)–(f) jų 2D Furje spektrai. (g) dalis vaizduoja HSFL ir LSFL struktūrų periodų spektrus. (a)–(c) dalyse pavaizduotos struktūros suformuotos su 4,2 J/cm^2 energijos tankiu bei 200 kHz impulsų pasikartojimo dažniu.

Reikšminiai žodžiai: lazeriu indukuotos paviršinės struktūros.

Literatūra

[1] S. Höhm, A. Rosenfeld, J. Krüger and J. Bonse, J. Appl. Phys. **112**, 014901 (2012).
[2] A. Browiec and H. Haugen, Appl. Phys. Lett. **82**, 4462–4464 (2003).
[3] K. Okamuro, M. Hashida, Y. Miyasaka, Y. Ikuta, S. Tokita and S. Sakabe, Phys. Rev. B. **82**, 165417 (2010).
[4] R. Stoian and J.-P. Colombier, Nanophotonics **9**, 4665–4688 (2020).
[5] X. Yu, D. Qi, H, Wang, Y. Zhang, L. Wang, Z. Zhang, S. Dai, X. Shen, P. Zhang and Y. Xu, Opt. Express **27**, 10087-10097 (2019).

Depoliarizacijos kompensavimas didelės galios Yb:YAG stiprintuve, panaudojant stikle įrašytas nanogardeles

Depolarization compensation in high power Yb:YAG amplifier with laser written nanogratings in fused silica

Raimundas Burokas[1,2], Orestas Ulčinas[3], Kirilas Michailovas[2], Rokas Danilevičius[2], Andrejus Michailovas[2]
[1] Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius
[1]EKSPLA, UAB, Savanorių pr. 237, LT-02300 Vilnius
[2]ALTECHNA R&D, UAB, Mokslininkų g. 6 A, LT-08412 Vilnius
r.burokas@ekspla.com

Didelio smailinio intensyvumo ir didelės vidutinės galios femtosekundinėse lazerinėse sistemose yra naudojama didelė kaupinimo galia, kuri iššaukia tokius šiluminius reiškinius aktyviajame elemente kaip depoliarizacija ar bifokusavimasis. Depoliarizuota šviesa sklisdama pro poliarizuojančius elementus sistemoje virsta nuostoliais, be to pasižymi erdviniu netolygumu ir taip smarkiai apriboja didelės galios lazerių gamybą bei jų panaudojimą. Vienas iš dažniausiai naudojamų būdų depoliarizacijai kompensuoti yra panaudojant Faradėjaus rotatoriaus panaudojimas tarp dviejų aktyviųjų terpių arba pirmo ir antro praėjimo dviejų lėkių stiprintuvuose [1-2].

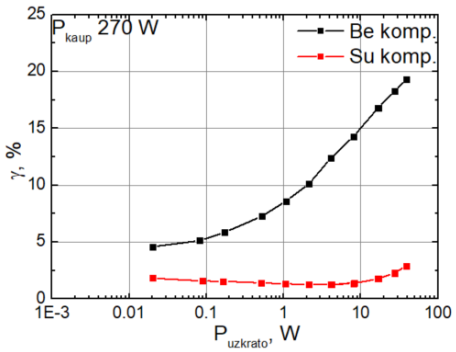
Šiame darbe pristatomas unikalus būdas kompensuoti depoliarizacijai, panaudojant lydytame kvarce įrašytas nanostruktūras. Lydytas kvarcas yra gerokai patvaresnis ir kompaktiškesnis lyginant su Faradėjaus rotatoriumi. Dvejopai šviesą laužiančios nanogardelės įrašytos femtosekundiniu lazeriu taip, kad sukurtų fazės vėlinimo profilį, atkartojantį aktyviajame elemente indukuotą šilumos, tik priešingo ženklo. Fazės vėlinimas tarp dviejų statmenų poliarizacijos komponenčių visuose elementuose turėjo parabolinę priklausomybę, kuri aprašoma pagal formulę:

$$\varphi = M(\frac{r}{R})^2 \qquad (1)$$

čia fazės vėlinimas φ, išreikštas nanometrais, r – radialinė koordinatė, M –fazės vėlinimas atstume R, kuris visiems depoliarizacijos kompensatoriams buvo pasirinktas vienodas R=1,5 mm.

Darbo metu buvo išmatuotas depoliarizacijos laipsnio ir bifokusavimosi indukavimas Yb:YAG kristale, dviejų lėkių stiprintuve. Taip pat išmatuotos šių parametrų priklausomybės nuo užkrato signalo galios, depoliarizuoto ir nedepoliarizuoto spindulio profilių kitimas, keičiant įvadinę užkrato galią. Esant maksimaliai 270 W kaupinimo galiai ir sustiprinto signalo galiai 131 W, gautas didžiausias depoliarizacijos laipsnis siekė 19,3%, o tai yra net 25,3 W galios nuostoliai. Atsirandantis bifokusavimasis, įneša 1,46 skėsčių santykį pluošto skerspjūvio X ir Y kryptimis, o pluošto profilis pasidaro eliptinis.

Panaudojant depoliarizacijos kompensatorius buvo pademonstruotas didžiausias depoliarizacijos laipsnio sumažinimas nuo 19,3% iki 2,9% , esant maksimaliomis kaupinimo ir užkrato signalo galiomis. Didžiausias santykinis depoliarizacijos laipsnio sumažinimas nuo 14,3% iki 1,3% buvo pasiektas esant 8 W užkrato signalo galiai. Šiuo atveju depoliarizacijos laipsnis buvo mažiausias, o bifokusavimasis eliminuotas, tai yra pluošto skėsčių santykis skirtingomis kryptimis sumažintas nuo 1,31 iki pradinio - 0,98. Pradinė pluošto profilio simetrija taip pat buvo atstatyta.



1 pav. Depoliarizacijos laipsnio priklausomybė nuo užkrato signalo be depoliarizacijos kompensatoriaus ir su kompensatoriumi.

Eksperimentiniai rezultatai rodo, kad depoliarizacijos kompensatoriai, paremti nanogardelių įrašymu lydytame kvarce, gerai kompensuoja depoliarizaciją, bifokusavimąsi ir pluošto profilio išdarkymus, atsirandančius termiškai apkrautuose aktyviuosiuose elementuose ir yra tinkami naudoti šiluminiams reiškiniams kompensuoti juose. Daugiau rezultatų bus pristatyta konferencijos metu.

Reikšminiai žodžiai: depoliarizacija, depoliarizacijos kompensavimas, nanogardelės, Yb:YAG stiprintuvas.

Literatūra

[1] W.C. Scott, M. de Wit „Birefringence compensation and TEM00 mode enhancement in Nd:YAG laser“, *Applied Physics, (*1971)
[2] Jae Sung Shin, Sangwoo Park, Hong Jin Kong “Compensation of the thermally induced depolarization in a double-pass Nd:YAG rod amplifier with a stimulated Brillouin scattering phase conjugate mirror”, *Optics Comunications,* (2010)

Subnanosekundinių impulsų parametrinio stiprinimo sistemos tyrimas

Investigation of parametric amplification system for subnanosecond pulses

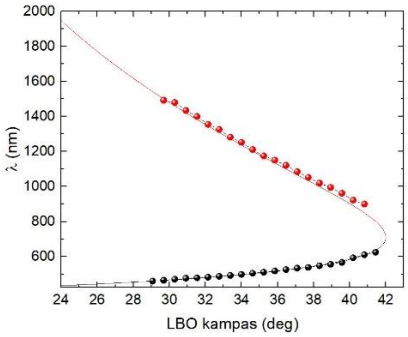
Gabrielė Stanionytė, Viktorija Tamulienė, Julius Vengelis
Vilniaus universitetas, Lazerinių tyrimų centras, Saulėtekio al. 10, 10223 Vilnius
gabriele.stanionyte@ff.stud.vu.lt

Lazerių spinduliuotės bangos ilgis dažniausiai yra fiksuotas arba jo keitimo ribos yra labai ribotos, todėl praktikoje naudojami parametriniai šviesos generatoriai ir stiprintuvai – prietaisai, kurie leidžia tolygiai derinti bangos ilgius plačiame spektro diapazone [1]. Šiuos prietaisus galima naudoti spektroskopijoje, biofotonikoje, įvairių cheminių medžiagų detekcijai, netiesinėje mikroskopijoje ir kitose srityse [2,3]. Yra sukurta daug įvairių ultratrumpų (mažiau nei 100 ps) arba ilgų (daugiau nei 1 ns) impulsų trukmių parametrinių šviesos generatorių ir stiprintuvų, tačiau subnanosekundinių trukmių (tarp 1 ns ir 100 ps) tokių prietaisų, veikiančių regimojoje spektro srityje, sukurtų nėra. Taip yra dėl tam tikrų fizikinių ribojimų – subnanosekundinių impulsų atveju daugelio netiesinių terpių pažeidimo slenkstis yra mažesnis negu parametrinės generacijos slenkstis [1,3], todėl tokių prietaisų realizavimui reikalingi sudėtingesni sprendimai.

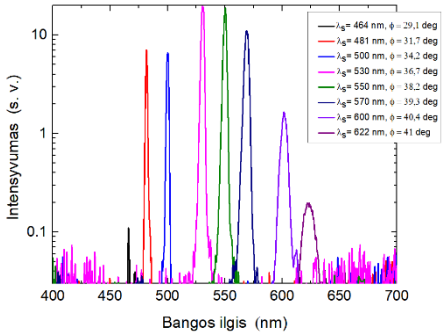
Šiame pranešime yra pristatomas subnanosekundinių impulsų parametrinio stiprinimo sistemos tyrimas, netiesine terpe naudojant LBO kristalą ir kaip užkratą naudojant superkontinuumo generaciją fotoninių kristalų šviesolaidyje. Kaupinimui ir užkrato šaltinio spinduliuotės generavimui buvo naudojamas Nd:YAG MOPA mikrolazeris, generuojantis subnanosekundinius impulsus. Parametrinio stiprintuvo kaupinimui naudota trečioji MOPA sistemos harmonika (λ=355 nm, τ=310 ps), o užkrato kaupinimui – pirmoji (λ=1064 nm, τ=600 ps). Generuotas superkontinuumas buvo parametriškai stiprinimas 15 mm storio ličio triborato (LBO) kristale, kuris išpjautas θ=90˚, φ=30.3˚ I tipo faziniam sinchronizmui, ir proceso metu kaip skirtuminio dažnio spinduliuotė generuojama trečioji banga, kurią vadiname signaline banga.

Ištyrus spektrines ir energines sistemos charakteristikas skirtuminio dažnio bangos (signalinės bangos) derinimo diapazonas (1 pav.) buvo gautas nuo 464 nm iki 654 nm (2 pav.), o šalutinės - nuo 776 nm iki 1511 nm. Ištyrus signalinės bangos generacijos savybes pastebėta, kad keitimo efektyvumą stipriai lemia užkrato spinduliuotės (superkontinuumo) spektrinis galios tankis. Didžiausias pasiektas keitimo efektyvumas signalinei bangai buvo 5.4% (ties λ=532 nm bangos ilgiu). Taip pat ištyrus signalinės bangos galios nuo užkrato spinduliuotės galios priklausomybę išsiaiškinome, kad maksimali signalinės bangos galia nebūtinai yra pasiekiama esant maksimaliai užkrato spinduliuotės galiai. Tai labiausiai lemia siaurėjant užkrato spektrui besikeičiantis atskirų spektro komponenčių intensyvumas.

Tyrimo metu taip pat atliktas skaitinis parametrinio šviesos stiprinimo modeliavimas eksperimento sąlygomis. Rezultatai kokybiškai atitiko eksperimentinius matavimus ir rodo, kad generuotos signalinės bangos trukmė yra panaši į kaupinimo bangos trukmę.



1 pav. LBO kristalo derinimo kreivė I tipo faziniam sinchronizmui, kai λ_K = 355 nm. Juodi taškai žymi eksperimentiškai pamatuotus signalinės bangos ilgius, raudoni – šalutinės.



2 pav. Sugeneruotos skirtuminės dažnio bangos (signalinės bangos) spektrai, esant skirtingiems LBO kristalo pasukimo kampams.

Projektas bendrai finansuotas iš Europos regioninės plėtros fondo lėšų (projekto Nr. 1.2.2-LMT-K-718-03-0004) pagal dotacijos sutartį Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Reikšminiai žodžiai: subnanosekundiniai impulsai, parametrinio stiprinimo sistema, užkrato spinduliuotė, LBO kristalas.

Literatūra

[1] A. Dubietis, *Netiesinė optika* (Vilniaus universiteto leidykla, Vilnius 2011).
[2] R. L. Sutherland, *Handbook of Nonlinear Optics* (Marcel Dekker, New York 2003).
[3] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics ed. 3* (Academic press, New York 2008)

AUTORIŲ RODYKLĖ

http://lnfk.ftmc.lt

Autorių rodyklė

A

Abakevičienė Brigita P135, P146
Abramavičius Darius P31, P63, P67, P118
Achim Urs O37
Acus Artūras P75, P76
Adamchuk Dzmitry P116
Adlienė Diana P8
Adomavičius Karolis K3
Adomavičiūtė-Grabusovė Sonata P35
Adomėnas Povilas O36
Adomėnienė Ona O36
Adzerikho Igor P13
Affray Etiennette O41
Agafonov Vladimir P96
Aglinskaitė Justina O53
Aikas M. P129
Akhtar Parveen O1
Aleksa Valdemaras P33
Aleksandravičius Edvinas O23, P153
Aleksiejūnas Ramūnas O51, P102
Aleksiejūnas Rimvydas P55
Alizadeh Mehdi O1
Ambrosh Markus O27
Ambrozas Marijus O40
Andrijauskas Tomas P77
Andrijec Dovilė P152
Andriukaitis Deividas P152
Andriūnas Paulius P109
Anužienė Gerda P14
Ardaravičius Linas P148
Arlouski Aliaksandr P139
Armalytė Simona P96
Asadpour Seyyed Hossein O5
Astrauskytė Darija P136, P140
Ašmontas Steponas P103, P148
Atkočaitis Erikas O26
Auksorius Egidijus K3

B

Babayigit Ceren O46, P119
Bagdonas Saulius O1, O2, O3, P19
Bagdonas Vilius O29
Bagdzevičienė Jurga P33
Bagdžiūnaitė-Litvinaitienė Lina O14, P47
Balagula Roman O52
Balčiūnas Sergejus K11, P124, P125
Balevičius Saulius P114
Balkevičius Petras O22
Balkus Oskaras P28, P29
Balodis Marius P35
Baltrukonis Justas P156
Baltrūnas Dalis P143
Baltrusaitis Kazimieras P107
Bandzevičiūtė Rimantė P12, P14
Banerjee Smaranika P45
Banevičius Dovydas K1, O34, P34
Banys Jonas P166
Banys Jūras K11, O22, P36, P49, P108, P115, P116, P117, P121, P122, P123, P124, P131, P132, P133, P134, P137
Baravykas Tomas O61
Bareikaitė Kamilė P94
Bareikaitė Rugilė P50
Barysaitė Sandra P40
Barkauskas Vytenis P167
Baronas Paulius O36
Barzda Virginijus O1
Bastakys L. P129
Bauerlin Quentin O11
Beganskienė Aldona P143
Belkin Mikhail P98
Belosludtsev Alexandr P107
Berenis Domantas O34
Berškys Justas P155
Bertašius Povilas P108
Berthomier Julien P30
Berzinš Jonas P3 (p)
Beshara Mina P98
Bialopetravičius Jonas O28
Bychanok Dzmitry P116, P130 , P139
Byčenkienė Steigvilė O47, O48, P82, P84
Bičiūnas Andrius O44, P96, P100
Bielinis Augustinas P24-1
Bočkutė Kristina O12, P128, P142
Bočkuviene Alma P28, P29
Böhm Gerhard P98
Borycki Dawid K3
Bryant Donald A. P36
Bubilaitis Vytautas P67
Buchovec Irina P50
Bučinskas Laurynas P37
Budriūnas Rimantas P165
Buivydaitė Kornelija P18

Buivydas Šarūnas P39
Bukauskas Virginijus O13, P100, P101
Buožius Danas O60
Burba Domantas P77
Burneckis Arvydas P5
Burokas Raimundas P169
But Dmytro B. O42
Butkus Laurynas P37
Butkutė Agnė O61, P152
Butkutė Renata O10, O44, O54, P96, P98, P99, P100, P101
Buzelis Rytis P51
Bužinskas Benas P87

C

Cardoso João Pedro P122
Carrere Helene O54
Cashman Frances H. P1
Castro-Gutiérrez Jimena P132
Celzard Alain P132, P134
Cesiul Albert O42
Charles Philip P36
Cheng Hung Hsiang O45
Chin Wutharath P30
Chmeliov Jevgenij K4, O4, P15, P38, P40, P64, P73
Coninx Stefan O49
Crepin-Gilbert Claudine P30

Č

Čechavičius Bronislovas O54, P96, P99, P100, P101
Čeikauskas Modestas P112
Čėnas Narimantas P42
Čeponkus Justinas P12, P14, P30, P32
Čepurnaitė Giedrė P97
Čereška Deividas P154
Čerškus Aurimas O10, P103
Čižas Vladislovas O44

D

Dabkevičienė Daiva P5
Dalmantaitė Gintarė P16
Danilevičius Rokas O57, P169
Dargys Adolfas P76
Daškevičienė Marytė P27
Daugalas Tomas O13
Daugėla Saulius P120, P145
Daugėlaitė Alėja Marija P21
Daugevičius Karolis P2
Davulienė Lina P86, P82
Delmonte Davide P122
Dementjev Andrej P60
Deveikis Algirdas P44
Devenson Jan P92, P97
Didenko Yurii P120
Diliautas Ramūnas P143
Dilys Justas P112
Diska Laurynas P28, P29
Dobilas Jorūnas P113
Dodonova Jelena O56, P94
Domonkos Ildikó O1
Dovbeshko Galina P60
Dovydaitis Vilius P141
Draukšas Simonas O39, P43
Drazdauskas Arnas O27, O29
Drazdys Mantas P136, P140
Drazdys Ramutis P136, P140
Drevinskas Tomas P152
Driukas Simonas P95
Dryžas Kasparas P54
Druteikienė Rūta P39
Dubietis Audrius P3 (p), O24, P153, P162, P168
Dūdėnas Vytautas O38, P43
Dudoitis Vadimas O47, P82
Dudutienė Evelina O10, O54, P99, P101
Dudutis Juozas K5
Dumbrė Dominykas O10
Dvylys Lukas P93
Džiaugys Andrius P123

E

Elkhatib Fatima L. P1
Elkhouly Karim P89
van der Est Art P36
Ežerinskis Žilvinas P37

F

Fedaravičius Augustinas P. P66
Feinhals Joerg O49
Fierro Vanessa P132, P134
Franukevičius Jonas P62

G

Gągor Anna K11, P124
Gaidukovs Sergej P108
Gaigalaitė Lina P83
Gaigalas Gediminas P45
Gailevičius Darius O23, O46, O58, P153, P160, P161
Gaižauskas Eugenijus O58
Gajdosik Thomas O38, P43
Galdikas Arvaidas P109
Garab Győző O1
Garankin Jevgenij O50, P85
Garbaras Andrius P37, P124
Garbarienė Inga P37, P82
Gavėnas Artūras O18
Gavrilinas Nikolajus P159
Gečys Paulius K5
Gegevičius Rokas P89
Gelžinis Andrius O4, P15, P40, P64, P73
Genevičius Kristijonas P27
Ger Marija P24
Germanas Darius O7, P85
Getautis Vytautas K13, P27
Gilio Edmondo P122
Gill Touqeer P84
Glemža Justinas P96
Gnecco Enrico P141
Golbeck John H. P36
Golubewa Lena P10, P13
Gotovski Pavel O25, P163
Gradauskas Jonas P103
Gražulevičius Juozas Vidas P93
Grybauskas Mindaugas P5
Gric Tatjana P107
Grigalaitis Robertas P125, K11, P116, P122, P124, P121
Grigaliūnas M. P129
Grigelionis Ignas O43, O44, O52
Grigutis Robertas O24, P168
Grinevičiūtė Lina O23, O46, P119
Grinys Tomas P138
Gruszka Irena P131, P133
Gudaitis Rimantas O9
Gudeika Dalius O35
Gudelis Arūnas P24-1, P83
Guirgis Gamil A. P32
Gulbinas Vidmantas P4 (plenarinis), P89, P95
Gusev Alexander P44
Gvozdaitė Rasa P39
Gvozdiovas Edvinas P79

H

Habach Fayez O1
Hamedi Hamid Reza O5, P69, P78
Haronin Vadzim P121
He Zhihui P36
Henzie Joel O11
Herrero Lars O26
Huss Alexander O37

I

Ibenskas Andrius P144
Ikamas Kęstutis O42, O44
Ilickas Mindaugas P146
Iljinas Aleksandras P147
Indrišiūnas Simonas O52
Ivanov Maksim P115
Ivaškevičiūtė-Povilauskienė Rusnė P87

Y

Yanes Tanausú Hernández P105
Yartsev A. P104
Yatsevich Olga P13
Yevych Ruslan P123

J

Jakštas Vytautas O44, P97
Jakučionis Mantas P63
Jančiukė Gintarė P20
Jankauskas Paulius P117
Jankauskas Šarūnas O9
Jankauskas Vygintas P27
Janonis Vytautas O52
Jansonas Gaudenis O26, P165
Jarockytė Greta O1, P18, P21, P22, P23, P24
Jarutis Vygandas P164
Jaselskė Evelina P8
Jasinskas Algirdas O54, P96, P98, P99, P100, P101
Javorskis Tomas O34, P34
Jegorovė Aistė P27
Jensen Lars O26
Jeschke Gunnar K11

Jia Ning O5, P69
Jočionis Lukas P99
Jokubauskaitė Monika O54, P101
Jokubauskis Domas O44, P87
Jonaukas Valdas
Jonauskas Valdas P70, O8
Jonynaitė Kamilė P16
Jonušauskas Linas O61, P152, P154
Jonušis Lukas P89
Jorudas Justinas O52
Jozeliūnaitė Augustina O33
Jukna Artūras O14, P47, P149
Jukna Vytautas O24, O25, P150, P156, P162, P163, P168
Juknevičius Pranas P73
Juodagalvis Andrius O22, O40, P43
Juodėnas Mindaugas P56
Jupé Marco O26
Jurčiukonis Darius P43
Jurgelėnė Živilė P58
Jurgutis Džiugas O56, P23
Jurkūnas Nerijus P100
Juršėnas Saulius K1, O31, O32, O34, O35, O36, P34, P90, P94
Juscenko Viktorija P11
Juzeliūnas Gediminas O5, P69, P77, P78, P79, P105

K

Kadys Arūnas P138
Kainbayev Nursultan P128
Kalendra Vidmantas K11, P36, P49
Kaliasas Remigijus P147
Kalinauskas Ramutis Kazys O7
Kalnaitytė Agnė O1, O2
Kamarauskas Andrius P88
Kamarauskas Egidijus P27
Kamarauskas Mindaugas P96
Kaminskas Marius O12, P142
Kancleris Žilvinas P52, P88, P91
Kandrotaitė Kamilė O47
Kandrotas Gintautas P83
Kania Antoni P131
Karabanovas Vitalijus O1, O56, P18, P21, P22, P23, P24, P58
Karaliūnas Mindaugas O10
Karazija Romualdas P5 (plenarinis)
Kareiva Aivaras P143
Kareivaitė Gabrielė P118
Karoblis Dovydas P143
Karpicz Renata P10, P13, P118
Karpuškienė Rasa P1
Kašalynas Irmantas O43, O52
Kaškonienė Vilma P152
Katelnikovas Artūras P127
Kato Daiji P45
Kaulakys Bronislovas P74
Kaupinis Algirdas P24
Kaupuzs Jevgenijs O45
Kavaliukė Vilma P111
Kavaliūnas Vytautas P142
Kazakevičius Aivaras O57
Kazakevičius Edvardas P41
Kazakevičius Rytis P74
Kazakevičiūtė-Jakučiūnienė Laima P39
Kazlauskaitė Monika O28
Kazlauskas Karolis K1, O31, O32, O33, O34, O35, P34
Kazlauskienė Nijolė P58
Keller Marc O11
Keraitytė Silvija P100
Keršulis Skirmantas P114
Keruckienė Rasa P93
Kėželis R. P129
Kežionis Algimantas P41, P111, P120
Khinevich Nadzeya P57
Kičas Simonas P151
Kiedrowski Kevin O26
Kiligaridis A. P104
Kimbaraitė Urtė O26
Kimtys Liudvikas P6 (plenarinis)
Kynienė Aušra O14, O15, P47, P70
Kinka Martynas K11, P124, P125
Kiprijanovič Oleg P148
Kirova Teodora O5, P26
Kisielius Romas P1
Kisnierienė Vilma O3
Kišonas Juras P5
Kizevičius Paulius P150
Kjeldsen Hans K9
Klinavičius Tomas P72
Klioštoraitis Rokas P34
Knap Wojciech O42
Kodz Jaroslav P159
Kołaciński Cezary O42
Kolenda Marek P138
Koliada Mykola P114
Komskis Regimantas O36
Kononovicius Aleksejus P74

Konstantinova Marina O49, P85
Kontenis Gabrielius P154, P160
Kontenis Lukas P3 (p), O1, O59
Koperski Janusz P131, P133
Korjik Mikhail O41
Kornyšova Olga P152
Kotsilkova Rumiana P130
Kozielski Lucjan P117
Kozlovskis Erminas P157
Kreiza Gediminas K1, O34, P34
Kriščiūnas Eimantas P4
Krotkus Arūnas O55
Ksenevich Vitaly P116
Kubicki Dominik P49
Kučiauskas Dalius P24
Kudlash Alexander P116
Kudrevičius Tomas P115
Kudriašov Viačeslav P69
Kulahava Tatsiana P10, P13
Kuliešaitė Miglė P164
Kulkarni Varsha P. P1
Kuokštis Edmundas O21
Kurkela Aleksi O37
Kushniarou Uladzislau P139
Kuzhir Polina P10, P13, P115, P116, P130 , P132

L

Lagzdina Elena O49, P85
Lakshmi K.V. P36
Lapeikaitė Indrė O3
Lapko Konstantin P116
Lastauskienė Eglė P14
Laukaitis Giedrius O12, O22, P128, P142
Laurikaitienė Jurgita P8
Laurinavičius Klemensas P155
Laužikas Martynas P3
Lazauskaitė Romualda O14, P47
Lėckaitė Dalia O14, P47
Lee Kuo-Chih O45
Lengvinaitė Dovilė P25
Liedienov Nikita P120
Lymarenko Ruslan O23
Lingis Danielius P85
Lisauskas Alvydas O42
Litvinas Džiugas P104
Liubetski Nikalai P139
Liżewski Kamil K3
Lozovski Tadeuš P110
Lujanienė Galina P80
Lukošė Rasuolė P114
Lukošiūnas Ignas P161
Lukša Algimantas O13

M

Maceika Evaldas P39
Maciulevičius Martynas P7
Mackevičiūtė Miglė K5
Mackoit-Sinkevičienė Mažena O22, P105
Macutkevic Jan P131, P132, P133, P134, P108, P116, P137
Mączka Miroslaw K11, P49, P124
Mačernis Mindaugas O6, P28, P29, P31, P62, P65, P118
Mačiulis Nerijus P116
Maldžius Robertas P110
Maleckaitė Karolina O56
Malevich Vitaly Leonidovich O55
Malinauskas Albertas K2
Malinauskas Mangirdas P3 (p), O59
Malinauskas Tadas O45, P126, P138
Mandl Martin P126
Marcinauskas L. P129
Marcinauskas Liutauras P141
Marčiulionytė Vaida P162
Martinaitis Saulius Jonas O16, P46
Marudinas Valerijus P147
Maruška Audrius P152
Masalskyi Oleksandr P103
Masys Šarūnas O8
Matkovič S. P129
Matukas Jonas P96, P137
Matulis Algirdas P75
Mazeliauskas Aleksas O37
Mazuronytė Martyna P90
Mažeika Kęstutis P143
Medulych Mihail P123
Medvids Arturs O45
Meisak Darya P130
Mekys Algirdas O45
Melnikas Simas P151
Melninkaitis Andrius O26
Melo Wanessa P11
Meškėlaitė Indrė O23
Meškinis Šarūnas O9
Michailovas Andrejus O57, P169

Michailovas Kirilas P169
Mickevičius Jūras P102
Mickevičius Saulius O7
Mickus Rokas P20
Mikalčiūtė Austėja O4
Mykolaitis Jaunius P56
Mikolaitis Šarūnas O29
Mimura Hidenori P142
Minderytė Agnė O48, P82
Minkevičius Linas K8, O43, O44, P87
Minkevičiūtė Renata O29
Molak Andrzej P133
Mordas Genrik P106
Morkvėnas Augustas P58
Motiejūnas Benas O60
Mougin Karine O11
Mundrys Karolis P158

N

Nacius Ernestas P150, P163
Naimovičius Lukas O32, O33
Nargelas Saulius O41, O51
Naujokaitis Arnas P100
Navickaitė Aušrinė O3, P19
Navickaitė Diana P7
Navickas Marius O24, P168
Neimantaitė Ieva P33
Nemickas Gedvinas P154
Nevinskas Ignas O55
Niaura Gediminas K2
Nikitina Julianija O46, P119
Nomeika Kazimieras O51
Norkus Ričardas O55
Norkus Skirmantas P135
Norkutė Ugnė P51
Novelskaitė Aurelija O19

O

Onufrijevs Pavels O45
Orentas Edvinas O32, O33, O34, P34
Orliukas Antanas Feliksas P145
Orlovas Sergejus O25, P54, P150, P155, P156, P157, P158, P163
Ovsianikov Aleksandr K7

P

Paatelainen Risto O37
Pabedinskas Algirdas P37
Pačebutas Vaidas O55
Paddubskaya Alesia P60
Padrez Yaraslau P13, P139
Palaimienė Edita P48, P131, P132, P133, P134
Palepšienė Rūta P7
Palevičius Paulius O12, P142
Palinauskas Delianas P71, P120, O52, P82, P78, P122
Pashchenko Aleksey P120
Pashnev Daniil O52
Pashneva Daria P82
Paspalakis Emmanuel P78
Paukšta Vaidotas P122
Pauraitė Julija P82, P84
Peckus Domantas O11
Peckus Martynas O23, O46
Petrikaitė Vita P59
Pimpė Jokūbas P164
Pipiras Jokūbas K5
Pyragas Kęstutis P66, P68
Pyragas Viktoras P68
Pyragienė Tatjana P66
Platakytė Rasa P30, P32
Plaušinaitienė Valentina P112, P114, P115
Plauškaitė-Šukienė Kristina O47, P82, P84
Plečkaitis Marijus O1
Plečkaitytė Gintarė P145
Plyushch Artyom P115, P116, P130
Płodzień Marcin P105
Plukienė Rita O49, P85
Plukis Artūras O49, O50, P85, P167
Plūkys Matas O58
Poderys Vilius P18, P21, P22
Podlipskas Žydrūnas O51
Pope Francis O47
Pöppl Andreas K11
Pralgauskaitė Sandra O19, P96, P137
Puišo Judita K10, P9
Pūkienė Simona O10, P96, P99, P100
Pukinskas Arnas P100
Pupkis Vilmantas O3, P19

Q

Qi Liang O43
Qian Jing O5, P69
Qiu Weiming P89

R

Račiukaitis Gediminas P1 (plenarinis), K5, P91
Račiūnas Mantas P77
Račkauskas Povilas P79
Radiunas Edvinas O32, O33, P138
Radžiūtė Laima P45
Ragulis Paulius P52, P91
Ragulskis Minvydas O12, P142
Raišys Steponas O31, O32
Rajagopal Joshya Shyamala O54
Ramalis Lukas P51, P151
Ramanauskas Ruslanas P147
Rancova Olga O22
Rankelytė Gabrielė P38
Rapolu Mounika K3
Raškevičius Vytautas P20
Ratautas Karolis P91
Regelskis Kęstutis P159
Reklaitis Ignas P126
Reklaitis Jonas P167
Remeikis Vidmantas O22, P37, P85
Rimkus Lukas P3 (p), P167
Rinkevičius Žilvinas O8, O12, P142
Rynkun Pavel P45
Ritasalo Riina P126, P138
Rodin Aleksej P103
Rotomskis Ričardas O1, P5, P18, P21, P22, P23, P24
Rudys Saulius P55
Rudokas Vakaris P113
Ruseckas Julius P78
Rutkauskas Danielis P10, P13, P95
Rutkūnienė Živilė O22
Ruzgys Paulius P7

S

Sadauskas Aidas O17
Salak Andrei N. P122
Samsonas Danielius O59
Samulionis Vytautas P124
Sanda Dominykas O54
Sartanavičius Aivaras P56
Savidou Anastasia O49
Schaefer Sebastien P132, P134
Scheblykin I. P104
Schee Wilkevander O37
Sebestinaite Laura O59
Seliuta Dalius P88
Selskis Algirdas P115, P116, P121
Semenkova Galina P13
Sereikaitė Jolanta P28, P29
Serevičius Tomas K1, O35
Shahidi Alireza P106
Shieh F.-K. P125
Sycheva Valentina P120
Sidaravičius Jonas P110
Sieradzki Adam K11, P124
Simaz Andrea P98
Simenas Mantas P124
Simniškis Rimantas P52, P91
Sirutkaitis Valdas O61, P107
Sytchkova Anna P107
Skaisgiris Rokas K1, O35, P94
Skapas Martynas O54, P59, P100, P138
Skeberdis Vytenis Arvydas P20
Skliutas Edvinas O59
Skorulskienė Rigonda O22
Skovorodko Kirill P24-1
Skripka Artiom P21, P24
Smalakys Linas O26
Smalinskė Ernesta O14, P47
Sobolewski Roman P149
Sokal Aliaksei P116
Solovjovas A. P125
Spangenberg Arnaud O11
Spielman Ian P77
Sriubas Mantas O12, O22, P128, P142
Staišiūnas Laurynas P88
Staliūnas Kęstutis P2 (plenarinis), O23, O24, O46, O58, P119, P153, P160, P161
Stančikas Jokūbas O61
Stanelis Vilius P106
Stanionytė Gabrielė P170
Stanionytė Sandra O54, P126, P138
Stankevič Valdemar K5
Stankevič Voitech P112, P113, P114
Stankevičius Evaldas P59, P61
Stankevičius Mantas P152
Stašys Karolis P92, P97

Steinbach Gábor O1
Steinecke Morten O26
Steiner Gerald P12
Steponavičiūtė Ada P106
Stepšys Augustinas O7
Stirkė Arūnas P11
Stocka Joanna P32
Stonkutė Edita O29
Stonkutė Rima P2
Strassburg Martin P126
Streckaitė Simona P15
Strizak Peter O47
Subačius Liudvikas O52
Supranovič Anastasija P127
Sužiedėlis Algirdas P103
Svirskas Šarūnas K11, P115, P117, P121, P124

Š

Šablinskas Valdas P12, P32, P35
Šalkus Tomas P111, P120, P145
Šapolaitė Justina P37
Šatkauskas Saulius P7
Šatkovskienė Dalia O20
Ščajev Patrik O45, P90
Ščiuka Mindaugas O26
Šemčiuk Sergej P58
Šetkus Arūnas O13
Šilėnas Aldis P103
Šimėnas Mantas K11, P49
Šlekas Gediminas P88, P91
Ševas Paulius O25, P157
Šulskus Juozas O22, P62, P64
Šuopys Airingas P53
Švigelj Andrej O43

T

Taeger Sebastian P126
Tamoliūnas Kazimieras P64
Tamošauskas Gintaras O24, P162, P168
Tamošiūnaitė Justė P15
Tamulaitis Gintautas O41, O51
Tamulevičienė Asta P56, P57
Tamulevičius Sigitas K12, O11, P57
Tamulevičius Tomas K6, O11, P56, P72
Tamulienė Jelena O22, P26, P42
Tamulienė Viktorija O60, P170
Tanaka Masaomi P45
Tankelevičiūtė Eglė O36
Taranenko Victor O23
Tarasiuk Nikolaj P39
Tartėnas Matas O30
Tatarchuk Dmitrii P120
Tauraitė Laura P54
Tautvaišienė Gražina O22, O27, O29
Teske Christian P12
Tmulevičienė Asta O9
Toleikis Algirdas P6
Tolenis Tomas O46, P51, P151
Toliautas Stepas O56, P71
Tomašiūnas Roland P126, P138
Tomczewski Slawomir K3
Tornau Evaldas P144
Treideris Marius O44
Tretjak Marina P137
Trinkūnas Gediminas P17
Trontelj Janez O43
Trusovas Romualdas P91
Tumėnas Laurynas P135
Tumkevičius Sigitas O56, P94

U

Udal Andres O10
Ulčinas Orestas O25, P163, P169
Ulevicius Salvijus O59
Uogintė Ieva O47
Urba Andriejus P81
Urbanowicz Andrzej O43
Urbas Antanas O25, P54
Urbonavičius Benas Gabrielis P8
Urbonienė Vidita O15, P48
Uscila Rolandas P53
Usevičius Gediminas P49

V

Vagner Milita P113, P114
Vaičaitis Virgilijus O60
Vaitkevičius Augustas O41
Vaitkevičius Vytenis P34
Vaitkus Juozas Vidmantis O22
Valiukevičiūtė Džiugilė P9
Valiulis Darius P81
Valius Mindaugas P24
Valkiūnaitė Elena P102

Valkūnas Leonas P65, P15, P40, P118
Valušis Gintaras O10, O22, O43, O54, P101
van der Est Art P36
Vansevičius Vladas P2, P4
Varanavičius Arūnas O26, P165
Vargalis Rokas P152, P154
Varnauskas M. P125
Vasiliauskas Andrius O9
Vázquez Carlos Viscasillas O29
Vengelis Julius P164, P166, P170
Vengris Mikas P3 (plenarinis), O59, P167
Venius Jonas P5
Vetrone Fiorenzo P21, P24
Vidal Loic O11
Vilčiauskas Linas P145
Vilkevičius Kernius P61
Vinciūnas Ligitas P65
Vinitsky Sergue P44
Virbukas Darius P128
Vysochanskii Yulian P123
Vyšniauskas Aurimas O56, P23
Vitaliy Romanenko P80
Vitta Pranciškus O53, P127
Vladimirskaja Tatyana P13
Voronovič Evelina P24

W

Walsh Aron K11
Węgrzyn Piotr K3
Winiarski Antoni P133
Witkowska Emilia P105
Wojtkowski Maciej K3

Z

Zabiliūtė-Karaliūnė Akvilė O53, P127
Zakutauskaitė Kristina P31
Zamaraitė Ilona P123
Zaukevičius Audrius O57
Zelioli Andrea P99
Zhairabany Hassan P141
Zharchenko Ihor P103
Ziaziulia Pavel Aliaksandravich O55
Zubovas Kastytis O17, O28, O30, P3

Ž

Želudevičius Julijanas P159
Žemaitis Arnas P154
Žemgulytė Justina P52
Žičkienė Ieva K3
Žilėnaitė Rugilė O56
Žlabys Giedrius P78, P105
Žukauskaitė Zita P39
Žurauskienė Nerija P112, P113, P114
Žutautaitė Emilija O26

BAIGIAMASIS ŽODIS

Norėčiau nuoširdžiai padėkoti **visiems** šį renginį kūrusiems ir organizavusiems, įdėjusiems čia savo laiką, energiją ir dalelę savęs.

Ypač noriu padėkoti autoriams už jų entuziastingus pranešimus,
Už kūrybines kibirkštis, kurios čia žėrėjo,
Ir tą ypatingą fizikos aurą, kuri čia sklandė.

Labai ačiū Organizaciniam komitetui už nuveiktą didelį darbą, o ypač **Renatai Butkutei** ir **Mildai Tamošiūnaitei-Survilienei** už milžiniškas ir nuoširdžias veiklas tam, kad renginys būtų organizaciškai sklandus ir informatiškai tikslus.

Dėkoju **Rūtai Stalionytei** už išsamius tekstus apie konferencijos darbą bei **Ovidijui Žaliui** ir **Domui Jokubauskiui** – už kruopštų transliacijos internetu organizavimą.

Nuoširdus ačiū visiems **savanoriams** ir kitiems **Geros Valios** žmonėms prie šio renginio prisidėjusiems.

Konferencija nudžiugino ne tik dalyvių gausa – pasidalinome žiniomis ir patirtimi, tapome bent truputėlį daugiau žinantys – pakylėjome save virš kasdienybės, kad įkvėpti naujų mokslo žinių ir kūrybinio polėkio, galėtume grįžti į savo laboratorijas naujų rezultatų paieškai.

Ačiū labai Jums visiems!

45-toji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija įvyks 2023-aisiais metais, o jos organizacinė estafetė perduodama Vilniaus universitetui.



Nuotrauka E. Blaževič (LRT.lt)

Gintaras Valušis,
LNFK 44 Programos komiteto pirmininkas

Organizatoriai:

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

VILNIAUS UNIVERSITETAS 1579 UNIVERSITAS VILNENSIS

ktu kauno technologijos universitetas 1922

VILNIUS TECH Vilniaus Gedimino technikos universitetas

LITHUANIAE ACADEMIA SCIENTIARUM

Rėmėjai:

EPS Young Minds

BROLIS

inospectra

MONO SPEKTRA

LIETUVOS LAZERIŲ ASOCIACIJA

LIGHT CONVERSION

EKSPLA

QS LASERS

TELTONIKA

SCIENCE AND TECHNOLOGY PARK

VILDoma

3photon

Draugai

Go Vilnius



http://lnfk.ftmc.lt